



INSTITUTO DE ASTROFÍSICA DE ANDALUCÍA,  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA APLICADA,  
UNIVERSIDAD DE GRANADA

PROGRAMA OFICIAL DE POSGRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**Tesis doctoral**

Noviembre 2012

# Modelo termofísico de transporte de masa y energía en medios porosos helados:

## Evolución de núcleos cometarios

**Marta González García**

*Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC)*

Directores de tesis:

**Dr. Pedro José Gutiérrez Buenestado**

**Dra. Luisa María Lara López**

Editor: Editorial de la Universidad de Granada  
Autor: María González García  
D.L.: GR 1703-2013  
ISBN: 978-84-9028-573-2



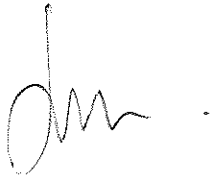
Pedro José Gutiérrez Buenestado, científico titular del CSIC en el Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC) y Luisa María Lara López, investigadora científica del CSIC en el Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC),

CERTIFICAN:

Que la presente memoria " Modelo termofísico de transporte de masa y energía en medios porosos helados: Evolución de núcleos cometarios" se ha realizado bajo nuestra dirección por Marta González Gracia, en el Instituto de Astrofísica de Andalucía (CSIC) y constituye su tesis para optar al grado de Doctor. Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente, presentamos ante la Comisión de Doctorado de la Universidad de Granada la referida tesis.

Granada, a 07 de Noviembre de 2012

Director/es de la Tesis

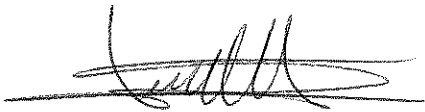


Fdo.: Pedro J. Gutiérrez Buenestado

Doctorando



Fdo.: Marta González Gracia

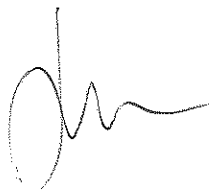


Fdo.: Luisa María Lara López

El doctorando Marta González García y los directores de la tesis Pedro José Gutiérrez Buenestado y Luisa María Lara López garantizamos, al firmar esta tesis doctoral, que el trabajo ha sido realizado por el doctorando bajo la dirección de los directores de la tesis y hasta donde nuestro conocimiento alcanza, en la realización del trabajo, se han respetado los derechos de otros autores a ser citados, cuando se han utilizado sus resultados o publicaciones.

Granada, a 07 de Noviembre de 2012

Director/es de la Tesis

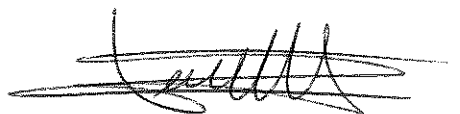


Fdo.: Pedro J. Gutiérrez Buenestado

Doctorando



Fdo.: Marta González García

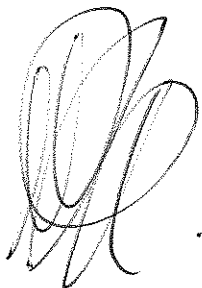


Fdo.: Luisa María Lara López

“ Modelo termofísico de transporte de masa y energía en medios porosos helados:  
Evolución de núcleos cometarios”

El presente trabajo se ha realizado en el Instituto de Astrofísica de Andalucía-CSIC, bajo la dirección de los doctores Pedro José Gutiérrez Buenestado y Luisa María Lara López.

Granada, 07 de Noviembre de 2012

A handwritten signature in black ink, consisting of several overlapping loops and curves, positioned above the printed name.

Fdo. Marta González García.

## Agradecimientos

Ahora, después de todo este trabajo hecho, llego aquí y no sé que decir. Siendo sincera, me gustaría saltarme esta parte o simplemente soltar una de esas frases superinteligentes incluyendo a todo el mundo y escaquearme, pero me temo que no soy lo suficientemente creativa, así que voy a tener que ir por orden y esperemos que no me salte a nadie ni me gane alguna enemistad.

Evidentemente, sin la ayuda y el apoyo de mis directores de tesis esta memoria no estaría aquí. En particular, Pedro, soy consciente de que has tenido que poner mucha ilusión y paciencia en esto aunque sólo fuera para soportarme cuando las cosas no salían, me estaba dando cabezazos contra el teclado y odiaba a la humanidad (y también a algunos animales). Gracias.

El IAA es un sitio muy agradable para trabajar, y la razón principal de esto es que la mayoría de la gente allí suele ser tremendamente amable y tener siempre una risa (o como mínimo una sonrisa) preparada para soltarla cuando se encuentra con una. Son tantos que no los puedo mencionar a todos, pero espero que se den por aludidos con esta frase. Además de la gente en general, gracias a ¿Dios?, he hecho bastantes amigos allí. Tengo a Silbi que se preocupa de que coma suficientes solomillos y beba buen pacharán, a mis nietecillos a los que ahora mismo haría un bocadillo, y a Darío y Alba, con los que comparto adicciones y salgo a fumar y tomar café (o tila, o valeriana, depende de lo loca que esté ese día). Y que no se me olvide Isa, que, cual Virgilio, me guía a través de los sucesivos círculos de la burocracia de tesis. También hay cierta gente que me consta que trabaja en el IAA y considero amigos pero no veo casi nunca en el trabajo, como Gorosable (no es un error tipográfico) o Ale. Eso es porque no me vienen a buscar. También Inmica y Belén, a las que veía lo mismo cuando curraban aquí que ahora. Y Juandepeich, que cruzas el charco como el que va a Motril. Finalmente, no puedo hablar del instituto sin decir que también hay un ángel de la guarda que vive allí y se aparece fumando a los becarios que trabajan por las noches y provee de pastitas y otras viandas a estas pobres almas en pena.

Hay una serie de personas que conocí en el IAA pero, Oh, cruel vida científica!, ya no están por aquí. Vicentín, Rabinone, Maras, Pelusoide, Antoniã, Paquillo, Amparini, Gabis, Charly... Y Dani, que pertenece a esa extraña categoría de gente que a 10.000 km está presente en el día a día. Todo va bien, pero esto no es lo mismo sin vosotros. Es peor.

Afortunadamente, en Granada hay más cosas que el Instituto de Astrofísica: También hay bares. Y en esos bares hay gente que despeja un poco de tanto instituto y tanto físico. Entre todos ellos Susan es la mejor, sin dudarlo, lo siento por el resto. Y no sólo está en bares, a veces viene a casa!

Además, el mundo está lleno de vigueses mitiquérrimos que hacen de él un lugar mejor y que yo tengo el honor de conocer. Voy a hacer una pequeña enumeración sin orden ni concierto porque no está bien que los agradecimientos ocupen más

que las conclusiones. Gaelone, Peri, Dids, Luitas, Nino, Berts, Berni (& family!), Luchín, Chooooooooooooor, Neguín, Urre, Parreño, Renton, Freeman, Abad, Xavi, Toné... Y pido un par de comodines, porque estoy segura de que me dejo a alguno. Moláis un montón y, a pesar de lo poco que nos vemos, con vosotros estoy en casa.

Y, desde luego, familia. Sin vosotros, ya no es sólo que no pueda hacer nada, es que no merece la pena. No os puedo decir nada más que que os quiero. Bueno, y que no sigáis leyendo, el resto os va a parecer un coñazo.



## Resumen

Esta memoria de tesis presenta nuestro modelo termofísico de transporte de masa y energía en medios porosos helados así como su aplicación al estudio de la evolución de los núcleos cometarios. Estos cuerpos, a pesar de haber sido muy estudiados a lo largo de la historia, presentan todavía ciertas incertidumbres cuyo estudio nos puede aportar información importante acerca nuestro Sistema Solar. Los modelos para núcleos cometarios constituyen, pues, una herramienta que nos ayudará a acotar la incertidumbre en algunas de las magnitudes básicas de estos cuerpos.

En primer lugar, en el capítulo de introducción haremos una descripción del contexto astrofísico en el que se encuadra nuestro estudio así como de la motivación y objetivos de este trabajo. A continuación, describiremos el sistema termofísico cuya resolución nos permitirá simular el comportamiento de los núcleos cometarios, discutiendo las aproximaciones utilizadas para implementarlo en un código numérico suficientemente eficiente.

El tercer capítulo contiene una primera aplicación de nuestro modelo en condiciones idealizadas, que nos servirá como calibración de la relevancia de alguna de las hipótesis que utilizamos. Además, en él presentaremos un resultado que hemos obtenido inesperadamente que puede ser de gran interés en el estudio de la evolución termofísica cometaria: La posible evolución del frente de cristalización en rachas cuasiperiódicas.

Los capítulos cuarto y quinto presentan ya las aplicaciones de nuestro modelo a la simulación realista de cometas y evalúan la capacidad del mismo para reproducir el comportamiento observado de los cometas 29P/Schwassman-Wachmann 1 y Hale-Bopp. Hemos escogido estos dos cometas, de características muy distintas, para comprobar las diferentes capacidades de nuestro modelo. El estudio de 29P/Schwassman-Wachmann 1 nos servirá como continuación del presentado en el tercer capítulo en condiciones realistas. Trataremos la posibilidad de que la gran cantidad de explosiones de actividad detectadas en este objeto estén asociadas a las rachas de la velocidad de cristalización. En el caso de Hale-Bopp, en cambio, la gran cantidad y la calidad de datos observacionales disponibles nos permiten intentar reproducir simultáneamente las curvas de producción para los dos volátiles más abundantes en cometas, agua y monóxido de carbono.

Finalmente, en el sexto capítulo compilaremos las conclusiones generales de este trabajo y las posibles líneas de trabajo futuro que se nos plantean actualmente.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. Generalidades . . . . .	5
1.1.1. Descripción general de los hielos y su comportamiento . . .	5
1.1.2. Breve historia del Sistema Solar . . . . .	8
1.1.3. Hielos en el Sistema Solar . . . . .	9
1.1.3.1. Sistema Solar Interno . . . . .	10
1.1.3.2. Cinturón de Asteroides . . . . .	11
1.1.3.3. Zona de los Gigantes Helados o Gaseosos . . . . .	12
1.1.3.4. Objetos Transneptunianos . . . . .	17
1.1.3.5. Importancia de los cometas, como cuerpos helados, en el estudio del Sistema Solar . . . . .	18
1.2. Cometas . . . . .	19
1.2.1. Algunos hitos en la comprensión de la naturaleza cometaria. Definición de cometa . . . . .	20
1.2.2. Dinámica y clasificación . . . . .	24
1.2.2.1. Clasificación clásica . . . . .	24
1.2.2.2. Nueva clasificación . . . . .	28
1.3. La naturaleza cometaria: algunas cuestiones abiertas. . . . .	29
1.3.1. Formación y estructura cometarias . . . . .	30
1.3.1.1. Temperaturas: Formación . . . . .	30
1.3.1.2. Densidades: Estructura. . . . .	32
1.3.2. Composición cometaria . . . . .	35
1.3.2.1. Diversidad composicional . . . . .	37
1.3.2.2. Razón polvo-hielo . . . . .	39
1.3.3. Actividad cometaria . . . . .	40
1.3.3.1. Mantos de polvo, zonas activas. . . . .	44
1.3.3.2. Producción simultánea. Amorfo o Clatratos. . . . .	47
1.3.3.3. Explosiones de actividad . . . . .	51
1.3.4. Magnitudes térmicas . . . . .	54
1.4. La misión Rosetta. . . . .	56
1.5. Motivación para realizar esta memoria. Objetivos. . . . .	58

<b>2. Descripción del modelo Termofísico</b>	<b>63</b>
2.1. El papel de los modelos	63
2.1.1. Modelizado de sistemas porosos helados	64
2.1.2. Características generales de nuestro modelo	65
2.2. Hipótesis físicas	67
2.2.1. Conceptos básicos	67
2.2.2. Ausencia de fase líquida	70
2.2.3. El sistema está en equilibrio térmico local	71
2.2.4. Hielo amorfo	72
2.2.4.1. Fases del hielo amorfo	72
2.2.4.2. Cristalización	73
2.2.4.3. Hielo amorfo de agua con impurezas	75
2.2.5. El vapor puede fluir a través del sistema de poros	77
2.2.5.1. Consideraciones generales sobre el flujo de masa	77
2.2.5.2. Régimen de flujo	78
2.2.6. Estructura microscópica del medio	80
2.2.7. Sublimación y producción de gas	82
2.2.7.1. Sublimación y condensación	82
2.2.7.2. Densidades de saturación	84
2.2.7.3. Producción total de gas	85
2.2.8. Tratamiento del polvo	86
2.2.9. Erosión y geometría	89
2.2.9.1. Parametrización de la erosión	89
2.2.9.2. El problema geométrico	90
2.2.10. Ecuación de la masa	92
2.2.11. Transporte de energía	94
2.2.12. Ecuación de la energía	96
2.2.13. Condiciones de contorno	97
2.3. Cálculo numérico	98
2.3.1. Trataremos un sistema unidimensional y planoparalelo	99
2.3.2. Funcionamiento global del modelo: Descripción del programa y diagrama de flujo	100
2.3.3. Mallado espacial y resolución temporal	102
2.4. Parámetros	104
2.4.1. Parámetros materiales	104
2.4.2. Parámetros cometarios	104
2.4.2.1. Energía liberada en la cristalización	105
2.4.3. Condiciones Iniciales	107
2.4.4. Parámetros numéricos	107
2.5. Pruebas realizadas sobre el funcionamiento del modelo numérico	108

<b>3. Aplicación: Estudio sistemático de la cristalización</b>	<b>111</b>
3.1. Objetivos y metodología . . . . .	111
3.2. Suposiciones adicionales al modelo general . . . . .	112
3.3. Parámetros y condiciones iniciales . . . . .	113
3.4. Resultados y discusión . . . . .	117
3.4.1. Velocidad local de cristalización . . . . .	117
3.4.1.1. Descripción . . . . .	117
3.4.1.2. Discusión . . . . .	117
3.4.2. Velocidad media de cristalización . . . . .	127
3.4.2.1. Descripción . . . . .	127
3.4.2.2. Discusión . . . . .	128
3.5. Conclusiones . . . . .	136
<b>4. Aplicación del modelo al cometa 29P/Schwassman-Wachmann</b>	<b>1140</b>
4.1. Introducción . . . . .	140
4.2. Motivación para realizar este estudio . . . . .	143
4.3. Actividad de 29P . . . . .	143
4.3.1. Explosiones de actividad . . . . .	146
4.4. Modelos relacionados . . . . .	149
4.5. Parámetros termofísicos y características específicas del modelo utilizado . . . . .	153
4.5.1. Tamaño y albedo de 29P/SW 1 . . . . .	153
4.5.2. Parámetros rotacionales . . . . .	154
4.5.3. Composición . . . . .	155
4.5.4. Parámetros térmicos . . . . .	157
4.5.4.1. Conductividad térmica . . . . .	157
4.5.4.2. Presiones de saturación, calores específicos y calores latentes. . . . .	158
4.5.4.3. Energía liberada en la cristalización . . . . .	159
4.5.4.4. Densidades y porosidad . . . . .	160
4.6. Principales diferencias con el modelo de Enzian et al. (1997) . . . . .	161
4.6.1. Producción de polvo y erosión . . . . .	161
4.6.2. Efectos transitorios rápidos . . . . .	162
4.6.3. Difusión del gas . . . . .	164
4.7. Estrategia y simulaciones realizadas . . . . .	164
4.8. Resultados de las simulaciones . . . . .	166
4.8.1. Primera aproximación: ¿Puede el hielo ser cristalino? . . . . .	166
4.8.2. El caso nominal . . . . .	170
4.9. Efecto del aumento de la inercia térmica global . . . . .	180
4.10. Efecto de la razón polvo-hielo . . . . .	182
4.11. Razón polvo-hielo baja e inercia térmica alta . . . . .	184
4.12. Otras magnitudes . . . . .	192
4.12.1. Efecto de la densidad . . . . .	192
4.12.2. Reducción del monóxido de carbono atrapado. . . . .	195

4.12.3. Energía liberada en la cristalización. . . . .	196
4.13. Resumen de los principales resultados y conclusiones . . . . .	198
<b>5. Aplicación del modelo al cometa Hale-Bopp</b>	<b>200</b>
5.1. Contexto y motivación . . . . .	200
5.1.1. El cometa Hale-Bopp . . . . .	200
5.1.1.1. Características orbitales . . . . .	201
5.1.1.2. Composición . . . . .	202
5.1.1.3. Polvo: Eficiencia, distribución de tamaños y com- posición . . . . .	204
5.1.1.4. Estado rotacional . . . . .	206
5.1.1.5. Actividad, chorros y morfología de la coma . . . . .	207
5.1.1.6. Núcleo . . . . .	207
5.1.1.7. Estimaciones de las distintas producciones . . . . .	208
5.1.2. Modelos Previos . . . . .	212
5.1.3. Motivación . . . . .	217
5.1.4. Metodología . . . . .	219
5.1.5. Suposiciones adicionales al modelo general . . . . .	222
5.2. Resultados . . . . .	223
5.2.1. Modelo de referencia . . . . .	223
5.2.1.1. Comportamiento general . . . . .	224
5.2.1.2. Evolución espacio-temporal del comportamiento del modelo de referencia . . . . .	231
5.2.2. Efectos de variaciones en las diferentes magnitudes . . . . .	241
5.2.2.1. Inercia térmica . . . . .	241
5.2.2.2. Distribución de polvo. Eficiencia . . . . .	242
5.2.2.3. Razón polvo-hielo . . . . .	244
5.2.2.4. Estado del hielo . . . . .	246
5.2.2.5. Cantidad de monóxido de carbono atrapado . . . . .	246
5.2.2.6. Energía liberada en la cristalización . . . . .	249
5.3. Resumen y conclusiones . . . . .	251
<b>6. Trabajo futuro. Resumen de los principales resultados y conclu- siones generales.</b>	<b>253</b>
6.1. Trabajo futuro . . . . .	253
6.2. Resumen de la memoria y conclusiones generales . . . . .	257

# Capítulo 1

## Introducción

A lo largo de este capítulo describiremos el marco en el cual se desarrolla nuestro estudio. Para ello, comenzaremos con unas cuestiones generales que nos aclararán la importancia de los cuerpos helados del Sistema Solar. Continuaremos describiendo lo que conocemos acerca de los cometas (objeto que modelizaremos) y, lo más importante, algunas de las cuestiones que están abiertas en este campo hoy en día.

### 1.1. Generalidades

Con este trabajo de tesis pretendemos avanzar en la comprensión de los procesos termofísicos que tienen lugar en los cometas que, definidos de un modo general, serían sistemas o medios porosos helados de nuestro Sistema Solar. Por ello, quizás lo primero que debemos hacer en esta memoria a modo de introducción es presentar al principal elemento de nuestro estudio, los hielos, así como describir su ubicuidad e importancia dentro del Sistema Solar. Terminaremos nuestro recorrido por los hielos del Sistema Solar por los cometas. Describiremos más detalladamente parte del conocimiento que tenemos sobre estos objetos, planteando algunos de los problemas abiertos y la motivación que nos ha llevado a realizar este trabajo.

#### 1.1.1. Descripción general de los hielos y su comportamiento

Nos centraremos principalmente en el hielo de agua ya que, como veremos, es prácticamente ubicuo entre los volátiles del Sistema Solar y es el componente helado principal de los núcleos cometarios. Los hielos de otros componentes, aunque menos abundantes, juegan también un papel muy importante como trazadores así que también serán descritos.

El agua exhibe en muchos aspectos un comportamiento especial como, por ejemplo, ser un disolvente prácticamente universal o que la mayoría de sus formas heladas sean menos densas que la líquida. Al ser un material habitual cuyos tres estados básicos (hielo, agua y vapor) aparecen a temperaturas fáciles de alcanzar

es, con diferencia, el mejor estudiado y es el material volátil del que conocemos más fases sólidas. La mayoría de ellas son cristalinas, refiriéndonos con ello a que sus moléculas están ordenadas en forma de red a través de puentes de hidrógeno.

En la Fig. 1.1 se puede ver el diagrama de fases del agua, en el que aparecen representadas las zonas de estabilidad de algunas de las fases cristalinas del agua, así como la líquida y la gaseosa. Las líneas que aparecen en el diagrama, líneas de fase, representan fronteras entre fases, de modo que al traspasarlas mediante un cambio de temperatura o presión se produciría un cambio de una fase a otra. Donde dos líneas intersecan hay lo que se llama un punto triple, en el que las tres fases implicadas pueden coexistir de manera estable, pero un ligero cambio en temperatura o presión puede hacer que cambien abruptamente a un estado u otro.

Todas las fases sólidas cristalinas del agua tienen en común que cada molécula está ligada a otras cuatro a través de puentes de hidrógeno. En algunos casos estos enlaces no son estables (u ordenados), sino aleatorios, y van cambiando con el tiempo, siempre bajo las restricciones que imponen las ‘reglas del hielo’<sup>1</sup>. Entre estas formas cristalinas hay versiones ordenadas y desordenadas de la misma estructura, lo que hace que aparezcan en condiciones distintas y que sus características sean también diferentes.

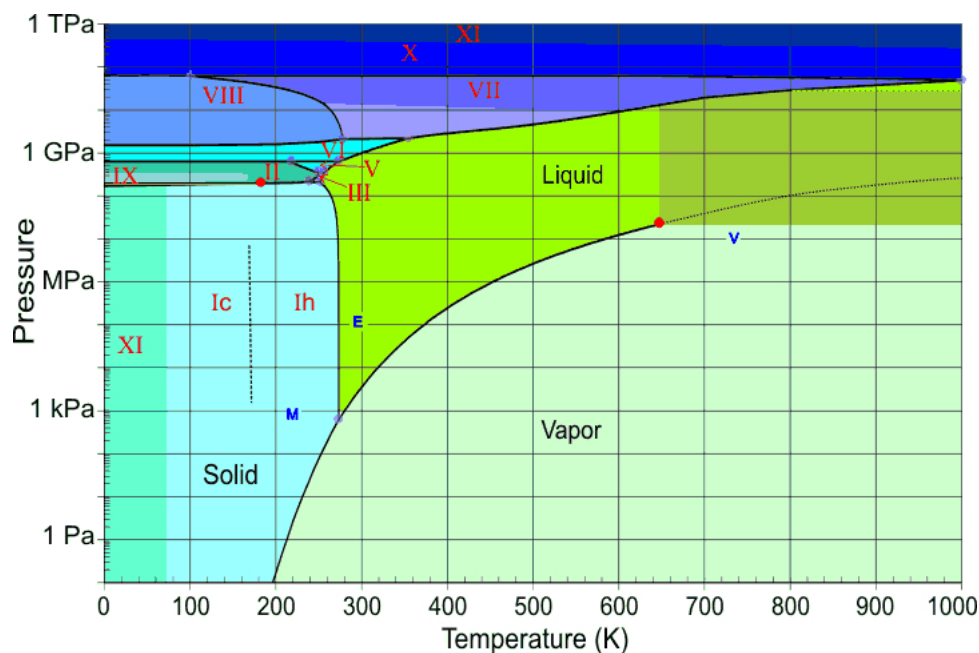
Entre ellas destacan el hielo hexagonal ( $I_h$ ), que es el que predomina en la Tierra, y el hielo cristalino cúbico ( $I_c$ ), que es el hielo cristalino más estable en las condiciones espaciales de bajas presiones y temperaturas. Ambos están relacionados ya que, en general, el  $I_c$  se transforma en  $I_h$ . Este proceso ocurre al calentarlo, pero a bajas presiones (que es lo que ocurre en los medios que nos interesan) no sería significativo hasta temperaturas mayores que las de sublimación del hielo cristalino cúbico.

Además de todas las formas de hielo de agua que acabamos de describir, existen formas sólidas de agua que no tienen estructura cristalina, llamadas vítreas o amorfas. En general, estas formas se obtienen en condiciones extremas, en las que las moléculas no tienen energía o tiempo suficiente para reordenarse en una estructura cristalina más estable y se quedan en las posiciones en las que se depositan. Debido a la falta de microestructura inherente a estas fases y a lo extremo de las condiciones en las que se dan, las formas amorfas del hielo no están tan bien descritas como las anteriores y existe todavía cierto desacuerdo respecto a cuántas hay, sus características y las relaciones entre ellas.

El hielo amorfo de agua está relacionado con el hielo cristalino ya que se transforma en  $I_c$  a bajas presiones siguiendo una ley dependiente de la temperatura. El proceso de cristalización, irreversible salvo por radiación electromagnética o aplicación de altas presiones en poco tiempo, es significativo a partir de unos 120-140 K y es exotérmico para el hielo de agua puro. Dentro del contexto del Sistema

---

<sup>1</sup>Las reglas del hielo indican que, para que no se produzcan defectos ó debilidades en el cristal, cerca de cada átomo de oxígeno debe haber dos de hidrógeno y un átomo de hidrógeno en cada enlace entre oxígenos.



**Figura 1.1:** Diagrama de fases del agua, que representa sus fases gaseosa y líquida, así como algunas de las 16 formas sólidas cristalinas propuestas en función de la temperatura (eje de abscisas) y la presión (ordenadas). Imagen tomada de Martin Chaplin, London South Bank University (<http://www.lsbu.ac.uk/water/phase.html>).

Solar, en cuerpos pequeños, la aplicación de altas presiones en poco tiempo no es probable, salvo en el caso de un evento catastrófico. En los planetas gigantes tendríamos altas presiones, pero constantes y demasiado elevadas (y a temperaturas demasiado elevadas) como para que el hielo amorfo sea estable en primer lugar. Por ello, el efecto de la radiación (Famá et al., 2010) es el mecanismo principal para la transformación de hielo cristalino en amorfo (amorfización) en las superficies de los cuerpos del Sistema Solar. Dado que a bajas temperaturas apenas se produce cristalización, con el tiempo la radiación procedente del Sol amorfizaría el hielo en escalas de tiempo de unos gigaaños. Es por ello que la presencia de hielo cristalino en una superficie indicaría que es lo suficiente joven como para no haber sido amorfizado. Análogamente, la detección de hielo amorfo implica cierta antigüedad. En capítulos posteriores describiremos con mayor detalle el proceso de cristalización y sus consecuencias en el contexto del modelizado de núcleos cometarios.

Podemos decir que la mayoría de los hielos de agua que se han encontrado en el Sistema Solar son amorfo y cristalino cúbico. En algunos objetos muy grandes y alejados del Sol, serían posibles las condiciones para la formación natural de hielos XI o II. La determinación observacional del estado de un material es una cuestión compleja que en general implica no sólo técnicas de observación sino un conocimiento de las condiciones en el lugar observado y del comportamiento de los



materiales en esas condiciones. El estado del hielo de agua, al menos entre hielo amorfo y cristalino cúbico de agua (que son los esperables a grandes distancias del Sol debido a las bajas presiones y temperaturas) se puede distinguir de manera remota mediante espectroscopía. El  $I_c$  presenta una firma espectral, un pico en la longitud de onda de  $1.65 \mu\text{m}$  que no aparece en el hielo amorfo. El análisis de dicho pico se ha utilizado para establecer el estado de hielos en diversas zonas del Sistema Solar. Lamentablemente, hay ciertas dudas acerca de lo fiable que es dicho método para decidir remotamente el estado de un hielo, ya que la altura e incluso la aparición de este pico dependen de la temperatura y también de la cantidad de radiación solar a la que hayan sido sometidos, así que, a pesar de que nos puede dar una pista, no es una prueba definitiva del estado en el que se encuentra el hielo (ver e.g. Leto et al., 2005).

Respecto a los hielos de otros materiales, la realidad es que no están tan bien estudiados como el de agua. Es posible que sea por eso que, en general, no se conocen varias formas de los mismos. Así, nos limitaremos a hablar brevemente de sus comportamientos en cuanto a sublimación. No todos los hielos exhiben el mismo comportamiento cuando se mide su tasa de sublimación frente a la temperatura, como comprobaron Collings et al. (2004) en sus experimentos de desorción programada con diversos materiales relevantes en un contexto astrofísico. De este modo, estos autores clasificaron las moléculas estudiadas en varias categorías. En primer lugar tenemos las especies tipo agua, cuyos perfiles de desorción de hielo puro presentan un único pico atribuido a desorción multicapa. En los perfiles de desorción de hielo puro de especies de tipo CO aparecen dos picos que se atribuyen a la que se produce en la superficie y en el interior de la muestra respectivamente. Las moléculas de los tipos anteriores, además, presentan diferentes comportamientos al ser depositados junto con agua. Así es como se distingue la tercera categoría, de la que el  $\text{CO}_2$  es el representante principal, cuya desorción presenta comportamientos característicos de las dos anteriores.

### 1.1.2. Breve historia del Sistema Solar

El Sistema Solar, tal y como lo conocemos, es producto (al igual que todos los sistemas estelares) del colapso gravitatorio de parte del material de una nube molecular formada principalmente por gases ligeros como hidrógeno o helio y, en una pequeña proporción, por materiales más pesados procedentes probablemente de generaciones estelares anteriores. Dicha región colapsada, a la que nos referiremos como nebulosa protosolar, comenzó a rotar conservando el momento angular. La región esférica central fue acumulando cada vez mayor cantidad de masa y su temperatura fue aumentando a medida que la densidad de material y las colisiones internas aumentaban. La región rodeando al protosol, además de suministrarle material, fue adquiriendo forma de disco como consecuencia de, entre otras, las fuerzas gravitatorias, magnéticas y rotacionales a las que estaba sometida. En el disco, a su vez, procesos acumulativos de materia originaron los planetas, así como el resto de cuerpos del Sistema Solar. Cuando el protosol adquirió masa suficiente

como para comenzar su actividad estelar, el viento solar liberado en este proceso esparció el gas y el polvo, arrastrando también parte de los cuerpos más pequeños. Otros procesos de interacción gravitatoria o colisional entre los distintos objetos, entre los que destacan, por ejemplo, las migraciones de los planetas gigantes o el bombardeo pesado tardío terminaron de configurar el Sistema Solar hasta llegar a la distribución que conocemos actualmente.

Como nos vamos a centrar en los cuerpos helados, vamos a introducir a continuación un concepto que resultará importante: el de la línea de los hielos. Como consecuencia del colapso de la nebulosa presolar, las temperaturas de la misma comenzaron siendo muy elevadas. A medida que las temperaturas se reducían en el disco preplanetario, sus diferentes materiales (producto del proceso de colapso y procedentes de la nebulosa original) irían condensando, según su volatilidad. Los materiales rocosos y metálicos condensarían a temperaturas mayores de 1300 K. Por debajo de 300 K condensarían materiales volátiles como por ejemplo agua o dióxido de carbono. La frontera separando la zona donde condensaron rocas y metales de la de elementos volátiles es lo que se conoce como línea de los hielos. En la zona interna del disco se formarían cuerpos rocosos y metálicos, ya que debido a las altas temperaturas, la condensación de hielos no se puede producir. La localización de la línea de los hielos es todavía objeto de discusión debido a varios motivos. En primer lugar, los diferentes materiales volátiles tienen diferentes temperaturas de condensación, lo que hace difícil dar una frontera común a todos ellos, de modo que se considera la del hielo de agua. En segundo lugar, es diferente también considerar la formación primordial de hielo que la condensación a partir de gas previamente sublimado, siendo esta última más sencilla. Además, la variación de la temperatura del disco con el tiempo hará que los hielos puedan condensar cada vez más cerca del protosol y que, por lo tanto, la línea de los hielos esté cada vez más próxima al Sol. Finalmente, los diferentes perfiles iniciales que asumamos para la temperatura darían lugar a diferentes localizaciones para la línea de los hielos, de modo que se pueden obtener estimaciones diferentes pero plausibles. Es por estas razones que, en general, se puede considerar la línea de los hielos entre 1 y 5 unidades astronómicas (UA) <sup>2</sup> del Sol (ver e.g. Lunine, 2006), aunque la distancia más aceptada es de aproximadamente 4 UA, entre el cinturón de asteroides y Júpiter.

### 1.1.3. Hielos en el Sistema Solar

Actualmente hay gran cantidad de objetos helados en el Sistema Solar, que además presentan gran variedad entre ellos. Haremos, pues, un breve recorrido de los cuerpos que contienen hielo en el Sistema Solar, alejándonos gradualmente del Sol. Es importante notar que, a pesar de que los objetos del Sistema Solar son los más accesibles para su estudio entre los astronómicos en general, la información que tenemos sobre ellos todavía es limitada y se restringe, casi siempre, a su superficie.

---

<sup>2</sup>La unidad astronómica es una unidad de longitud igual por definición a 149.597.870.700 m y que equivale a la distancia media entre el planeta Tierra y el Sol.

Las referencias generales de las que hemos tomado la mayoría de la información de esta sección son Prockter (2005), Encrenaz (2008), Jewitt (2010) y Lewis (1995).

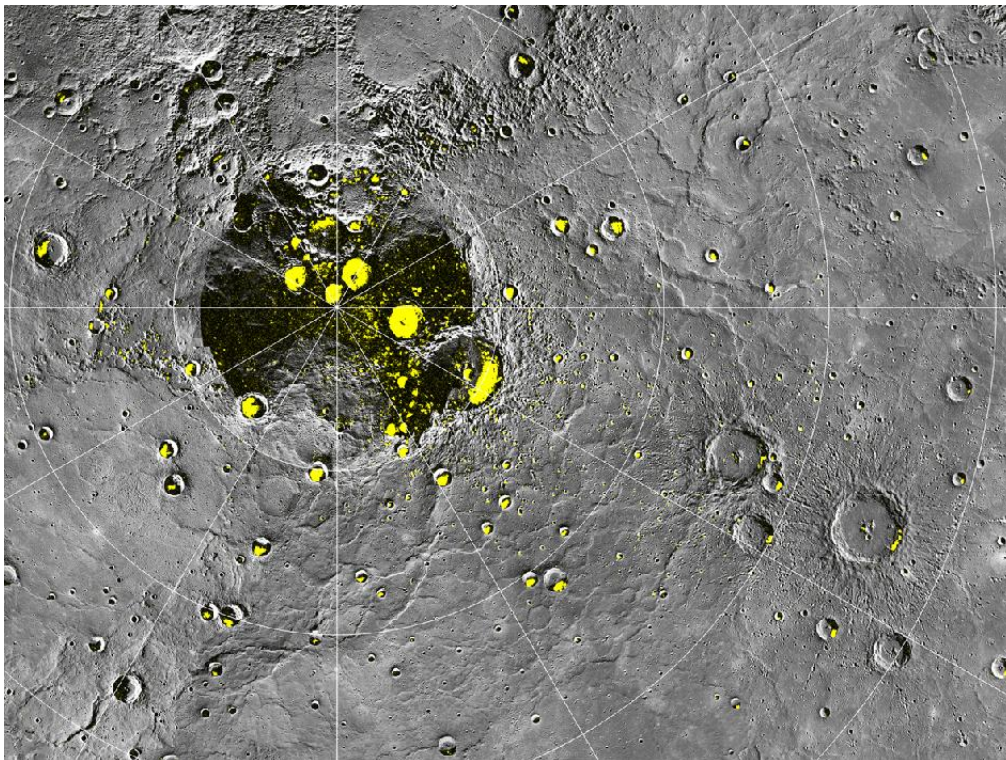
### 1.1.3.1. Sistema Solar Interno

Comenzaremos nuestro recorrido en la parte interna del Sistema Solar, donde la cercanía del Sol hace más improbable la presencia de hielos de modo que éstos son más escasos. Es un hecho que en la zona de los planetas rocosos también encontramos hielo (y de hecho también gas en sus atmósferas), a pesar de la aparente contradicción con la discusión anterior acerca de la línea de los hielos. De hecho, pequeños cuerpos helados llegados a esta zona (bien en un bombardeo masivo o simplemente objetos individuales perturbados gravitacionalmente) se postulan como la fuente de los materiales volátiles encontrados en la parte interna del Sistema Solar.

Cerca del Sol, además de una fuente para los materiales más volátiles, necesitamos también mecanismos de preservación que mantengan la superficie a temperaturas suficientemente bajas para permitir la conservación del hielo. El ejemplo más claro de esto es Mercurio, el planeta más cercano al Sol y prácticamente sin atmósfera que lo proteja, de modo que su superficie sufre enormes cambios de temperatura debido a la radiación solar. La falta de atmósfera, además, hace que el posible hielo de su superficie esté expuesto al vacío, de modo que sublime directamente. Sin embargo, observaciones de Mercurio muestran áreas circulares de gran reflectividad en radar cerca de los polos, como se aprecia en la imagen 1.2. Para ello se ha propuesto como causa la presencia de hielo superficial (ver, e.g. Slade et al. 1992 o Paige et al. 1992). Esto es posible debido a que el eje de rotación de Mercurio es prácticamente perpendicular al plano eclíptico, de modo que en cráteres polares pueden existir zonas de sombra permanente que, protegidas de la radiación solar, se mantengan a temperaturas del orden de 100 K, manteniendo el agua en estado sólido. Recientemente, varios trabajos apoyan esta posibilidad (Mer, 2012).

En la superficie del siguiente planeta en cercanía al Sol, Venus, no se ha encontrado hielo, aunque la abundancia de deuterio enriquecido en su atmósfera sugiere que alguna vez tuvo cantidades de agua incluso comparables a las de la Tierra. En el caso de la Tierra, es evidente que hay hielo incluso estable en su superficie, debido a la presencia de una atmósfera suficientemente densa, pero merece la pena mencionar que dicho hielo es hielo hexagonal de agua Ih. Podrían ser una excepción, tal vez, zonas altas de la atmósfera como la estratosfera, donde podría haber hielo cristalino Ic, que es metaestable a presiones más bajas.

Respecto a Marte, aunque la presencia de agua líquida ha sido más complicada de verificar, en ambos polos han sido observadas zonas heladas, estacionales y permanentes, así como hielo de agua y de dióxido de carbono (Bibring et al., 2004). En la imagen 1.3 se puede observar la recesión estacional del mayor de los dos polos, el norte. La orografía marciana (rica y variada) muestra otros indicios de la presencia pasada de materiales helados. Entre ellas, destacan algunos accidentes

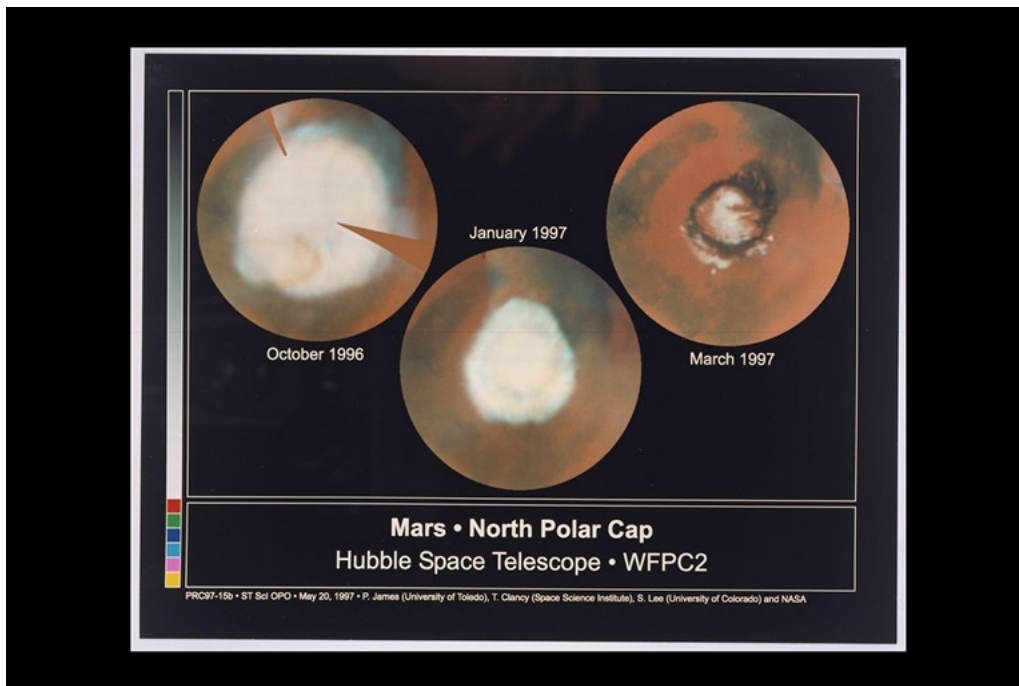


**Figura 1.2:** Composición de la imagen de radar de mayor resolución hecha desde el observatorio de Arecibo superpuesta a un mosaico de imágenes obtenidas por la sonda MESSENGER. Todas las zonas brillantes se ajustan a zonas de sombra, lo que es consistente con la propuesta de que dicho brillo se debe a hielo superficial. (Créditos de la imagen: NASA/Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory/Carnegie Institution of Washington)

geográficos que pueden ser consecuencia de antiguos glaciares así como ciertas manchas oscuras con abundante material refractario que aparecen en su superficie y podrían haber quedado tras la sublimación de dióxido de carbono.

### 1.1.3.2. Cinturón de Asteroides

El cinturón principal de Asteroides está en una zona clave en lo que respecta a los cuerpos helados, ya que está en la zona de las estimaciones más aceptadas de la línea de los hielos. Como su propio nombre indica, el cinturón de asteroides es una zona anular del disco en la que residen estos cuerpos pequeños. Los asteroides son tradicionalmente considerados rocosos e inactivos. Sin embargo, en los últimos años se ha observado actividad variable en algunos de ellos, lo que ha impulsado el estudio de una posible nueva familia de cometas: los cometas del cinturón principal (a los que nos referiremos por sus siglas en inglés MBC). Con actividad, nos referimos generalmente a la observación de un aumento en el brillo de algún



**Figura 1.3:** Composición de imágenes tomadas con el Telescopio espacial Hubble entre Octubre de 1996 y Marzo de 1997 y que capturan la recesión estacional del polo norte marciano. (Créditos de la imagen: Phil James, University Toledo; Todd Clancy, Space Science Institute, Boulder, CO, USA; Steve Lee, University of Colorado, USA; ESA/NASA)

objeto, aunque no siempre están claras sus causas, de modo que en ocasiones es prematuro catalogarlos como cometas. El primer objeto catalogado como MBC, el Elst-Pizarro (Elst et al., 1996) presenta signos de actividad producto de la sublimación de gases, por lo tanto, cometaria. Por otro lado, estudios recientes como el de Moreno et al. (2011) del asteroide Scheila indican que en este caso la actividad es probablemente producto de una colisión. En secciones posteriores dedicadas a los cometas trataremos más detalladamente la naturaleza de los MBCs.

### 1.1.3.3. Zona de los Gigantes Helados o Gaseosos

A partir de aquí entramos en la zona rica en hielo del Sistema Solar. Debido a las condiciones de esta zona del disco protoplanetario, los planetas aquí formados son mucho más grandes que los rocosos y están compuestos principalmente por materiales volátiles, una parte de los cuales al menos tiene bastantes probabilidades de estar en estado sólido, de ahí su nombre gigantes helados. También presentan complejos sistemas de satélites, poblaciones de cuerpos pequeños en órbitas resonantes e incluso anillos de material. Comparándolos con los planetas rocosos, los gigantes helados presentan una problemática especial a la hora de ser

estudiados. En primer lugar las atmósferas de estos planetas son tremendamente densas y opacas, de modo que no permiten la penetración de radiación visible o infrarroja cercana, lo que impide profundizar en ellas mediante estudios remotos. En segundo, su enorme tamaño hace que ejerzan una presión gravitacional enorme, de modo que la exploración in situ mediante sondas tampoco ha sido fructífera hasta ahora. Sin embargo hay muchas indicaciones de la presencia de hielo en ellos, así como en sus sistemas de satélites y cuerpos menores en resonancia.

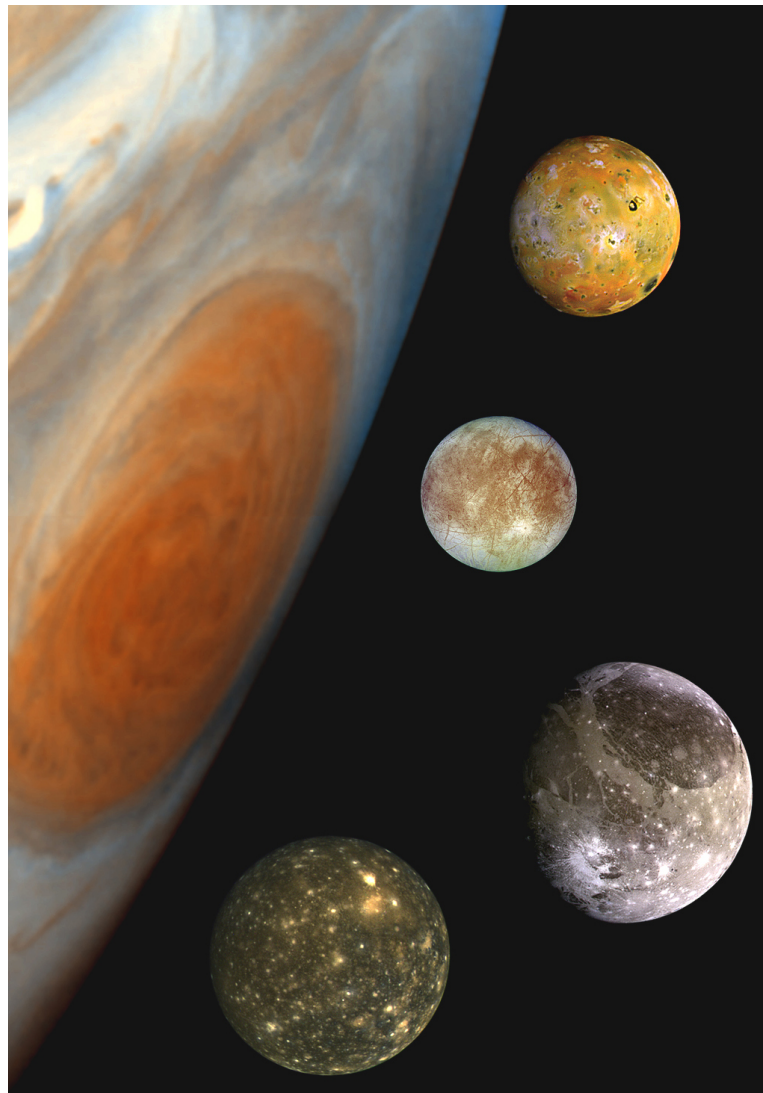
El caso de Júpiter es el primer ejemplo de los problemas en la observación que acabamos de mencionar, de modo que sólo podemos hablar de la detección de metano y amoníaco en nubes de capas altas de su atmósfera, éste último probablemente en estado sólido. Es por esto que hablaremos únicamente de algunos de los más de 60 satélites jovianos descubiertos hasta la fecha, cuyas superficies sí que han sido observadas. En concreto hablaremos de algunos de los llamados satélites Galileanos, cuya imagen podemos ver en la figura 1.4, que presentan en general estructuras y características muy variadas. Por ejemplo, Ío es rocoso y presenta gran actividad volcánica. Europa y Ganímedes presentan una estructura diferenciada <sup>3</sup>, con un núcleo rocoso y hielos en la zona superficial. Europa presenta una superficie joven, como se deduce de la falta de cráteres y la cristalinidad del hielo <sup>4</sup>. Una de las explicaciones más plausibles para la renovación de dicha superficie es el criovulcanismo, ya que hay indicaciones de la presencia de agua líquida bajo una capa de hielo. Ganímedes, por su parte, presenta un tercio de superficie vieja y oscura, compuesta de hielo de agua muy sucio y con muchos cráteres (como sería de esperar si conservase la superficie original). Los otros dos tercios presentan una superficie joven, sin cráteres, que indican algún mecanismo de regeneración superficial, hipótesis compatible con la presencia de grandes fallas con hielo en su interior que indican grietas tensionales unidas a cierta actividad tectónica. Al contrario de los anteriores, el satélite Calisto no está diferenciado y en él aparecen hielo y roca mezclados. Su superficie, además, parece muy vieja y presenta muchos cráteres. A pesar de que los cráteres implican procesado colisional, su subsistencia indica que la superficie no ha sufrido procesos adicionales que la rejuveneciesen. De hecho, las probabilidades de colisión en el Sistema Solar implican que una superficie no protegida por atmósfera que haya pasado sin renovarse suficiente cantidad de tiempo debe presentar cráteres.

Saturno es un planeta poco denso, aparentemente formado en un 90 % por hidrógeno y en un 5 % por helio. Los famosos anillos de Saturno están formados principalmente por pequeñas partículas heladas y se cree que son remanentes de cometas, asteroides o satélites que se deshicieron antes de llegar al planeta (Sremčević et al., 2007). Se ha propuesto que el hielo encontrado en los anillos es

---

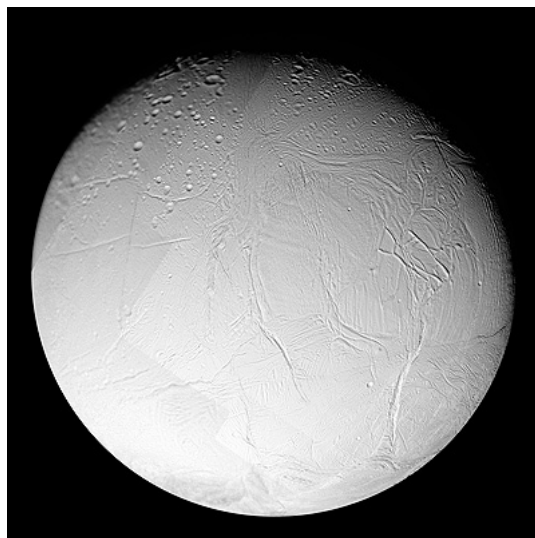
<sup>3</sup>Decimos que un cuerpo está diferenciado cuando debido a la gravedad los materiales que lo componen se separan según sus densidades, quedando un núcleo interno más denso cubierto de capas con materiales de densidades decrecientes.

<sup>4</sup>En general la presencia de hielo cristalino de agua en una superficie del Sistema Solar indica que ésta es relativamente joven. Por el contrario, la presencia de hielo amorfo indica que tiene una cierta edad, como ya hemos explicado



**Figura 1.4:** Composición de imágenes que presenta el sistema formado por Júpiter y las cuatro lunas Galileanas. A la izquierda, borde del planeta, y de arriba a abajo los satélites Io, Europa, Ganímedes y Calisto.; Crédito de la imagen:NASA

cristalino cúbico, aunque no está confirmado (Lewis, 1995). Entre los 18 satélites conocidos de Saturno, Encelado y Titán presentan las características más interesantes como sistemas helados. Encelado (que se puede ver en la imagen 1.5) tiene unos 500 km de radio y presenta una superficie joven y rica en agua. El mecanismo de renovación superficial propuesto en este caso es también criovulcanismo, esta vez debido al calentamiento de marea debido a Saturno, ya que la expulsión de material debida a este fenómeno es compatible con cambios en el período de rotación de Saturno. Sin embargo, para que esto fuese posible (ya que las temperaturas para que la superficie esté helada implicarían que no hay agua en estado líquido



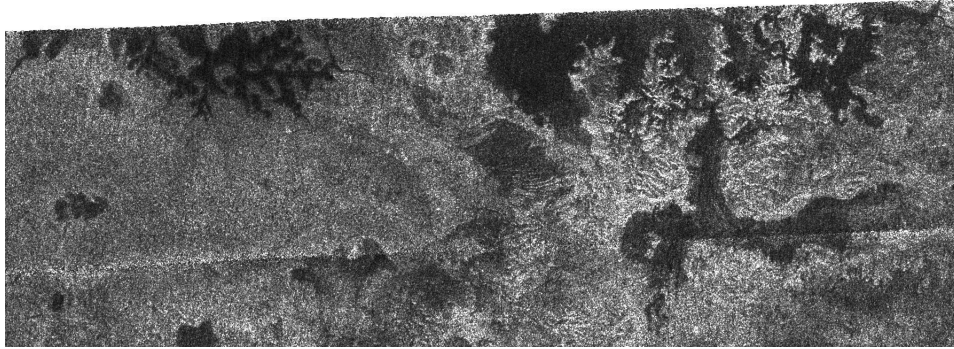
**Figura 1.5:** Composición de imágenes tomadas por la sonda Cassini durante su primer vuelo cercano a Encelado en Febrero de 2005. (Créditos de la imagen: Phil James, University Toledo; Todd Clancy, Space Science Institute, Boulder, CO, USA; Steve Lee, University of Colorado, USA; ESA/NASA)

bajo ella) sería necesario algún tipo de sustancia que actuase como anticongelante para el agua, como por amoníaco.

Titán es un satélite muy especial y es digno de mención principalmente por dos razones. La primera de ellas es que tiene una atmósfera muy densa y activa, que permite la presencia de líquidos en su superficie, lo que es en sí mismo interesante. En segundo lugar, la misión Cassini-Huygens consiguió aterrizar en su superficie y obtener gran cantidad de datos. La presencia de volátiles (como metano o amoníaco) que podrían actuar bajando el punto de fusión del agua hacen plausible la existencia de un océano subsuperficial que facilitaría que se produjese criovulcanismo. En su superficie aparecen accidentes geográficos típicos de la presencia de líquidos, como los lagos de etano y metano que se pueden ver en la imagen 1.6.

Como ya hemos dicho, es difícil saber cosas acerca de los planetas gigantes. Así, con respecto a Urano, sólo podemos decir que en él se han detectado mayores cantidades de agua, helio, y metano (este último componente es el que le daría su color azulado) que en Júpiter y Saturno. Sin embargo, no está tan claro en qué estado están, ya que se ha propuesto que, tanto en Urano como en Neptuno, podría haber una nueva forma de agua, agua superiónica. Esta forma de agua, que necesitaría condiciones de presión enormes para ser estable, podría presentar propiedades muy poco habituales (Cavazzoni et al., 1999). Sin embargo, este estado del agua todavía es teórico y sigue siendo complicado el interpretar los resultados experimentales a la luz de lo que las simulaciones moleculares indican. La razón para proponer la presencia de este tipo de agua se deduce de que ambos planetas





**Figura 1.6:** Imagen de radar tomada por Cassini en el que se observan lagos superficiales y orografía típica. (Créditos de la imagen: Phil James, University Toledo; Todd Clancy, Space Science Institute, Boulder, CO, USA; Steve Lee, University of Colorado, USA; ESA/NASA)

muestran un campo magnético muy fuerte y este campo es dependiente de la conductividad del material planetario. Por eso, en Urano y Neptuno parece que el agua tiene mayor conductividad de la normal, proponiéndose dos posibles causas: que sus iones estén separados o bien que esté en esta forma exótica, superiónica.

Neptuno fue el primer planeta que se descubrió por predicción matemática a partir de las perturbaciones gravitacionales de la órbita de su vecino Urano. Por lo que sabemos de su composición, ésta es similar a la de Urano, de modo que pasaremos a hablar de su satélite principal, Tritón. Tritón es un satélite particular dentro del sistema neptuniano. Se parece más a Plutón y a otros Objetos Transneptunianos (TNOs, como nos referiremos a ellos de ahora en adelante) que a sus compañeros satélites de Neptuno, en cuanto a tamaño, composición, etc. Es por esto que parece plausible que sea un Objeto del cinturón de Kuiper (KBO) <sup>5</sup> capturado por la gravedad neptuniana. En primer lugar Tritón tiene atmósfera, aunque bastante tenue, en la que parece haber pequeñas partículas de hielo de nitrógeno. Su superficie está a una temperatura media de unos 38 K. Respecto a su composición, se han identificado bastantes de sus materiales, que nos presentan un cuerpo formado por rocas, hielo de agua y de materiales orgánicos, así como de otros volátiles, principalmente nitrógeno y metano. Presenta una superficie joven con casquetes polares de hielo, pocos cráteres y bastantes accidentes geológicos. Algunos de éstos parecen formados principalmente por agua, ya que son formaciones grandes que difícilmente se podrían sostener si estuviesen compuestas por nitrógeno o metano. Según Cruikshank et al. (2000), el espectro de Tritón es ambiguo e indica que el hielo de agua podría estar presente en dos estados: cristalino cúbico y amorfo.

---

<sup>5</sup>Los objetos del cinturón de Kuiper son objetos transneptunianos (de los que hablaremos posteriormente) que ocupan una región anular del plano de la eclíptica a partir de las 30 UA.

#### 1.1.3.4. Objetos Transneptunianos

Como su propio nombre indica, los Objetos Transneptunianos son objetos del Sistema Solar que orbitan más allá de Neptuno. La población de TNOs es muy variada, abarcando desde cuerpos pequeños hasta planetas enanos. También hay variedad dinámica ya que los TNOs aparecen a distancias que van desde Neptuno hasta los confines del Sistema Solar. Sin embargo, lo que sí tienen en común es que son los objetos más alejados del Sol. Es por esto que en general se consideran bastante fríos y la mayoría de ellos, efectivamente, están helados.

Nos centraremos en el recientemente degradado a planeta enano Plutón y su compañero, Caronte. Más que un conjunto de planeta y satélite, Plutón y Caronte forman un sistema binario, descubierto como tal casi por casualidad, gracias a los eclipses cuando Caronte pasaba por delante de Plutón. Se estima que la superficie plutoniana está a una temperatura de unos 40K, lo que es consistente con la temperatura de equilibrio a esas distancias del Sol. En cuanto a composición presenta hielo de agua, una mezcla de materiales orgánicos y, también, volátiles como nitrógeno, metano y monóxido de carbono. El conjunto tiene una densidad media estimada aproximadamente el doble que la del agua. En su espectro domina el metano, pero hay en él indicios de que el nitrógeno podría ser el volátil mayoritario, al ser más difícil de detectar. En ese caso también dominaría en la atmósfera, dada su alta volatilidad. Según esto, en su superficie habría una serie de parches de nitrógeno que lo suministrarían a la atmósfera hasta llegar a un equilibrio. Estos parches deberían estar todos a la misma temperatura ya que de no estarlo, los más calientes sublimarían, rebajando su temperatura y el gas condensaría en los más fríos, calentándolos hasta equilibrar las temperaturas. En cuanto a la distribución de hielos en la superficie, la aparición y estabilidad de hielo de los polos podría ser variable, pero independientemente de esto, las simulaciones indican que probablemente la mayoría del hielo se acumula en el ecuador (Brown, 2002). Esto generaría grandes variaciones estacionales de la presión atmosférica.

Respecto a Caronte, en él se han detectado hielos de agua cristalino y de amoníaco (Brown y Calvin, 2000) y, de hecho, modelos de su composición incluyendo únicamente hielo cristalino y material rocoso reproducen su espectro. La cristalinidad del hielo, como en otras ocasiones, hace surgir la cuestión de la fuente de calor o rejuvenecimiento de su superficie. Así, además del criovulcanismo ya mencionado, para Caronte se han propuesto también las opciones del calentamiento por impacto de micrometeoritos (por ejemplo, Porter et al. 2008 proponen este mecanismo para satélites helados y objetos transneptunianos en general) así como el calentamiento gravitacional debido a la proximidad y tamaño de su compañero Plutón. Las características físicas de Caronte lo hacen similar a otros pequeños objetos transneptunianos, como Varuna, que es algo más oscuro.

La gran distancia de los TNOs al Sol hace que su observación sea compleja (aunque últimamente se ha descubierto gran cantidad de ellos) y también nos indica que en general son cuerpos helados. Se puede considerar, pues, la región transneptuniana como una gran reserva de cuerpos helados. A estas distancias,

las temperaturas de equilibrio en la superficie son bajas (del orden de los 50 K) y sería esperable encontrar hielo amorfo en ellas. Sin embargo en objetos como el KBO Quaoar se ha detectado hielo cristalino y también posiblemente amoníaco (como informaron Jewitt y Luu 2004). Debido al gran tamaño de Quaoar, y a la posibilidad de que el amoníaco baje el punto de fusión del agua, se ha propuesto el criovulcanismo como método de renovación superficial.

Los TNOs, como veremos algo más adelante, están íntimamente relacionados con los cometas, que son la última de las familias de cuerpos helados del Sistema Solar por mencionar. Los cometas son, esencialmente, cuerpos pequeños constituidos por una mezcla de material refractario y hielos, principalmente de agua. Estos pequeños cuerpos constituyen el objeto de nuestro estudio y por tanto merecen una descripción detallada y extensa. Antes convendrá introducir brevemente la importancia del estudio de los cometas en el contexto del Sistema Solar.

#### **1.1.3.5. Importancia de los cometas, como cuerpos helados, en el estudio del Sistema Solar**

En las secciones anteriores hemos visto que los cuerpos helados o, en general, con hielos abundan en el Sistema Solar. Por lo tanto, su estudio es necesario para extraer información que, puesta en contexto, nos permita avanzar en la caracterización de nuestro sistema planetario y la comprensión de los procesos que lo han afectado. Entre todos los cuerpos helados distinguiremos especialmente los cometas como elementos clave en la comprensión de la formación y evolución del Sistema Solar.

Como ya se ha comentado, el Sistema Solar es el resultado del colapso de una nube molecular sometida a una serie de procesos físicos y químicos complejos. Esta descripción nos permite introducir, a grandes rasgos, las dos principales dificultades a las que nos enfrentamos a la hora de comprender la formación y evolución del Sistema Solar. Por un lado estaría la limitada comprensión de las condiciones iniciales de nuestro sistema y, por otro, la pobre comprensión de los procesos físicos y químicos que han actuado desde su formación. Todo ello, la historia del Sistema Solar, debe ser reconstruido a partir de la forma que el mismo presenta actualmente.

En el modelo más aceptado sobre la formación del Sistema Solar, la teoría de los planetesimales, tras el colapso de la nube molecular se formó un gran conglomerado de cuerpos pequeños, que reciben el nombre de planetesimales. Éstos, tras diferentes procesos dinámicos, colisionales y térmicos dieron lugar al nacimiento de los planetas. En ese contexto, los cuerpos pequeños o menores del Sistema Solar (asteroides, cometas y TNOs) se consideran los objetos más cercanos a estos planetesimales y, por tanto, serían objetos clave para entender una de las etapas intermedias entre la fase inicial de colapso y el Sistema Solar actual. Sin embargo, es cierto que aún hoy no está clara la relación entre los planetesimales originales y las distintas familias de cuerpos menores. Por ejemplo y con respecto a los asteroides, existen evidencias importantes de que se trata de una familia de

objetos fuertemente afectada por las colisiones (e.g. distribución de tamaños, de períodos, etc.). Además, su cercanía al Sol asegura que el material asteroidal ha sido procesado significativamente. Todo ello hace que, aún siendo una fuente importantísima de conocimiento, sea difícil establecer el vínculo entre los asteroides y los planetesimales originales sin conocer y caracterizar totalmente propiedades de esos planetesimales (e.g. distribución de tamaños inicial, tensión interna, etc.) o los procesos físicos y químicos a los que han sido sometidos.

Las otras familias de cuerpos menores, los cometas y los TNOs son, como hemos dicho, cuerpos helados. Esto, junto con su pequeño tamaño y baja masa, es garantía de que son los cuerpos que menor procesamiento térmico y geológico han tenido del Sistema Solar, de modo que serían los más cercanos a las condiciones iniciales y a los planetesimales originales. Así, al estar poco procesados o, al menos, ser los menos procesados, pensamos que el estudio y determinación de las características de estos cuerpos helados (composición, estructura interna, densidad, etc.) nos proporcionará directamente información relevante sobre su formación y, por tanto, de las condiciones reinantes (perfil de temperaturas, distribución de masa, etc.) en las primeras etapas de la formación del Sistema Solar. El estudio de los cometas presenta una ventaja frente al de los TNOs, y es que, aún manteniéndose durante la mayor parte de sus vidas alejados del Sol (sufriendo, por tanto escaso procesamiento térmico), sus órbitas elípticas los traen por la zona interna del Sistema Solar. Esto hace que puedan ser observados en mejores condiciones y que seamos testigos de su procesamiento térmico.

Actualmente, la principal dificultad para establecer esas condiciones es que toda magnitud que caracteriza la naturaleza de los cuerpos pequeños helados se puede considerar un problema abierto. Esto se comprende, en primer lugar, por la dificultad de observar y extraer remotamente información de cuerpos tan pequeños pero también por la evidente dificultad para acceder a las magnitudes y características más importantes (e.g. densidad, estructura interna, etc.).

## 1.2. Cometas

Un modelo termofísico para un medio poroso helado puede ser general, pero dependiendo de a qué tipo de cuerpo lo apliquemos variarán las hipótesis y simplificaciones que podremos hacer. Como se ha mencionado, nuestro objetivo es el desarrollo de un modelo que se utilizará para estudiar la evolución termofísica de núcleos cometarios. Los cometas están entre los cuerpos helados cuyo estudio tiene más importantes implicaciones para el del Sistema Solar en general y que por ello describiremos a continuación.

Los cometas son objetos astronómicos relativamente conocidos y su característica esencial es la actividad, o la capacidad de desarrollarla. Por actividad entenderemos la sublimación de los hielos que integran los cuerpos que, en última instancia, es la responsable de que los cometas se muestren, a menudo, como objetos extensos y difusos. A lo largo de esta sección, describiremos lo que sabemos

acerca de ellos, que son esencialmente cuestiones generales. Como ocurre habitualmente en ciencia, a medida que avanzamos en el conocimiento de algo, aparecen nuevas cuestiones abiertas, que trataremos en secciones posteriores.

### 1.2.1. Algunos hitos en la comprensión de la naturaleza cometaria. Definición de cometa

Aunque los cometas se conocen desde muy antiguo y se pueden encontrar referencias sobre su naturaleza en numerosas fuentes como, por ejemplo, en el libro *Cuestiones Naturales* de Séneca, podemos destacar ciertos hitos que cambiaron nuestra concepción sobre la naturaleza cometaria. Entre ellos se encuentra, por ejemplo, la demostración por parte del astrónomo danés Ticho Brahe en el s. XVI de que los cometas eran objetos celestes, no fenómenos atmosféricos como se creía hasta entonces.

Tras ese gran paso proporcionado por Brahe hay que destacar también el descubrimiento de la naturaleza periódica de algunos de ellos, hecho que demostró Halley en el s. XVII analizando la órbita del cometa que hoy lleva su nombre utilizando la entonces reciente teoría de la Gravitación Universal desarrollada por Newton.

Tras esos grandes pasos conceptuales, el interés científico por los cometas continuó creciendo. Poco a poco se fueron desvelando aspectos de su naturaleza, conforme la instrumentación astronómica lo permitía, como que la apariencia difusa que mostraban se debía a la presencia de moléculas de gas y de partículas de polvo que reflejaban la luz solar. Este material debía proceder de algún sitio y, aunque se propusieron diversos modelos para explicar su origen, no fue hasta mediados del siglo XX que se presentó un modelo que resultaba consistente con todos los hechos observacionales conocidos y descritos hasta aquel momento. Fue el modelo de Whipple (1950), el llamado modelo de la “bola de nieve sucia”. Whipple propuso que tras esa apariencia difusa se escondía un núcleo, la fuente de todo el material observado en los cometas, un cuerpo relativamente pequeño. La propuesta de Whipple consistía en que los núcleos cometarios son básicamente un conglomerado de hielos constituido por material volátil (como  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$  o  $\text{CO}_2$ , que serían moléculas madre, químicamente estables, de las observadas en los cometas) mezclado con material refractario, de tipo meteoroidal. Whipple utilizó esta descripción del núcleo para explicar los cambios que se producían en los elementos orbitales de algunos cometas, como los que se habían observado en el cometa Encke (cuyo período parecía estar disminuyendo a cada paso orbital). Según la idea de Whipple, la expulsión de material volátil por parte del núcleo cuando era calentado sería responsable de una fuerza no gravitacional, un empuje, que modificaría su órbita puramente gravitacional. Utilizando esta idea, Whipple estimó la masa que debían perder algunos cometas cuyos cambios no-gravitacionales estaban bien determinados. Esto le permitió dar límites superiores para sus tamaños, que resultaron ser del orden de los kilómetros.

Establecidas las características básicas de su modelo, Whipple describió, cua-

litativamente, cómo podrían evolucionar los núcleos. En una primera etapa, la radiación solar vaporizaría directamente los hielos de la superficie, arrastrando el material refractario más ligero y dejando las partículas más pesadas formando un manto aislante. Posteriormente, la razón de mezcla de los diferentes hielos se estratificaría debido a la diferencia en sus volatilidades. El estado final de un cometa podría ser un pequeño núcleo inactivo constituido únicamente por los fragmentos meteoroides más pesados, estableciendo así una posible relación entre cometas y cuerpos rocosos como los asteroides.

Hay que decir que el modelo de Whipple, aunque proporcionaba una descripción que explicaba todos los hechos observacionales del momento, no fue inmediatamente aceptado. Actualmente la descripción de Whipple nos puede parecer incluso evidente, pero en su época sugería todo un cambio en la concepción de la naturaleza cometaria, naturaleza de la que incluso se desconocía observacionalmente su composición. Es cierto que los primeros constituyentes gaseosos de los cometas,  $C_2$  y CN, se determinaron a finales del s. XIX, pero en la década de los 40 del siglo pasado, el inventario molecular cometario no incluía muchas más moléculas. Hasta 1940, además de los compuestos carbonados mencionados, se había detectado la presencia de los iones  $CO^+$ ,  $N_2^+$  y  $CO^+$  en las colas cometarias y el CH, Na y Fe en las comas. En 1941, Swings et al. detectaron, por primera vez, la presencia de OH en la coma de un cometa, estimando una abundancia similar a la del CN, constituyente que se pensaba mayoritario hasta entonces. Ese inventario molecular era, básicamente, con el que contaba Whipple para definir la composición de su núcleo cometario. Tras la aceptación progresiva del modelo de Whipple y el comienzo del desarrollo de modelos termofísicos sencillos en los años 60 (e.g. Squires y Beard 1961, Watson et al. 1963) se empezó a sospechar que la formación de las comas cometarias estaba relacionada, en primer lugar, con la sublimación del hielo de agua. Sin embargo, entonces no había evidencias de que el agua, casi con toda probabilidad molécula padre del OH, estuviese en una abundancia mayor que la del CN (o la de su molécula padre). Esta circunstancia cambió en los 70, con la utilización de los observatorios orbitales OAO-2 y AGO-5 de la NASA para observar cometas en la región ultravioleta del espectro. Con ellos se pudo detectar la fuerte presencia de H y OH, en cantidades similares y muy altas, en las comas de cometas como el Tago-Sato-Kosaka, Bennet o el Encke. Esto permitía concluir que eran producto de la fotodisociación de la molécula de  $H_2O$  y que ésta era el componente volátil mayoritario de los núcleos cometarios (e.g. Bertaux et al., 1973). Poco después, también en el ultravioleta, se pudo detectar por primera vez el que quedó definido como segundo componente volátil mayoritario, el monóxido de carbono (Feldman y Brune, 1976).

Aunque tras el modelo de Whipple se realizaron grandes avances en el conocimiento de la composición cometaria, su principal suposición, la existencia de un núcleo fuente de todo el material, permaneció durante mucho tiempo como una simple hipótesis. Esta idea empezó a consolidarse con las primeras observaciones positivas de radar (e.g. Kamoun et al., 1982) y recibió confirmación definitiva en 1986 con la última visita del cometa Halley hasta la fecha. En su último paso orbi-

tal, el Halley fue visitado por nada más y nada menos que cinco sondas espaciales: la europea Giotto (ESA), las japonesas Suisei y Sakigake y las soviéticas Vega I y Vega II. La cámara embarcada en Giotto así como las de las Vega mostraban la presencia de un núcleo como el supuesto por Whipple, un cuerpo sólido e irregular del que procedía el material presente en la coma (Keller et al., 1986). La figura 1.7 presenta la imagen del núcleo del cometa Halley tomada por la misión Giotto de la ESA.

Tras la exploración in-situ del cometa Halley y la difusión de la idea de que los núcleos cometarios podían estar entre los cuerpos menos evolucionados del Sistema Solar, nuestro conocimiento sobre estos objetos ha avanzado significativamente. A este conocimiento han contribuido, de manera especial, las misiones espaciales. Se puede decir que los cometas han sido objetos privilegiados dentro del Sistema Solar en lo que a exploración espacial se refiere. Tras las misiones al Halley, NASA desarrolló la misión Deep Space 1 (DS1), lanzada en 1998. Esta misión era esencialmente tecnológica pero tuvo como principal objetivo científico la exploración in-situ del cometa Borrelly en 2001. Poco después del lanzamiento de DS1, la NASA lanzó la sonda Stardust con el objetivo de capturar partículas de polvo tanto de origen interestelar como del entorno del cometa Wild 2. De nuevo poco después y una vez más la NASA desarrolló la misión Deep Impact. Con esta misión se pretendía avanzar en el estudio de las características superficiales y estructurales del cometa Tempel 1 y para ello se lanzó un impactador de 370 kg contra su superficie el 4 de Julio de 2005. La sonda principal de la misión Deep Impact continuó su viaje, rebautizada como Epoxi, dirigiéndose al encuentro del cometa Hartley 2 y pasando cerca de su núcleo en 2010. Por su parte, la sonda principal de la misión de Stardust, rebautizada como Stardust-NEXT se dirigió al encuentro del cometa Tempel 1 con el objetivo de caracterizar los posibles efectos del impacto causado por Deep Impact. En la Fig. 1.8 se pueden ver las fotografías de las superficies de los cometas tomadas por las cámaras a bordo de las misiones que acabamos de mencionar. Resulta evidente de estas imágenes que los núcleos cometarios tienen formas irregulares y presentan superficies de orografía y rugosidad variadas, con zonas de cráteres y otras suaves. Algunos de los resultados de todas estas misiones, especialmente los relevantes para este trabajo, serán descritos en secciones posteriores.

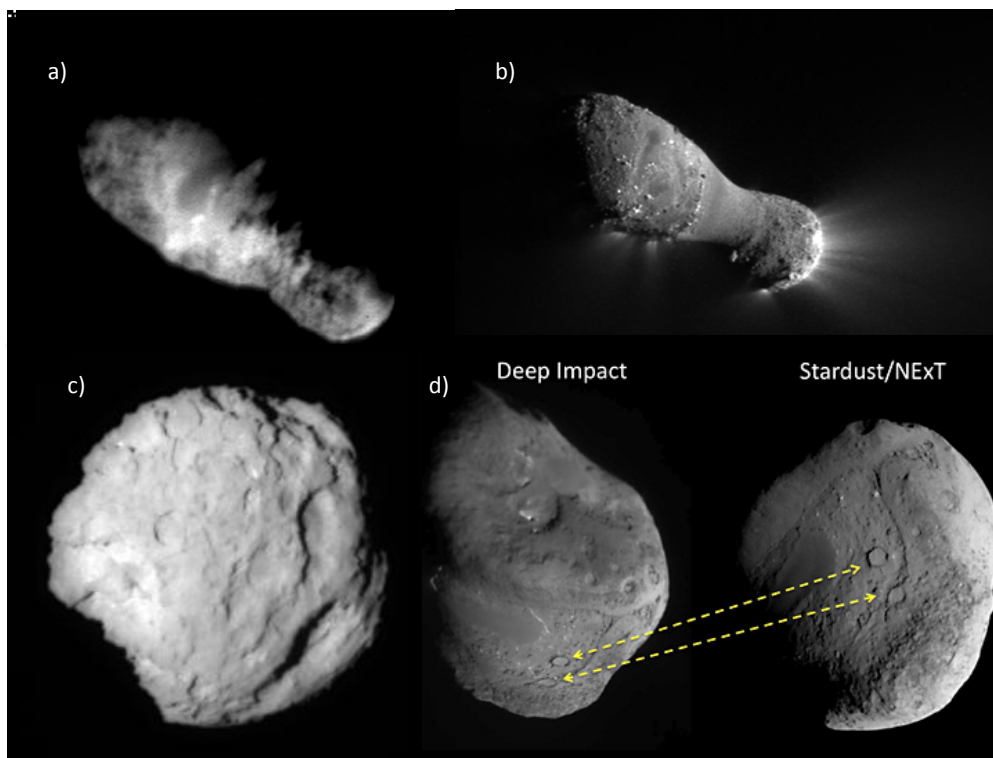
Todos los avances mencionados nos permiten por fin describir lo que es un cometa y construir una primera definición. Podríamos decir que un cometa es un fenómeno que se explica por la interacción de la radiación y viento solar con un pequeño cuerpo sólido y el material procedente del mismo, que constaría, basándonos en Festou et al. (1993) de:

#### 1. El núcleo cometario:

Es un cuerpo sólido, de forma irregular, baja densidad, de tamaño del orden de los kilómetros y con una cohesión interna relativamente débil. Está constuido por hielo de diferentes volátiles y partículas de polvo. El núcleo se mueve alrededor del Sol en órbitas elípticas, en ocasiones casi parabólicas. Las órbitas son básicamente



**Figura 1.7:** Imagen del cometa Halley tomada por la misión Giotto de la ESA (Créditos: ESA)



**Figura 1.8:** Superficies cometarias observadas por distintas misiones espaciales. a) Imagen del cometa Borrelly tomada por la misión Deep Space 1 en 2001 (Deep Space 1 Team/JPL-Caltech/NASA). b) Imagen del cometa Hartley 2 tomada por la misión EPOXI (NASA/JPL-Caltech). c) Imagen del cometa Wild 2 tomada por la misión Stardust en Enero de 2004 (NASA/JPL-Caltech). d) Imágenes del cometa Tempel 1 tomadas por las misiones Deep Impact y Stardust NExT (NASA/JPL-Caltech/Univesity of Maryland/Cornell)

inestables, debido a la atracción gravitatoria variable de los planetas y a las fuerzas



no gravitacionales causadas por el carácter anisótropo de la sublimación.

### 2. La coma:

Es una envoltura de gas y polvo alrededor del núcleo que se desarrolla cuando éste es calentado al acercarse al Sol y desaparece cuando se aleja. La coma está constituida por moléculas sublimadas del núcleo y sus productos de fotodisociación y fotoionización, así como por partículas de polvo. Su brillo proviene de la emisión atómica y molecular (mayoritariamente producida por fluorescencia), de la luz solar reflejada en el polvo y de la emisión térmica. En ocasiones presenta ciertas estructuras más brillantes, como por ejemplo chorros, capas o envolturas parabólicas.

### 3. La cola de iones:

Está constituida por iones procedentes de la disociación de las moléculas expulsadas del núcleo en la coma y que son acelerados en la dirección antisolar por la acción del campo magnético interplanetario. La cola de iones brilla por fluorescencia.

### 4. La cola de polvo:

Está constituida por granos de polvo procedentes de la coma que son dispersados por la acción conjunta de la gravedad solar y la presión de radiación. El brillo de esta cola es debido a la luz solar reflejada y a su emisión térmica. El material procedente de estas colas es una fuente importante del material interplanetario.

## **1.2.2. Dinámica y clasificación**

A lo largo de esta sección, describiremos la clasificación habitual o clásica de los cometas así como una más reciente. Asociada a cada una de ellas hay, en general, ciertas ideas acerca de la formación y dinámica de los cuerpos pequeños en el Sistema Solar que también describiremos.

### **1.2.2.1. Clasificación clásica**

En general, la clasificación que se hace de los cometas es dinámica, esto es, según sus elementos orbitales. La clasificación más habitual o clásica se basa precisamente en los períodos orbitales y divide los cometas en dos grandes grupos. El primero de ellos es el constituido por los cometas nuevos o no periódicos, con órbitas cuasi parabólicas y el segundo constituido por los cometas periódicos que se mueven en órbitas elípticas. En este último grupo, aquellos con un período mayor de 200 años se llaman de largo período y el resto de corto período. Entre los últimos se distinguen a su vez dos subgrupos: Los cometas de la familia de Júpiter, con períodos inferiores a los 20 años, y los de tipo Halley. Dado que sus órbitas los llevan a la parte interna del Sistema Solar con mayor frecuencia, los cometas de la familia de Júpiter son los que resultan más accesibles y por lo tanto son los

más estudiados. Hay que decir que las fronteras entre las diferentes categorías son difusas, hallándose gran cantidad de propuestas de distintos autores. Por ejemplo, se ha propuesto recientemente una categoría de cometas de período intermedio (ver referencias en Horner et al. 2003), que abarcaría cometas con períodos entre los 30 y los 200 años, siendo considerados cometas de corto período únicamente aquellos con períodos menores de 30 años.

Los estudios de dinámica orbital nos indican que las órbitas cometarias no son originales. De hecho, la distinción que hacíamos anteriormente entre cometas nuevos, cometas de largo período y cometas de corto período ya es indicio de que pueden proceder de diferentes regiones del Sistema Solar. Gracias a la simulación dinámica de las órbitas cometarias, incluyendo las perturbaciones que pueden sufrir, se han identificado tres reservas principales de pequeños cuerpos helados, postuladas como origen de los núcleos cometarios: La nube de Oort, el cinturón de Kuiper y más recientemente el cinturón principal de asteroides. Una forma sencilla, aunque no demasiado precisa, de realizar esta clasificación es utilizar el parámetro de Tisserand con respecto a Júpiter  $T_J$ <sup>6</sup>. Así, el propio Júpiter tendría un parámetro  $T_J = 3$ , los cometas de la nube de Oort  $T_J < 2$ , los del cinturón de Kuiper  $2 \leq T_J \leq 3$  y los del cinturón principal  $T_J \geq 3$ .

### 1. La nube de Oort:

En los años 50, coincidiendo con la propuesta del modelo bola de nieve de Whipple (1950), Oort (1950) hizo una proposición revolucionaria en la dinámica cometaria. Basándose en los cálculos de las órbitas de cometas de largo período, Oort estudió la distribución energética de los cometas de largo período (la inversa del semieje mayor de sus órbitas). Así, descubrió un máximo de la distribución para cometas con un semieje mayor de 100000 UA. Además, los cometas asociados a dicho máximo no podían haber pasado por la región planetaria, ya que las perturbaciones en dicha zona no eran de magnitud suficiente como para provocar un cambio como el que los llevaría de esa zona a los confines del Sistema Solar. Por otro lado, el estudio de perturbaciones de estrellas pasando relativamente cerca del Sistema Solar indicaba que esos cometas producirían una distribución isótropa de cuerpos a tales distancias, aún partiendo de una distribución inicial cercana al plano orbital. Estas razones llevaron a Oort a postular la existencia de una nube esférica rodando al Sistema Solar que, perturbada gravitacionalmente, sería la fuente principal de los cometas de largo período. Parte de dichos cuerpos entrarían en la parte interna del Sistema Solar, donde aproximadamente la mitad sería expulsada al medio interestelar mientras que la otra sería capturada en órbitas altamente elípticas. La hipótesis original de Oort fue reforzada por el trabajo de Marsden et al. (1978), que refinaron el estudio inicial considerando la órbita original de 200 cometas y estimaron la distancia al Sol de la nube en unas  $4,3 \times 10^4$

---

<sup>6</sup>El parámetro de Tisserand es una combinación de elementos orbitales del problema de los tres cuerpos, cuya solución representa el movimiento de un pequeño cuerpo sometido a la gravedad de otros dos, mayores (en este contexto, el cometa, Júpiter y el Sol, respectivamente).

UA. Todavía no ha sido propiamente observada, dada la gran distancia a la que se encuentra, pero es la mejor alternativa como origen de los cometas nuevos, ya que aún no se ha hallado ninguno con órbita tan hiperbólica como debería tener alguno proveniente del medio interestelar (ver, e.g. Jewitt 2010 y las referencias allí).

Respecto a los orígenes de la propia nube, la baja densidad a esas distancias implica que los cuerpos que residen en ella no se pueden haber formado allí. La hipótesis más plausible sobre el origen de la nube de Oort supone que, tras la formación de los planetas y la migración a la que estuvieron sometidos (ver e.g. Dones et al., 2004, y referencias allí), éstos alteraron la órbita de cometas ya formados, especialmente entre las órbitas de Júpiter y Neptuno. De esos cometas dispersados, algunos desarrollarían órbitas muy elípticas que, siguiendo la hipótesis original de Öpic (1932) de que órbitas lo suficientemente grandes resultarían afectadas gravitacionalmente por material ajeno al Sistema Solar, terminarían estabilizándose e integrando y formando la nube de Oort.

Las cuestiones del tamaño de la nube de Oort y de la masa que contiene todavía continúan abiertas, siendo la suposición más aceptada actualmente que la masa es bastante menor que la de la Tierra y que se encuentra a una distancia entre las 50000 y 100000 UA. Respecto a procesos perturbativos para mandar cometas desde la nube de Oort al interior del Sistema Solar, se han propuesto, además de perturbaciones provocadas por estrellas, las provocadas por el paso de nubes moleculares gigantes o incluso la fuerza de marea del propio disco galáctico.

Un cometa cuyo origen estaría probablemente en la nube de Oort es el famoso cometa Hale-Bopp, uno de los cometas más espectaculares de los que nos han visitado en los últimos años. Entonces, según la hipótesis más plausible, Hale-Bopp se habría formado en la región entre Júpiter y Neptuno, de donde fue exiliado a la nube de Oort y donde ha permanecido durante la mayor parte de su vida hasta ser perturbado nuevamente y lanzado hacia el interior del Sistema Solar. El cometa Hale-Bopp será objeto de estudio en profundidad en esta memoria.

## 2. El cinturón de Edgeworth-Kuiper:

La región transneptuniana del disco entre unas 35 y 50 UA poblada de cuerpos pequeños que propusieron Edgeworth y Kuiper de modo independiente (Edgeworth 1949; Kuiper 1951) fue evidenciada por Fernandez (1980) y observacionalmente confirmada por Jewitt y Luu (1993). La hipótesis original está basada en que todos los cuerpos del Sistema Solar se formarían a partir de pequeñas condensaciones de material original, que mediante colisiones se agruparían en núcleos que irían creciendo. En la región transneptuniana, dada su baja densidad y gran período de rotación, el proceso de formación sería muy lento, formándose así núcleos pequeños pero muy numerosos. Parte de dichos núcleos se estabilizó, formando el cinturón.

En un principio se pensaba que el cinturón de Edgeworth-Kuiper era simplemente un remanente del disco de acrecimiento del Sol, sin embargo aparentemente ha sido objeto de numerosos procesos dinámicos. Prueba de ello es el hecho de que su masa actual es menor que una masa terrestre, lo que es demasiado poco para

un proceso de acrecimiento en esa zona. Lo más probable es que sean los restos de un anillo inicial unas 100 (o incluso 1000) veces más masivo (Jewitt, 2010).

Gran parte de los objetos del cinturón de Kuiper (que llamaremos KBOs siguiendo la notación habitual en la literatura especializada) son dinámicamente estables, bien por estar lejos del perturbador local, Neptuno, o por estar en zonas de resonancia con él. Sin embargo hay otra población, llamada el disco disperso (en inglés *scattered disk*), compuesta de objetos con mayor excentricidad que los KBOs. El disco disperso es una población relacionada dinámicamente con el cinturón de Edgeworth-Kuiper, que sufre grandes inestabilidades responsables en general de mandar lejos los cuerpos que la componen, disparando sus excentricidades. Este disco se considera en ocasiones como una región análoga inestable del cinturón. Esto constituye otra prueba más de que esta zona ha sido dinámicamente despojada de objetos en el tiempo transcurrido entre su formación (en el Sistema Solar temprano) y la actualidad.

El cinturón de Kuiper ha sido propuesto como el origen de los cometas de la familia de Júpiter (Fernandez, 1980), ya que al presentar bajas inclinaciones, parece poco plausible que provengan de una región esférica. Sin embargo, el camino desde el cinturón de Kuiper a las órbitas de corto período no sería directo. La fuente última de los cometas de corto período podrían ser los Centauros, una población de cuerpos helados que orbita alrededor del Sol entre Júpiter y Neptuno. Su proximidad a los planetas gigantes hace que los Centauros tengan una vida dinámica relativamente corta, del orden de  $10^6$  años. En el trabajo de Horner y Lykawka (2010) se indica que se han considerado como posibles progenitores de los Centauros tanto el cinturón de Edgeworth-Kuiper como el disco disperso, y ellos mismos proponen como progenitores a los troyanos planetarios <sup>7</sup>, principalmente los de Júpiter y Neptuno. Aparte de los indicios que nos proporciona la dinámica del vínculo entre los cometas de corto período y los Centauros está el hecho de que algunos de estos objetos, como el famoso 29P/Schwassmann-Wachmann 1, muestran actividad, desarrollando una coma y una apariencia plenamente cometaria. Este objeto, el 29P, cuyo origen presumiblemente está en la región transneptuniana será también objeto de estudio en esta memoria.

### 3. El cinturón principal:

El cinturón principal de asteroides es una región entre Marte y Júpiter poblada por numerosos cuerpos pequeños. Aunque no es estrictamente una reserva de cuerpos helados (ya que los asteroides son cuerpos rocosos) hay evidencia de al menos presencia pasada de agua en muchos de sus cuerpos. En los últimos años está siendo ampliamente estudiada por la comunidad cometaria debido a que es allí donde ha aparecido una posible nueva categoría de cometas. En él han sido descubiertos recientemente una serie de posibles cometas (Main Belt Comets, o MBCs), que

---

<sup>7</sup>Los troyanos son reservas más o menos estables de objetos en resonancia 1:1 con los grandes planetas. Comparten, pues, una órbita similar a la del planeta al que estén asociados, moviéndose en torno a los puntos de Lagrange  $L_4$  y  $L_5$  de dicha órbita.

salvo por el hecho de que despliegan aparente actividad cometaria (coma y colas) no se distinguirían de los asteroides. La población de MBCs, por novedosa, todavía es bastante desconocida y actualmente se ha detectado actividad en menos de una decena de cuerpos del cinturón principal.

El primero en ser descubierto (y mejor observado de todos ellos), el Elst-Pizarro, es el que más indicios presenta de que su actividad sea debida a sublimación de gas, lo que lo convertiría realmente en un cometa, como argumenta Jewitt (2010). En primer lugar, presenta actividad recurrente tras el paso por el perihelio, hecho que apunta a que el polvo liberado no es debido a otros fenómenos como un impacto, una rotación demasiado rápida o la carga electrostática de la superficie por partículas solares, sino a sublimación de gases. Sin embargo, todavía no se ha detectado el gas, de modo que únicamente se han proporcionado límites superiores a su producción (según Jewitt, 2010 de  $1 \text{ kg s}^{-1}$ ).

La posibilidad de que haya hielo en estos objetos hace que nos preguntemos la causa de que haya podido sobrevivir en estos cuerpos tanto tiempo a tan poca distancia del Sol. Una de las hipótesis más plausibles es la formación de un manto refractario aislante del orden de metros, que aislaría el material volátil. En esta materia, el modelizado termofísico también tiene un papel: el estudio realizado por Prialnik et al. (2010) indica que, si bien los cuerpos más pequeños probablemente perdiesen el hielo en el tiempo desde su formación en los albores del Sistema Solar, objetos mayores capturados por el cinturón o formados allí hace unos cientos de megaaños podrían conservar hielo a profundidades del orden de 10 metros. Un fenómeno posterior (probablemente un impacto), destruiría el manto en alguna zona, exponiendo el hielo y permitiendo su sublimación, al menos hasta el desarrollo de otro manto lo suficientemente aislante. Respecto al origen de estos cometas, parece que hay bastante acuerdo en que se formaron in situ, por la improbabilidad de caminos dinámicos hasta sus órbitas actuales, y por la semejanza espectroscópica y dinámica del Elst-Pizarro a la familia del asteroide Themis (Licandro et al., 2011).

Como se puede deducir de esta sección, la aparente sencillez de esta clasificación se va perdiendo a medida que vamos conociendo mayor cantidad de cuerpos pequeños poblando nuestro Sistema Solar, existiendo una gran probabilidad de interrelaciones entre los mismos. Esto hace interesante introducir una nueva clasificación orbital en la que los cambios y transiciones resultan más naturales.

#### **1.2.2.2. Nueva clasificación**

Como hemos mencionado, el descubrimiento de los MBCs dificulta la distinción tradicional (composicional o dinámica) entre cometas y asteroides. Cuestiones de este tipo sugieren que los cuerpos pequeños en general son dinámicamente procesados de un modo muy activo y podrían pasar de una población a otra. La clasificación que vamos a describir a continuación, propuesta por Horner et al. (2003) sigue esta filosofía de considerar los cuerpos pequeños como objetos susceptibles de cambiar de categoría, con una gran cantidad de clases intermedias.

Las distintas categorías se basan, más que en los períodos orbitales, en cuál es el objeto más influyente en el perihelio y afelio de cada objeto. La zona de control de cada perturbador será aproximadamente tres veces el radio de Hill <sup>8</sup>. Para clasificar un objeto, en primer lugar se considera su perihelio y por quién está controlado, a continuación, esta gran categoría se subdivide según el objeto que controle el afelio, y finalmente la clasificación se puede refinar todavía más al considerar el parámetro de Tisserand respecto al perturbador del perihelio. Los objetos con perihelio menor que 4 UA están formalmente fuera de la esfera de control de Júpiter aunque en la práctica, sus órbitas están afectadas por él. Son estos objetos a los que Horner llama cometas, que se dividirán en Tipo Encke, de corto período, de período intermedio o de largo período según sus afelios. A partir de ahí, los cuerpos (a los que Horner se refiere como cometoides, en el caso de los dominados por Júpiter y simplemente objetos en el resto de casos) se clasifican como acabamos de describir, según sus perturbadores del perihelio, afelio y su parámetro de Tisserand. En el trabajo de Horner et al. (2003) se pueden consultar, además de ejemplos de cuerpos en cada una de las poblaciones, simulaciones mostrando caminos dinámicos entre las diferentes poblaciones propuestas.

### **1.3. La naturaleza cometaria: algunas cuestiones abiertas.**

El conocimiento sobre la naturaleza o esencia cometaria se ha ido construyendo por la contribución de pequeños avances en un campo concreto (e.g. composición) que adquieren sentido sólo cuando se interrelacionan con los obtenidos en otros (e.g. dinámica). Teniendo esto en cuenta y sin olvidarlo, en un intento de sistematización para facilitar la exposición de las ideas que han motivado la realización de esta memoria, sería posible distinguir cuatro grandes líneas de trabajo en los estudios cometarios. Éstas serían: dinámica, formación y estructura, composición y actividad cometaria, todas ellas, como decimos, fuertemente relacionadas. Los conceptos que tenemos en cada una de las líneas, con frecuencia, se inspiran o desarrollan a partir de avances o resultados obtenidos en el resto que, arbitrariamente, hemos definido. A continuación comentaremos algunos aspectos de estas líneas sin pretender dar una descripción completa de todos los avances y conocimiento que tenemos en ellas. Sólo destacaremos los aspectos de mayor relevancia relacionados, de una u otra manera, con la motivación para la realización de esta memoria.

Como ya hemos indicado, la dinámica, una de las principales herramientas para avanzar en la comprensión de la naturaleza cometaria, nos ha permitido identificar distintas familias de cometas y, con ello, la sospecha de que éstas podrían mostrar diferencias en lo que se refiere a su composición y en los procesos que han contribuido a su formación. La dinámica queda más allá de los objetivos de nuestro

---

<sup>8</sup>El radio de Hill alrededor de un cuerpo delimita la región a partir de la cual otro pequeño objeto quedaría atrapado por su atracción gravitatoria, convirtiéndose en un satélite.

trabajo por lo que, salvo por cuestiones puntuales, no ahondaremos en ella y nos centraremos en las otras tres grandes líneas y las principales cuestiones abiertas.

### 1.3.1. Formación y estructura cometarias

Para introducir algunos de los conceptos actuales sobre la formación y estructura cometarias así como algunas de las cuestiones abiertas, es conveniente describir aquellos hechos observacionales de los que se nutre, como sería la detección de moléculas posibles trazadoras de la temperatura interior o la densidad cometaria.

#### 1.3.1.1. Temperaturas: Formación

En algunos cometas (como IRAS-Araki-Alcock, Hyakutake, Halley o, más recientemente, en el Ikeya-Zhang) se ha detectado la molécula de  $S_2$  y se sospecha de su ubicuidad (e.g. A'Hearn et al., 2000). La fuente de esta molécula no está clara, habiéndose propuesto distintos mecanismos para su formación. Podría ocurrir que esta molécula se forme bien en la zona superficial del núcleo (e.g. A'Hearn et al., 1983), o bien por reacciones químicas en la parte más interna de la coma (e.g. Boice y Reylé, 2005) y, en consecuencia, su detección no nos ofrecería información sobre la formación cometaria. La alternativa es que la molécula de  $S_2$  se forme por irradiación de moléculas con azufre en los mantos de los granos interestelares, los cuales, posteriormente integrarían los núcleos cometarios (Grim y Greenberg, 1987). Si esta hipótesis es cierta, la detección de  $S_2$  sería garantía de que esos granos helados que integran el núcleo no han sido calentados por encima de los 30 K, dada la alta volatilidad de la molécula de azufre.

Otro indicio que es posible relacionar con la temperatura de formación de los núcleos cometarios es la razón de los estados orto y para de las moléculas de agua, amoníaco o metano detectadas en cometas. Se sabe que no se puede pasar de un estado a otro ni radiativa ni colisionalmente. Esto implica que las abundancias relativas de estos dos estados nos proporcionaría información directa acerca de la temperatura de formación del hielo. Las razones orto-para medidas en distintos cometas y utilizando distintas moléculas apuntan, de manera sistemática y consistente, a una temperatura (de spin) de 30K, la cual puede ser interpretada como la temperatura de equilibrio térmico de condensación de las moléculas sobre granos fríos (e.g. Kawakita et al., 2006). Ahora bien, esa temperatura no necesariamente tiene que reflejar la temperatura de formación del núcleo, sino sólo la de condensación de los hielos sobre los granos y, en este caso, las temperaturas de la nube molecular presolar. Kawakita et al. (2006) y Shinnaka et al. (2011) llegan a esa conclusión a partir de la consistencia de las temperaturas derivadas en distintos cometas, ya que no existen, prácticamente, diferencias entre las derivadas en cometas de la familia de Júpiter y las derivadas en cometas procedentes de la nube de Oort. Si las temperaturas derivadas de las razones orto-para reflejasen las temperaturas de formación de los núcleos, los cometas de la nube de Oort (formados en la región Júpiter-Neptuno) deberían presentar temperaturas mayores que las determinadas

en los cometas de la familia de Júpiter (formados más allá de Neptuno) si se acepta un razonable gradiente de temperatura con la distancia heliocéntrica en el disco protoplanetario. Evidentemente, el gradiente esperado entre las distintas regiones de formación depende de muchas suposiciones y configuraciones del Sistema Solar inicial y, por lo tanto, cualquier conclusión resulta especulativa. Además, en nuestra opinión, la estadística todavía no es completa. Sólo se ha determinado la temperatura de spin en 13 cometas, de los cuales sólo 3 son de la familia de Júpiter. Entendemos, por tanto, que no se puede afirmar definitivamente si la temperatura refleja la de formación de los núcleos o la de condensación de los hielos en granos presolares. En cualquier caso, hay que resaltar la coincidencia entre la temperatura de spin y la temperatura exigida para retener la molécula de azufre.

Vemos que existen datos que admiten la interpretación de que los cometas, al menos su material más volátil, se podría haber formado directamente de granos interestelares, con escaso procesado durante la formación del Sistema Solar. Esta es la principal hipótesis tras el modelo de Greenberg (1982, 1998) según la cual los cometas, básicamente se formarían por acrecimiento de granos interestelares de polvo con un manto de hielo, con limitado procesado durante la fase de colapso de la nube molecular. Aparte de la interpretación derivada de las temperaturas nucleares, hay otras evidencias composicionales a favor de esta hipótesis. Entre ellas mencionar, por ejemplo, las abundancias deuterio-hidrógeno (D/H) medidas en diversos cometas, las cuales son de las más ricas en el Sistema Solar (e.g. Bockelée-Morvan, 2011). Según Ehrenfreund et al. (2004) ese enriquecimiento relativo en deuterio podría ser debido a química protosolar o interestelar. También favorecería el modelo de Greenberg la identificación de moléculas orgánicas complejas y otros gases exóticos que apuntan a que los cometas podrían preservar la composición interestelar (ver e.g. Ehrenfreund y Botta 2005, Bockelée-Morvan 2011).

En cualquier caso, lo que sí se puede concluir es que la composición molecular (y la isotópica) sugiere procesos químicos que tuvieron lugar a muy baja temperatura aunque no se pueda concluir, todavía, si éstos tuvieron lugar en las partes externas del Sistema Solar o en la nube molecular presolar (e.g. Bockelée-Morvan 2011)

Lo dicho anteriormente es lo que se puede derivar del componente volátil cometario. Sin embargo, el material refractario, o parte de él al menos, parece indicar lo contrario, formación a altas temperaturas dentro del propio Sistema Solar. Observaciones en el infrarrojo de las comas cometarias revelan la presencia de una emisión en  $11.2 \mu\text{m}$  la cual es atribuida a la presencia de olivino cristalino (e.g. Hanner et al. 1994, Wooden et al. 2004, Hanner 2005, etc). La existencia inequívoca de silicatos cristalinos en cometas fue encontrada en las muestras que trajo la sonda Stardust (Brownlee et al., 2006). Por un lado ocurre que la formación de silicatos cristalinos, ya sea por condensación o por transformación de silicatos amorfos, requiere altas temperaturas. Por otro se encuentra que el medio interestelar tiene una cierta “deficiencia” de silicatos cristalinos, siendo en su mayoría amorfos. Estas circunstancias sugieren, por un lado, que parte de los silicatos detectados en cometas se debieron formar en las regiones más calientes de la nebulosa solar. Por otro, que durante la formación del Sistema Solar debió haber turbulen-



cias de gran escala que transportaran ese material producido en las zonas más calientes hasta las zonas más frías, tras la línea de hielo (ver e.g. Brownlee et al., 2006).

Como resumen de lo dicho hasta ahora, los datos obtenidos hasta la fecha sobre la formación de los cometas sugieren que éstos debieron formarse por acrecimiento de partículas que incluirían un componente volátil presumiblemente formado a bajas temperaturas y con un escaso procesamiento térmico así como productos formados en las regiones más calientes de la nebulosa solar. A partir de ahí, es decir, cómo se produjo ese acrecimiento hasta formar cuerpos del tamaño de los kilómetros, no existe una descripción definitiva y nuestra información se limita a los resultados de modelos teóricos (e.g. Weidenschilling, 2004) los cuales se inspiran tanto en resultados de laboratorio (e.g. Blum y Münch, 1993) como en algunos datos relacionados con la posible estructura cometaria.

### 1.3.1.2. Densidades: Estructura.

Entre los datos relacionados con la estructura cometaria destacaríamos, principalmente, la densidad. Entendemos que ésta es una magnitud muy importante pero, dado el pequeño tamaño de los cometas, ha resultado imposible, hasta ahora, medirla directamente (mediante perturbaciones a sondas espaciales). Todas las determinaciones de densidades realizadas hasta la fecha son indirectas, requiriendo el uso de modelos y, por tanto, dependientes de las suposiciones que éstos incluyan. El método más extendido para la determinación de densidades cometarias se basa en la comparación, de manera similar a como hizo originalmente Whipple (1950), de los cambios no gravitacionales que sufren los cometas con el cambio de momento que le induce la sublimación de agua, estimada a partir de un modelo termofísico. Esa comparación nos proporciona directamente la masa del cometa y, si su tamaño es conocido, la densidad. Con este método se han estimado las densidades del cometa Halley, 500-1200 kg m<sup>-3</sup> (Skorov y Rickman, 1999); el 67P/Churyumov-Gerasimenko, 100-600 kg m<sup>-3</sup> (Davidsson y Gutiérrez, 2005), el 81P/Wild 2, 600-800 kg m<sup>-3</sup> Davidsson y Gutiérrez (2006), o el Tempel 1, 450 ± 250 kg m<sup>-3</sup> Davidsson et al. (2007). La principal crítica a este método, como se ha comentado, es la posible dependencia del resultado de las suposiciones incluidas en el modelo termofísico utilizado para estimar la transferencia de momento al núcleo. Sin embargo, la estimación de la densidad del cometa Tempel 1 realizada a partir del experimento Deep Impact, obtenida con un método independiente, proporciona resultados similares y da cierta confianza al método anterior. Richardson y Melosh (2006), utilizando la trayectoria balística de las partículas de polvo levantadas tras el impacto de Deep Impact, estimaron una densidad para el Tempel 1 de 400 ± 300 kg m<sup>-3</sup>, prácticamente la obtenida con modelos termofísicos y no gravitacionales.

Actualmente se ha estimado la densidad de menos de 10 cometas, y los datos todavía muestran cierta dispersión y son insuficientes para establecer un valor definitivo (ver tabla 1.1, en la que se presentan los resultados de estimaciones para

**Cuadro 1.1:** Tabla con datos tomados de la Tabla V del trabajo Lamy et al. (2007), en la que se revisan las densidades estimadas para diferentes cometas hasta el momento. Esta tabla ha sido completada con otros datos de densidad, descritos en el texto.

Objeto	Densidad ( $\text{kg m}^{-3}$ )	Rango ( $\text{kg m}^{-3}$ )	Referencia
1P Halley	600	200-1500	Sagdeev et al. (1988)
	$\leq 1430$	30-4900	Peale (1989)
	850	500-1200	Skorov y Rickman (1999)
9P/Tempel 1	350	100-600	Richardson y Melosh (2006)
	450	200-700	Davidsson et al. (2007)
19P/Borrelly	490	290-830	Farnham y Cochran (2002)
	240	180-300	Davidsson y Gutiérrez (2004)
67P/C-G	350	100-600	Davidsson y Gutiérrez (2005)
81P/Wild 2	700	600-800	Davidsson y Gutiérrez (2006)
D/Shoemaker-Levy 9	550	500-600	Solem (1995)
	700	500-900	Asphaug y Benz (1996)

la densidad cometaria compilados en el trabajo de Lamy et al. 2007 y completada con las estimaciones que hemos dado en el texto anterior). En cualquier caso, prácticamente todas las densidades cometarias apuntan a un valor inferior a los  $1000 \text{ kg m}^{-3}$ , favoreciéndose el intervalo  $200\text{-}700 \text{ kg m}^{-3}$ . Se puede decir entonces que la densidad cometaria, si bien está constreñida, es un problema abierto, especialmente por el escaso número de determinaciones. Sin embargo ya de esos valores se puede sacar alguna conclusión. Sabiendo que los cometas están constituidos por hielo de agua (cuya densidad compacta es, aproximadamente,  $1000 \text{ kg m}^{-3}$ ) y material refractario (con una densidad compacta superior a la del hielo de agua) la lectura inmediata de este dato es que los cometas deben ser cuerpos muy porosos. La cuestión, directamente relacionada con su estructura, es si se trata de microporosidad, a nivel de los granos que formarían el núcleo o macroporosidad, grandes vacíos en el interior del núcleo. Esto nos llevaría a los distintos modelos propuestos para la estructura cometaria.

Desconociendo cómo se llevó a cabo el proceso de acrecimiento que formó los planetesimales y los procesos que esos planetesimales sufrieron cuando el Sistema Solar era dinámicamente más inestable que en la actualidad, sólo podemos plantear hipótesis de trabajo. Hay varios modelos para describir la estructura cometaria que intentan, en mayor o menor medida, definir o conectar con un posible escenario de formación de los núcleos y que, por tanto, le asignan un mayor o menor carácter primordial.

El primer modelo, que podríamos llamar primordial, es el propio de Whipple (1950). Según este modelo, el núcleo es un conglomerado de hielo que se formaría por acrecimiento de partículas individuales. Según los cálculos de Donn (1963), el acrecimiento de partículas con velocidades relativas menores que  $100 \text{ m/s}$ , condición necesaria para mantener las temperaturas necesarias para preser-

var el material más volátil que el agua, daría lugar a la formación de cuerpos muy porosos, como sugieren los datos de la densidad. Los experimentos de laboratorio sobre acrecimiento así como los modelos de formación de planetesimales (ver e.g Weidenschilling, 2004) prácticamente descartan este escenario, pues todo parece indicar que el crecimiento, aún primordial, seguiría una jerarquía fractal. Esto nos lleva al segundo modelo propuesto para la estructura cometaria, el modelo fractal de Donn (1991). Según este modelo, el núcleo crecería por acumulación de granos individuales, agregados de granos y agregados de agregados, combinando de alguna manera microporosidad con macroporosidad. El tercer modelo se basa en la hipótesis de que el núcleo se formó a partir de aglomerados que crecían hasta un tamaño límite a partir de granos individuales. Según este modelo, propuesto por Weissman (1986), el núcleo tendría macroporosidad siendo constituido por grandes bloques, con tamaños de varios cientos de metros, débilmente ligados por material volátil helado. Éste sería el modelo de “pila de escombros” en el que los bloques que conforman el núcleo serían considerados condensaciones primordiales. Este modelo se inspira en algunos hechos observacionales como puede ser la ruptura del cometa Shoemaker-Levy 9 en un paso orbital anterior a su colisión con Júpiter, desintegrándose en varios bloques de tamaños similares que se pueden ver en la Fig. 1.9. A partir del patrón de desintegración del núcleo se pudo estimar la tensión interna, resultando ser muy baja (Asphaug y Benz, 1994) y compatible con el concepto de pila de escombros.

El modelo de “pila de escombros” es el más aceptado hasta la fecha. Sin embargo, como señala Thomas (2009), uno de los principales problemas que plantea este modelo es su justificación dentro de modelos generales de formación de cuerpos del Sistema Solar como el de Weidenschilling (2004). En esos modelos globales, se favorece la formación de cuerpos por acumulación de tamaños diferentes. Además, la acumulación de objetos de tamaños diferentes llevaría, posiblemente a la compactación y aplastamiento de los objetos pequeños, de tal forma que el objeto final podría crecer como en capas. Estas ideas, junto con las imágenes que se tomaron del Tempel 1 con la misión Deep Impact, han sido las que han inspirado el modelo más reciente para la estructura nuclear, el llamado “modelo de capas” de Belton et al. (2007). El problema es que este modelo, si bien podría resultar cualitativamente compatible con los modelos de formación de cuerpos en el Sistema Solar, supondría casi con toda seguridad, una compactación y una tensión interna que posiblemente no encuentren respaldo en las frecuentes fracturas cometarias (como por ejemplo la mencionada del Shoemaker-Levy 9 o la del 1999 S/ LINEAR). Como afirma Thomas (2009), en lo que se refiere a estructura, nuestro conocimiento es todavía demasiado limitado como para constreñir los conceptos. Esto es además cierto porque aún conocemos poco de la evolución dinámica de la región trans-neptuniana y sería incluso posible que la naturaleza primordial cometaria quedase sustituida por una, que aún reteniendo características primordiales en sus hielos, fuese colisionalmente evolucionada.



**Figura 1.9:** Imagen de la cadena de 21 fragmentos en la que se desintegró el cometa Shoemaker-Levy 9 debido a un paso cercano a Júpiter, tomada con el telescopio espacial Hubble. Créditos de la imagen: NASA, ESA, H. Weaver y E. Smith (STScI)

### 1.3.2. Composición cometaria

La mayoría de la información sobre la composición cometaria se ha obtenido de las comas cometarias, a partir de espectroscopía milimétrica, submilimétrica, óptica e infrarroja completada con la espectroscopía de masas embarcada en las sondas Giotto y Vega. Las muestras de material de la coma del cometa Wild 2 analizadas en el laboratorio completarían la fuente de información del material cometario. Hasta la fecha, la única detección directa del material del núcleo se ha obtenido con la misión Deep Impact, que permitió la detección de hielo de agua en la superficie de Tempel 1 (Sunshine et al., 2007).

Las observaciones sistemáticas de las comas cometarias nos han permitido detectar 26 moléculas padre diferentes (ver Tabla 1.2) así como distintos radicales, iones y átomos. Los principales componentes volátiles de los núcleos cometarios son el agua, seguidos del CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S y NH<sub>3</sub>, con abundancias que varían desde menos del 0.01 % al 20 %, aproximadamente, relativas a la del agua (ver e.g. Bockelée-Morvan, 2011).

Con respecto al material refractario, el espectro infrarrojo medio y lejano muestran la fuerte presencia de silicatos, olivinas y piroxenos, tanto amorfos como cristalinos (Hanner, 2005). Un análisis detallado de la composición del polvo cometario

**Cuadro 1.2:** Tabla resumen de varias incluidas en Crovisier y Encrenaz (2000) (ver, e.g. Gutiérrez 2001) actualizada con datos de Bockelée-Morvan (2011) en la que se presentan las moléculas y elementos identificados en cometas.

Moléculas padre					
H <sub>2</sub> O	~ 100	IR	HNCO	0.02-0.1	radio
CO	0.4-25	UV, radio, IR	NH <sub>2</sub> CHO	0.017	radio
CO <sub>2</sub>	3-11	IR	CH <sub>3</sub> CHO	0.02	radio
CH <sub>4</sub>	0.3-1.5	IR	HCOOCH <sub>3</sub>	0.08	radio
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	0.1-0.8	IR	NH <sub>3</sub>	0.5-1.6	radio,IR
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	0.15-0.4	IR	HCN	0.08-0.25	radio,IR
H <sub>2</sub> CO	0.15-1.4	radio	HNC	0.002-0.02	radio
CH <sub>3</sub> OH	1-7	IR, radio	CH <sub>3</sub> CN	0.01-0.04	radio
HCOOH	0.07-0.15	radio	HC <sub>3</sub> N	0.02	radio
N <sub>2</sub>	0.02-0.1	Visible	H <sub>2</sub> S	0.1-1.5	radio
H <sub>2</sub> CS	0.05	radio	CS <sub>2</sub>	0.04-0.3	radio,UV
OCS	0.1-0.2	IR	SO <sub>2</sub>	~0.2	radio,IR
S <sub>2</sub>	0.001-0.1	UV	HOCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	0.3	-
NS	0.2	-			
Radicales					
CN		Vis, IR, rad	NH		Vis
C <sub>2</sub>		Vis, UV, IR	NH <sub>2</sub>		Vis, IR
C <sub>3</sub>		Vis	CS		UV
CH		Vis, IR	SO		UV
OH		UV, IR, rad			
Iones					
CH <sup>+</sup>		Vis	HCO <sup>+</sup>		Vis
OH <sup>+</sup>		Vis	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>		Vis
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>		Vis	C <sup>+</sup>		Vis
CO <sup>+</sup>		Vis, UV, rad	O <sup>+</sup>		Vis
N <sub>2</sub> <sup>+</sup>		Vis	Ca <sup>+</sup>		Vis
CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>		Vis, UV			
Átomos					
H, O		Vis, UV	Ca, Cr, Mn, Fe		Vis
C, S		UV	Ni, Cu, Co, V		Vis
Na, K		Vis			

ya se obtuvo con las medidas de los espectrómetros de masas PUMA embarcados en las sondas Vega que exploraron el cometa Halley en 1986 (Jessberger et al., 1988). Estos instrumentos revelaron que aproximadamente el 30 % de los granos estaban constituidos por elementos casi puros de bajo peso atómico (C, H, O, N) o partículas “CHON”. Otro 35 % estaba constituido por silicatos (Mg, Si, Fe) y el 35 % restante por una mezcla de las dos, con una composición similar a las de las condritas carbonáceas (H, C, O, Mg, Si, S y Fe). Esta composición condritica ha sido confirmada con las muestras traídas por Stardust del entorno del cometa Wild 2 (Flynn et al., 2006).

En lo que se refiere a composición, hay aún muchas cuestiones abiertas como serían la conexión entre algunas moléculas hijas y padre detectadas (e.g. origen del C<sub>3</sub>, Helbert et al. 2005) o la explicación de marcas espectrales que no han podido ser identificadas (ver e.g. Crovisier et al. 2004). Entre todas las cuestiones abiertas destacaremos dos que, de una u otra manera, están relacionadas con esta memoria.

### 1.3.2.1. Diversidad composicional

Como ya mencionamos, la dinámica nos sugiere, al menos, dos posibles regiones de formación de los núcleos cometarios: la zona Júpiter-Neptuno, de donde fueron dispersados a la nube de Oort y de donde proceden los cometas de largo período, y la zona transneptuniana desde la que, posiblemente vía disco disperso y tras una fase como Centauros, los cuerpos helados alcanzan el Sistema Solar interno para convertirse en cometas de la familia de Júpiter.

Por un lado, en un escenario más o menos estático, es entonces lógico suponer que los gradientes de presión, temperatura y composición química presentes en la nebulosa solar fuesen causa de diferencias en la composición de los cometas de la familia de Júpiter comparados con los de la nube de Oort. Por otro lado, si hubo mezcla del material de la nebulosa, como sugiere la detección de silicatos cristalinos, no está claro cómo podría esto haber afectado a la diversidad composicional pero en principio, la mezcla podría sugerir un mayor grado de homogeneización.

El hecho observacional es que los cometas muestran diversidad química. A’Hearn et al. (1995) realizaron un estudio sobre las abundancias relativas de distintos radicales detectados en las comas de 85 cometas. El resultado principal fue la diversidad composicional aunque, en un intento de sistematización, pudieron identificar dos tipos de cometas: los que llamaron típicos y los que definieron como deficitarios en carbono. Estas dos clases de cometas fueron posteriormente confirmadas por Schleicher y Bair (2008). A’Hearn et al. (1995) encontraron que, en su muestra, podría haber algunas diferencias entre los cometas de la nube de Oort, que incluían muy pocos cometas deficitarios en carbono y los de la familia de Júpiter, de los que aproximadamente la mitad eran deficitarios en carbono. Más allá de ese resultado, la diversidad composicional no ha permitido establecer mas diferencias entre los cometas de la nube de Oort y los de la familia de Júpiter. Este hecho ha llevado a algunos autores a pensar que esa diversidad podría tener un origen

primordial, justificada en la propia mezcla de material por las turbulencias en el Sistema Solar temprano (ver e.g. Bockelée-Morvan 2011 y referencias allí).

El problema relacionado con la diversidad composicional es si ésta, determinada a partir de las abundancias en la coma, refleja composición primordial o, siquiera, composición nuclear. Efectivamente, los experimentos llevado a cabo en el laboratorio con sublimación de mezclas de hielos ponen de manifiesto la dificultad de derivar abundancias nucleares a partir de estimaciones de la coma. Como ejemplo de ello mencionar los experimentos de Bar-Nun y Laufer (2003) con los que mostraron que las abundancias derivadas de la composición sublimada de una muestra de hielos podría ser, fácilmente, un factor 10 mayores que las abundancias de los “núcleos” experimentales. Esto hace pensar que la diversidad composicional cometaria podría tener origen en aspectos evolutivos. Como predijo Whipple (1950) y han mostrado algunos experimentos teóricos (e.g. Houppis et al. 1985; Espinasse et al. 1991, etc.) es aceptable pensar que los frentes de sublimación de los distintos compuestos se localicen a distintas profundidades, lo que originaría diversidad composicional debido a las diferentes historias térmicas de los distintos cometas. Además, observaciones a lo largo del tiempo de cometas como Hale-Bopp nos muestran que las abundancias relativas detectadas en la coma sufren variaciones con el tiempo, dependiendo de las condiciones de iluminación. En el capítulo dedicado a la aplicación del modelo al cometa Hale-Bopp trataremos esta cuestión con mayor detalle.

Un ejemplo de la diversidad composicional nos lo proporciona la segunda molécula volátil detectada en mayor cantidad, el monóxido de carbono. A partir de las determinaciones de las tasas de producción de monóxido de carbono y agua en la coma de distintos cometas se ha estimado que la abundancia molecular,  $\frac{\text{molec}_{\text{CO}}}{\text{molec}_{\text{H}_2\text{O}}} \cdot 100$ , estaría en el intervalo 0.2- 24 pero sólo el 20 % de los cometas estudiados muestra abundancias totales superiores al 10 % (Mumma y Charnley 2011; Ootsubo et al. 2012; Paganini et al. 2012). Según nuestro conocimiento, la mayor abundancia de monóxido de carbono estimada a partir de abundancias en la coma se determinó en el cometa Hale-Bopp por Brooke et al. (2003), que obtuvieron una razón entre un 37 y un 41 %. Sin embargo, DiSanti et al. (2001) obtuvieron un 24 %, algo más moderado. La siguiente mayor estimación que conocemos es una razón del 30 % atribuida al cometa Hyakutake por Lis et al. (1997). Sin embargo, observaciones simultáneas realizadas por observadores independientes (DiSanti et al. 2003; Biver et al. 1999) no pudieron confirmar ese límite superior, determinando valores para la abundancia del monóxido de carbono que estarían entre los límites observacionales mencionados arriba.

Sabemos de experimentos con mezclas de hielos que la capacidad del hielo de agua de atrapar elementos volátiles es fuertemente dependiente de la temperatura de deposición (Bar-Nun et al., 2007). Sin embargo, si los núcleos cometarios se formaron a una temperatura en torno a los 30 K, como es posible interpretar de las temperaturas de spin que describimos anteriormente, en principio todos los núcleos deberían contener cantidades similares de monóxido de carbono, lo que no

encuentra respaldo en las observaciones. En este momento no es posible afirmar si la diversidad observada en el monóxido de carbono se debe a diferencias composicionales locales, a la propia evolución termofísica cometaria o, simplemente, refleja la imposibilidad de conectar de una manera fiable las abundancias determinadas en la coma con las abundancias nucleares.

### 1.3.2.2. Razón polvo-hielo

Tras la presentación de su modelo, en un segundo trabajo, Whipple (1951) estableció ciertas limitaciones al proceso de formación de los núcleos cometarios. Teniendo como referencia las abundancias de los elementos del Sistema Solar y comparando con las abundancias de las moléculas y elementos detectados entonces en las comas cometarias, afirmó que los núcleos cometarios debían estar formados al menos en sus dos terceras partes por hielos de compuestos hidrogenados. Correspondería así al material refractario un tercio de la masa del núcleo. De este modo, la razón de masas entre el polvo y el hielo,  $\frac{m_{\text{polv}}}{m_{\text{hice}}}$ , a la que nos referiremos como razón polvo-hielo propuesta por Whipple, sería 1/2.

La determinación de la razón polvo-hielo en los núcleos cometarios adolece de un problema similar al que tiene derivar las abundancias nucleares de volátiles a partir de observaciones en la coma. Por ejemplo, sabemos que el polvo se libera arrastrado por el gas. Esto supone que, por un lado, debemos asumir una eficiencia de arrastre (entendida como la masa de polvo que puede arrastrar una determinada masa de gas). Por otro lado, como sólo es posible estimar la cantidad de gas liberado, en el mejor de los casos podríamos obtener la razón polvo-gas, que no tiene que reflejar, necesariamente, la razón polvo-hielo nuclear.

La medida que podríamos llamar más directa de la razón polvo-hielo (que identificaremos en adelante con la razón polvo-gas al ser la mejor aproximación que podemos obtener) realizada hasta la fecha se basa en las estimaciones de la masa de polvo liberada detectada por los instrumentos PUMA de las sondas Vega en el cometa Halley. Mazets et al. (1987) pudieron estimar que la producción de polvo era del orden de  $10^4 \text{ kg s}^{-1}$ , siendo la del gas en torno a  $3 \cdot 10^4 \text{ kg s}^{-1}$ . Esto nos daría una razón polvo-gas (o polvo-hielo en primera aproximación) de 1/3, hasta cierto punto compatible con la propia suposición de Whipple (1951).

Aparte de esa medida in-situ, existe un gran número de estimaciones remotas de la cantidad de polvo producida en distintas cometas. Ello exige, generalmente, ajustar o invertir las imágenes ópticas o infrarrojas para obtener una estimación de la masa de polvo liberada (e.g. Finson y Probst 1968, Sanzovo et al. 1996, Fulle 1987, Moreno 2009, etc.). Por un lado, esto, obviamente, no es sencillo y está afectado por la incertidumbre derivada de las necesarias suposiciones del modelo para estimar el brillo que explicaría las observaciones (localización de la emisión del polvo, orientación del eje de rotación, distribución de tamaños de partículas, velocidad terminal del polvo, constantes ópticas, etc.). Por otro, las observaciones en un intervalo finito de longitudes de onda favorecen la detección de tamaños concretos de partículas, de modo que pueden subestimar la producción total de



polvo. Esto se evidenció, por ejemplo, con la espectrometría de masas del cometa Halley realizada por el instrumento PUMA de las Vega. Estos instrumentos revelaron la presencia de una alta densidad de partículas muy pequeñas, en torno a las  $0.01 \mu\text{m}$ , las cuales son difícilmente observables desde la Tierra, pero que suponen una fracción significativa de la masa total (Sagdeev et al., 1989). Como decimos las estimaciones de las fracciones polvo-gas son muy numerosas y no podrían describirse todas en detalle por lo que sólo mencionamos algunas que ilustran los resultados obtenidos. Quizás el resultado principal obtenido es que, al igual que las abundancias de elementos volátiles, las razones polvo-gas también muestran diversidad. Por ejemplo, Singh et al. (1992) y Sanzovo et al. (1996) estimaron la razón polvo-gas en 14 cometas, obteniendo valores entre 0.1 y 1, valores que empiezan a ampliar el margen predicho por Whipple (1951). Como hemos mencionado, los resultados dependen del modelo utilizado y tratamientos hidrodinámicos complejos proporcionan un rango más amplio. Por ejemplo, Fulle et al. (1998,2000) estiman razones polvo-gas entre 0.1 y 10 o incluso mayores dependiendo de los parámetros elegidos. La dificultad de estimar la razón polvo-gas y la dependencia del modelo quedaría ilustrada con los resultados estimados por Thomas y Keller (1991) para el Halley. Estos autores obtuvieron que la razón polvo-gas para este cometa era 1 pero afectada por una gran incertidumbre, pudiendo alcanzar hasta un valor de 40. Valor que estaría muy alejado del determinado por Mazets et al. (1987) para el mismo cometa con un método independiente. Más recientemente, Küppers et al. (2005) estimaron la razón polvo-gas a partir del material eyectado tras el impacto de Deep Impact con el cometa Tempel 1. Esta razón quizás sería la que mejor se podría identificar con la razón polvo-hielo ya que se estimó a partir de material liberado artificialmente. Sin embargo los resultados no fueron esperanzadores. Küppers et al. (2005) obtuvieron que la razón polvo-hielo podría estar entre 1 y 100 dependiendo de las características de la distribución de tamaños de las partículas emitidas. Como vemos, el principal problema en la determinación de la razón polvo-hielo proviene de la incertidumbre en la dinámica y características del polvo liberado. Aún superando ese paso, para poder acceder a la naturaleza cometaria todavía nos quedaría distinguir, como en el caso de las abundancias de volátiles, lo que podría ser diversidad primordial de la diversidad originada en la evolución termofísica cometaria.

### 1.3.3. Actividad cometaria

La cuarta gran línea de trabajo en la que hemos separado los estudios cometarios sería la actividad. Por actividad, de manera general, entendemos la producción de gas y polvo como consecuencia de la sublimación de los hielos cometarios al ser calentados por el Sol. Esta gran línea, como las anteriores, englobaría muchos aspectos de la naturaleza cometaria. Como previamente, destacaremos sólo aquellos relevantes para esta memoria.

La primera información de la actividad cometaria y su desarrollo nos la proporciona la evolución del brillo de las comas y las colas que se forman conforme el

cometa se acerca al Sol. El brillo de un cometa, algo más técnicamente su magnitud en el visible, aumenta conforme el núcleo se acerca al perihelio para empezar a disminuir cuando se aleja hacia el afelio. Esta variación del brillo es, generalmente, asimétrica con respecto al perihelio. Como ya se ha comentado, el modelo de Whipple (1950) para describir la naturaleza cometaria se fundamentaba en las fuerzas no-gravitacionales y su descripción termofísica (i.e. cómo se desarrollaba la actividad) era simplemente cualitativa. Si recordamos, Whipple (1950) proponía que los hielos presentes en el núcleo sublimaban cuando eran calentados por el Sol, arrastrando consigo las partículas de polvo que integrarían las comas y las colas. Relativamente poco después de la presentación del modelo de Whipple empezaron a desarrollarse distintos modelos termofísicos, aquellos que intentaban cuantificar, basándose en las ideas cualitativas de Whipple, cómo sublimaban los hielos y cómo se desarrollaba la actividad. Entre esos modelos mencionar, por ejemplo, el de Squires y Beard (1961), Watson et al. (1963) o Cowan y A'Hearn (1979). Concretamente, estos últimos mostraron que la asimetría alrededor del perihelio podría ser debida a la orientación del eje de rotación del núcleo cometario. Sin embargo, el paso definitivo en la termofísica cometaria vino, otra vez, de las fuerzas no-gravitacionales, no de la evolución del brillo. Marsden (1969) desarrolló unas funciones matemáticas que representando las fuerzas no-gravitacionales que actuaban sobre los cometas, permitían ajustar con gran precisión las órbitas cometarias. Delsemme (1972), con el desarrollo de un modelo de sublimación de hielo de agua, mostró que las funciones matemáticas de Marsden eran una buena representación de la curva de sublimación de agua que experimentarían los cometas en su camino orbital. Se establecía así que el agua podría ser el principal motor de la actividad cometaria, antes incluso de su detección. Que el agua es el principal motor de la actividad cometaria está fuera de duda actualmente. Prueba observacional de ello sería, por ejemplo, la existencia de una correlación lineal entre la magnitud visual heliocéntrica y la producción de agua, ambas determinadas observacionalmente. Analizando las producciones y agua de 15 cometas, Jorda (1995) encontró que se verificaba

$$\log(Q_{\text{H}_2\text{O}}) = 30,78 - 0,265m_h \quad (1.1)$$

expresión válida cuando los cometas están a menos de 2 UA del Sol. En ella,  $Q_{\text{H}_2\text{O}}$  representa la producción de agua y  $m_h$  la magnitud visual heliocéntrica.

Sabemos que el agua es el principal motor de la actividad cometaria, pero no es el único. Si la actividad cometaria dependiese únicamente de la sublimación de agua, los cometas sólo mostrarían coma cuando están a menos de 3 UA del Sol, que es cuando se alcanzaría, en primera aproximación, la temperatura donde la sublimación de hielo de agua empieza a ser significativa (superior a los 150 K). Sin embargo, hay muchas referencias de actividad a grandes distancias heliocéntricas, superiores a las 3 UA (ver e.g. Meech y Svoren 2004). Quizás el ejemplo más paradigmático de todos sea el Hale-Bopp, que muestra actividad más allá de las 25 UA (Szabó et al., 2008). La actividad a grandes distancias heliocéntricas es,

generalmente, atribuida a componentes más volátiles que el agua, como el CO, el segundo componente volátil mayoritario (Meech y Svoren, 2004). De hecho, al igual que Jorda (1995), Biver (2001) encuentra una correlación entre la magnitud visual y la producción de CO válida para distancias heliocéntricas mayores de 3 UA.

$$\log(Q_{\text{CO}}) = 30,0 - 0,28m_h \quad (1.2)$$

Biver (2001) encuentra que hay un Centauro, el único incluido en su muestra, el 29P/Schwassmann-Wachmann 1, que no verifica exactamente esa correlación, proponiendo  $\log(Q_{\text{CO}}) = 30,2 - 0,2m_h$ , lo que atribuye a que bien el 29P es pobre en polvo o pertenece a un grupo especial. En cualquier caso, la existencia de esas correlaciones, en principio, podría ser indicación de que la actividad a grandes distancias está controlada por el CO.

En la descripción más básica, la actividad cometaria aparece cuando los hielos presentes en el núcleo cometario subliman al ser calentados por el Sol. Ese gas liberado arrastra consigo pequeñas partículas de polvo que formarán las comas y las colas. Sin embargo ocurre que no todo el gas presente en las comas y colas procede directamente del núcleo. Esto resultaría evidente en algunos compuestos que bien son productos de posibles reacciones químicas que se producen en la coma circumnuclear o moléculas hijas producidas en la fotodisociación de moléculas padre. Este hecho ha generalizado el concepto de fuente extendida (ver e.g. glosario en Festou et al. 2004) que incluiría todos aquellos procesos que originan los compuestos presentes en las comas y colas cuyo origen no está en el núcleo. Dentro de las fuentes extendidas merece especial atención las llamadas fuentes distribuidas, término que, según la propuesta de Cottin y Fray (2008), hace referencia explícita a que el origen de algunos de los componentes gaseosos observados puede estar en el material refractario o helado presente en las propias comas, ya liberado desde el núcleo. En general, la detección de la existencia de una fuente distribuida en las comas cometarias se hace a partir de la distribución radial de la molécula en la coma lo que exige un análisis minucioso y, a menudo, especulativo.

La primera vez que se detectó la existencia, o contribución, de las fuentes distribuidas fue en el Halley, utilizando el espectrómetro de masas embarcado en Giotto. Meier et al. (1993) encontraron que el perfil cometocéntrico de abundancia del formaldehído no era compatible con su producción desde el núcleo, proponiendo que era liberado desde los granos de polvo ya presentes en la coma. La existencia de una fuente distribuida para el formaldehído ha sido, posteriormente, confirmada en otros cometas (e.g. Colom et al. 1992; Biver et al. 1999; etc). Desde la detección de la fuente distribuida para el formaldehído, se han propuesto fuentes distribuidas para otras moléculas como por ejemplo HNC (Wink et al., 1997), el CN (ver e.g. Festou, 1999), el OCS (dello Russo et al., 1998), el CS (Biver et al., 2006), el monóxido de carbono y la propia molécula de agua, éstas dos últimas de especial interés al ser los constituyentes volátiles mayoritarios.

Con respecto al monóxido de carbono y de manera similar al formaldehído,

Eberhardt (1999) también propuso la existencia de una fuente distribuida para el monóxido de carbono en el Halley. El problema en ese caso concreto fue que su origen no quedaba perfectamente definido pues parte del monóxido de carbono podría proceder de la fotodisociación del formaldehído (Cottin y Fray, 2008), y el monóxido de carbono tendría entonces una fuente extendida, no sólo distribuida. Más recientemente, los perfiles de monóxido de carbono determinados en el cometa Hyakutake también parecían ser compatibles con la existencia de fuentes distribuidas. En ese cometa, DiSanti et al. (2003) estimaron que sólo el 80 % del monóxido de carbono procedía directamente del núcleo. La dificultad de detectar la existencia de fuentes distribuidas y su contribución queda evidenciada con el caso del Hale-Bopp. En este cometa, uno de los más estudiados por su gran brillo, diversos autores proponen distintas fracciones para la contribución de las posibles fuentes distribuidas. Así mientras que Kuan et al. (2004) sugieren que, prácticamente, la totalidad del monóxido de carbono en el Hale-Bopp procede del núcleo, DiSanti et al. (2001) proponen que sólo el 50 % del monóxido de carbono tiene origen en el núcleo. El caso del 29P/Schwassman-Wachmann también resulta controvertido. Mientras que Crovisier et al. (1995) y Festou et al. (2001) proponían una emisión nuclear (aún con componente procedente del lado nocturno), Gunnarsson (2003) proponía una contribución muy significativa desde fuentes distribuidas.

El agua, el componente volátil mayoritario, es otro de los elementos que puede tener fuentes distribuidas. Es lógico suponer que si el propio gas liberado en el núcleo es capaz de arrastrar granos de material refractario también arrastre material volátil sólido (aunque la forma, i.e. como granos helados independientes del material refractario, como material incluido en los propios granos refractarios o formando un manto en ellos según el modelo de Greenberg 1998, depende de la microestructura del núcleo, la cual es desconocida) que se volatilizaría al alcanzar la coma. Durante mucho tiempo, ha habido varios programas observacionales dedicados a la detección de estos granos helados de agua, resultando infructuosos o inconclusivos (ver e.g. A'Hearn et al. 1981). La dificultad estriba, principalmente, en que esos granos helados (a diferencia de las fuentes distribuidas constituidas por material refractario) sublimarían muy rápidamente, muy cerca del núcleo, y su posible contribución resultaría prácticamente indistinguible de la nuclear. Hasta la fecha, hay poca evidencia observacional de la existencia de fuentes de distribuidas para el hielo, limitándose a unos pocos cometas. Según nuestro conocimiento, la primera vez que tentativamente se detectó la presencia de granos helados de agua fue en el cometa Bowell (Campins et al., 1983) con la identificación de un pico de absorción en  $3.25 \mu\text{m}$ . Poco después, Hanner (1984a) detectó una fuerte banda de absorción en  $2.9\text{-}3.0 \mu\text{m}$  en el cometa Cernis que interpretó como debida a la presencia de granos de hielos. Esas determinaciones, hay que decir, no eran definitivas pues los efectos alrededor de  $3 \mu\text{m}$  pueden ser debidos a la mezcla de granos presentes en la coma. Tras esas determinaciones tentativas, Davies et al. (1997) detectaron en el Hale-Bopp la presencia de bandas de absorción en  $1.5$  y  $2.4 \mu\text{m}$  que sí fueron consideradas prueba de la existencia de granos de hielos. Posteriormente, Kawakita et al. (2004) también presentaron la detección de granos de hielo

de agua en el cometa C/2002 T7 (LINEAR) a partir de las bandas en 1.5 y 2.05  $\mu\text{m}$ . La evidencia directa más fuerte de la presencia de granos helados en la coma de un cometa se ha obtenido recientemente, con la visita de la sonda EPOXI al cometa Hartley 2. En las imágenes que tomó la sonda se pueden identificar más que granos, como trozos o pedazos de hielo con tamaños entre 10 y 20 cm (A'Hearn et al., 2011). Estos bloques de hielo no se habían detectado anteriormente en ninguna de las otras visitas espaciales a núcleos cometarios. A pesar de esta limitada evidencia observacional (pues sería necesario saber si las detecciones son excepciones o se pueden generalizar), la sospecha de la existencia de fuentes distribuidas para el agua es fuerte (ver e.g. Beer et al. 2006). Esta sospecha se sustenta, aparte de en que sería el comportamiento más lógico, en la imposibilidad de explicar, con modelos termofísicos basados sólo en emisión nuclear (e.g. Enzian 1999), la tasa de producción del volátil, especialmente, a grandes distancias heliocéntricas.

Las dificultades y diferencias entre diferentes autores en la estimación de la contribución de las fuentes distribuidas a la producción total de volátiles se deben a muchos factores como son la propia estimación de la abundancia de la molécula en cuestión, que depende de la característica espectral que se esté estudiando, y el modelo de emisión desde el propio núcleo (lo que incluye velocidad de expansión de la molécula, localización de la emisión, etc.). Como ejemplo, mencionar la conocida discrepancia en la determinación de la producción de agua a partir de observaciones en radio con la obtenida en otros rangos espectrales (ver e.g. Crovisier, 2002). Esta circunstancia, la dependencia de la interpretación de los datos observacionales del modelo asumido, hace que sea difícil definir la posible contribución de las fuentes distribuidas. Sin embargo, es importante y necesario evaluar y estimar correctamente su contribución ya que para avanzar en la comprensión de la naturaleza cometaria y su posible evolución termofísica es necesario definir correctamente el origen del material volátil presente en las comas. Por ejemplo, asumir que todo el CO procede del núcleo cuando en realidad sólo la mitad lo hace llevaría a una sobreestimación de la inercia térmica que caracteriza el núcleo (lo que, por ejemplo, podría traducirse en una mayor densidad nuclear) y, por tanto, de su evolución térmica.

#### **1.3.3.1. Mantos de polvo, zonas activas.**

Anteriormente hemos indicado que, en su descripción más básica, la actividad cometaria aparece con la sublimación de los hielos presentes en el núcleo cometario. Cabe entonces preguntarse cómo ocurre esa sublimación para lo que es necesario tener una descripción de cómo son los núcleos cometarios. En sus ideas originales, Whipple (1950) propuso una descripción del núcleo cometario como una gran bola de nieve sucia, en la que el material refractario (1/3) estaría embebido en el material helado (2/3). Whipple (1950) también propuso que, cuando ese núcleo evolucionase termofísicamente, se formaría un manto de polvo aislante en la superficie del núcleo, constituido por el material refractario que el componente volátil no puede arrastrar. En esa descripción, la sublimación de los hielos ocurriría debajo

de ese manto aislante, por el calor que difunde a través de él. Esa idea fue básicamente confirmada con la visita del Halley, a partir de las imágenes que tomó Giotto (Keller et al., 1986) que mostraban que la superficie del cometa estaba cubierta en su mayor parte por material refractario. Esta descripción fue confirmada con las medidas tomadas con el espectrómetro infrarrojo IKS de la sonda Vega 1. Emerich et al. (1987) mostraron que la emisión térmica era compatible con una temperatura relativamente elevada, entre 350 y 400 K, mucho mayor que los 200 K esperados si la superficie fuese de hielo de agua. Las imágenes tomadas por Giotto mostraban, además, la presencia de chorros que podían ser trazados casi hasta la superficie. Así Keller et al. (1987), propusieron que la actividad estaba localizada, restringida a sólo una zonas concretas, las zonas activas. Hay que decir que lo único que se podía afirmar a partir de las imágenes de Giotto es que la producción de polvo estaba localizada pues los tiempos de exposición, necesariamente cortos, no permitieron trazar la producción de los componentes volátiles. En cualquier caso, las ideas originales de Whipple (1950) sobre la formación de manto aislante parecían confirmarse. Las imágenes in-situ de núcleos de otros cometas (Borrelly, Wild 2, Tempel 1 y Hartley 2) confirman la presencia de ese manto en la superficie de los cometas. Más exhaustivamente, el análisis espectral de la superficie de Tempel 1 realizado por Sunshine et al. (2006) de hecho mostró que sólo en unas regiones muy pequeñas y localizadas se pudieron detectar las marcas espectrales del hielo. Estos autores estimaron que, aproximadamente, sólo el 0.4% de la superficie contenía hielo lo que resultaba insuficiente para explicar toda la producción observada de agua. En un segundo trabajo, Sunshine et al. (2007) mostraron que, en el material expulsado tras el impacto de Deep Impact con Tempel 1, se liberaron gran cantidad de granitos de hielo que estaban debajo del manto refractario. Estos resultados parecen confirmar que la sublimación, la principal fuente de actividad, se produce efectivamente bajo un manto aislante de polvo.

Ese hecho, la formación de un manto conforme el núcleo evoluciona termofísicamente que aísla la región de sublimación, dificulta enormemente la interpretación de las abundancias determinadas observacionalmente ya que aumenta la incertidumbre en, por ejemplo, la energía disponible para que se produzca la sublimación. Ello es consecuencia de los escasos datos que tenemos sobre cómo se forma y desarrolla el manto.

Es de gran importancia para entender cómo se forma el manto conocer la distribución de tamaños de las partículas que podemos encontrar en las comas cometarias y cómo cambia con el tiempo. Esto nos permitiría, por ejemplo vía modelos termofísicos, profundizar en la capacidad de arrastre del gas que sublima y determinar las características de las partículas que, al no poder ser arrastradas, formarían el manto. Observacionalmente, la distribución de tamaños de las partículas presente en las comas está íntimamente relacionada con la razón polvo-gas que describimos anteriormente y, por tanto, está afectada de las mismas circunstancias e incertidumbre. Cuando se invierten imágenes ópticas para determinar la distribución de tamaños se ha comprobado que, en primera aproximación, ésta se puede describir con una ley de potencias,  $n(r) \propto r^{-\alpha}$ . Si las partículas presentes

en la coma dependen de la capacidad de arrastre del gas es lógico suponer que las características de la distribución, medidas en la coma, cambien con el tiempo y, por tanto, el exponente, puede variar en función de la distancia heliocéntrica. Fulle (2004) presenta un resumen de las estimaciones del índice de la distribución de tamaños realizados en distintos cometas, encontrando que el índice instantáneo varía entre -2.8 y -5.0 mientras que el valor medio estaría entre -3.0 y -4.1. Según estos resultados, como valor típico para la distribución de tamaños en las comas cometarias se considera  $\alpha = -3.5$ . Esto llevaría directamente a la interpretación de que los granos cometarios serían producto de una población colisionalmente evolucionada, no primordial (Dohnanyi, 1972) pero esa conclusión resulta errónea si se tienen en cuenta los resultados individuales, los instantáneos, y el hecho de que parte del polvo se queda en el núcleo, desarrollando el manto. Se han propuesto distribuciones de polvo más complejas que una simple ley de potencias (e.g. Hanner, 1984b) pero no hay evidencias de que representen mejor la situación real en las comas sino que, posiblemente, simplemente juegan mejor su papel como función parametrizada para ajustar observaciones en el infrarrojo, donde la contribución de partículas pequeñas no juega ningún papel (Fulle, 2004). La interpretación de las observaciones en términos de la distribución de tamaños depende tanto del tipo de observación (óptica, IR, etc.) como del modelo utilizado para ajustar las observaciones. Esto hace que, concretamente, el índice determinado sea válido sólo para un intervalo de tamaños concreto. Por ejemplo, los modelos montecarlo de inversión de imágenes ópticas muestran, de manera más o menos sistemática, que los tamaños de las partículas en la coma están entre  $1 \mu\text{m}$  y, aproximadamente, 1 cm (Fulle, 2004). Sin embargo, hay evidencias que hay partículas más pequeñas, del orden submicrométrico (Sagdeev et al., 1989) y partículas (o bloques) que pueden superar ampliamente los cm, como muestran los ecos no polarizados de radar (Harmon et al., 2004). El experimento Deep Impact también nos proporcionó alguna información sobre las características del manto. Según las estimaciones de A'Hearn et al. (2005) a partir de la cortina de polvo levantada en el impacto, la tensión en las capas superficiales del Tempel 1 tenía un límite superior de 65 Pa, valor muy bajo que caracteriza el manto como constituido por polvo suelto, granos débilmente ligados. Este resultado sustenta la idea de que el manto se forma por partículas que, inicialmente embebidas en el hielo, no pueden ser levantadas por el gas sublimado. Como vemos, la información observacional sobre la formación de los mantos es reducida lo que favorece la especulación sobre sus características y posibles efectos. Una manera de intentar paliar, en la medida de lo posible, la falta de información es el desarrollo de modelos teóricos de formación de mantos (e.g. desde Mendis y Brin 1977; Fanale y Salvail 1984; hasta Skorov y Blum 2012; entre muchos otros) y descripciones cualitativas (e.g. Kührt y Keller 1994). La posibilidad de extraer información de estos modelos depende de su capacidad de explicar el mayor número posible de hechos observacionales.

### 1.3.3.2. Producción simultánea. Amorfo o Clatratos.

Aunque los diferentes volátiles presentes en los núcleos cometarios tienen temperaturas de sublimación diferentes, se da el hecho observacional de que su aparición en la coma no se correlaciona con la distancia heliocéntrica a la que se deben alcanzar las temperaturas de sublimación. En principio, se podría pensar que esto es debido, de nuevo según la descripción cualitativa de Whipple (1950), a la diferenciación química que se puede producir con la evolución termofísica de los núcleos. Sin embargo, Biver et al. (1997) mostró que la abundancia de gases con volatilidades diferentes entre sí varios órdenes de magnitud (e.g. CO, HNC, CH<sub>3</sub>OH, CS, etc) aumentaban, desde las 7 UA, a velocidades similares. Este hecho, la sublimación casi-simultánea de distintos volátiles, ha sido ampliamente discutido en la bibliografía especializada (ver e.g. Capria 2000; Colangeli et al. 2004) y sugiere que o bien la estratificación tiene el orden preciso o bien (lo que es más probable) que existe un mecanismo físico que los libere, prácticamente, todos juntos, de manera casi simultánea. Con respecto a esta última posibilidad, son dos los mecanismos que se han propuesto: la existencia de clatratos de agua en el interior del núcleo y la reordenación y cristalización de hielo de agua amorfo.

El primero de los mecanismos, la existencia de clatratos fue propuesto originalmente por Delsemme y Swings (1952). Un clatrato de agua es una red cristalina de moléculas de agua que incorpora moléculas huéspedes en los vacíos. Esas moléculas huéspedes, más volátiles que el agua, serían liberadas cuando sublima el agua, lo que explicaría la sublimación casi-simultánea. La idea de la existencia de clatratos de agua en el interior de núcleo decayó porque estas estructuras son difíciles, si no imposibles (e.g. Meech y Svoren 2004), de formar a bajas presiones y temperaturas, que se suponen son las condiciones de formación de los núcleos cometarios, como sugerían y sugieren las cada vez mayores evidencias observacionales (e.g. la temperatura de spin previamente descrita). Sin embargo, la evidencia de la existencia de silicatos cristalinos (ver sección 1.3.1.1) en las comas cometarias nos indica que al menos parte del material refractario se ha formado en condiciones de alta presión y temperatura, justificando la posible existencia de mecanismos de turbulencia a gran escala en el Sistema Solar. Esa circulación a gran escala podría haber transportado clatratos formados en regiones donde la presión y temperaturas eran las necesarias a las regiones donde se formaron los núcleos cometarios. La existencia de esa posibilidad, entre otras cosas, justificó de nuevo la consideración de los clatratos como posible mecanismo para explicar la sublimación casi-simultánea de volátiles, incorporándose a modelos termofísicos para describir la actividad cometaria (e.g. Flammer et al. 1998, Marboeuf et al. 2011, 2012). Gautier y Hersant (2005) también recurren a la existencia de clatratos para explicar la escasez de N<sub>2</sub> en cometas como el Hale-Bopp, De Vico e Ikeya-Zhang (Iro et al., 2003) y la gran variabilidad de CO observada en cometas (ver sección 1.3.2.1). La idea en la que se basan Gautier y Hersant (2005) es que el orden de formación de clatratos para las especies huéspedes más abundantes en cometas es CH<sub>4</sub>, CO y N<sub>2</sub>. Así, al estar limitada la cantidad de moléculas de agua, algunas moléculas de CO y N<sub>2</sub>



no podrían formar clatratos y no se incorporarían a, al menos, algunos núcleos cometarios.

En nuestra opinión, la existencia de clatratos o, mejor dicho, que ese sea el mecanismo que explique la sublimación simultánea no encuentra muchos argumentos a favor por sí mismo. Quizás su mayor respaldo lo encuentre en argumentos indirectos que negarían la viabilidad del mecanismo alternativo. Por un lado, hay experimentos de laboratorio que sugieren que el hielo inicial de los granos en la nebulosa presolar no tiene que ser necesariamente amorfo, a pesar de su baja temperatura de formación. Moore et al. (1994) realizaron una serie de experimentos para caracterizar espectroscópicamente el hielo de agua condensado en granitos, con tamaños del orden de los 10 nm, de silicatos amorfos a 20 K. Estos autores encontraron que el agua condensaba en fase cristalina sugiriendo que ocurriría una cristalización de baja temperatura debida a la interacción molecular entre el gas que condensaba y la superficie de los silicatos. Hay que decir que Moore et al. (1994) mencionaron que esa cristalización de baja temperatura no ocurría cuando el tamaño de los granos era mayor, lo que sugiere que esa es una variable crítica. Además, Schutte (2002) discutió extensivamente que lo observado por Moore et al. (1994) podría ser un simple efecto experimental. Otro de los argumentos indirectos en favor de los clatratos es que los modelos termofísicos han sugerido que el mecanismo alternativo, el hielo amorfo, aún existiendo en su origen, no podría subsistir durante mucho tiempo en los núcleos cometarios (e.g. Klinger 1981; Klinger et al. 1996). Sin embargo, cada vez hay más evidencias que indican que esto puede no ser cierto.

Teniendo en cuenta la posible formación de los núcleos cometarios (ver sección 1.3.1.1.), si los experimentos de Moore et al. (1994) no se confirman, el hielo de agua debió condensar en forma amorfa. La estructura de esta fase es abierta y muy porosa, siendo, por lo tanto, capaz de albergar en ella moléculas de otros componentes más volátiles. Estos componentes se liberarían, en poca cantidad, cuando el hielo amorfo se reestructura (para temperaturas entre los 20 y los 120 K) y en mayor medida cuando cristaliza (para temperaturas superiores a los 135 K). Este mecanismo, a diferencia de los clatratos, podría explicar que los distintos volátiles, con presiones de saturación con diferencias de varios órdenes de magnitud, se liberen simultáneamente incluso cuando la sublimación de agua no ha comenzado, a distancias entre las 7 y 20 UA (ver e.g. Meech y Svoren 2004). Estos procesos, el atrapamiento, liberación de gases atrapados y, en general, el comportamiento térmico del hielo amorfo ha sido estudiado y descrito en el laboratorio por varios autores (e.g. Bar-Nun y Owen 1998; Bar-Nun et al., 1985, 1988; 2007; 2008; Jenniskens y Blake 1994; etc.). Estos experimentos muestran, entre otros aspectos, que el hielo amorfo es más eficiente atrapando unos compuestos que otros (e.g. favorece la adsorción de CO frente a la del N<sub>2</sub>) lo que también podría ser una justificación para lo observado en cometas y que Gautier y Hersant (2005) consideraban prueba de la existencia de clatratos.

El principal problema con la existencia del hielo amorfo o, al menos, con su supervivencia está asociado a la evolución global temprana del Sistema Solar. Si

los cometas incorporaron elementos radiactivos durante su formación en cantidades similares a las encontradas en los meteoritos, el hielo amorfo podría haber cristalizado debido al calentamiento radiogénico, principalmente, del  $^{26}\text{Al}$ . Prialnik et al. (1987) estudiaron concienzudamente la evolución termofísica de cuerpos bajo el efecto del calentamiento radiogénico de distintos elementos radiactivos. Estos autores encontraron que para que el hielo amorfo sobreviviese en cometas sería necesario que éstos hubiesen incorporado, como máximo, la centésima parte del material radiogénico encontrado en las inclusiones ricas en calcio y aluminio meteoríticas (CAIs), las estructuras más antiguas del Sistema Solar. Algunas consideraciones teóricas plantean dificultades a esta hipótesis, ya que ante la posibilidad razonable de que el  $^{26}\text{Al}$  sea una constante en el medio interestelar, lo lógico es pensar que ese elemento estuvo presente, más o menos uniformemente, en la nebulosa solar cuando empezó a condensar. Si eso fuese cierto, el resultado obtenido por Prialnik et al. (1987) exigiría entonces que los cometas se hayan formado varios millones de años después que el material meteorítico para que puedan conservar hielo amorfo. Este resultado tendría una objeción teórica derivada de los modelos de acrecimiento ya que éstos sugieren formación de cuerpos con tamaños de las decenas de los km en las partes externas del Sistema Solar en cientos de miles de años (Weidenschilling, 1997). Un problema adicional surgiría de las suposiciones incluidas en el modelo de Prialnik et al. (1987). El efecto del calentamiento radiogénico depende de la cantidad de polvo incorporada en los núcleos cometarios y los cálculos de Prialnik et al. (1987) son válidos para razones polvo-hielo, como máximo, de 1. Esto implicaría que la mayoría de las razones polvo-hielo mencionadas en la sección 1.3.2.2 representan una sobreestimación de la nuclear.

Estos han sido algunos de los argumentos, como vemos teóricos, en contra de la supervivencia del hielo amorfo en cometas, aún antes de que éstos empiecen a desarrollar su actividad. Sin embargo recientemente se han encontrado evidencias observacionales a favor de las circunstancias indicadas por Prialnik et al. (1987) como necesarias para la supervivencia inicial del hielo amorfo. Una de las principales nos la han proporcionado las muestras del polvo cometario traídas por la sonda Stardust. Entre el material formado a altas temperaturas se han podido identificar estructuras similares en composición a las CAIs meteoríticas (Zolensky et al., 2006). Sin embargo, un análisis composicional exhaustivo realizado por Matzel et al. (2009) ha mostrado que estas CAIs cometarias no presentan  $^{26}\text{Mg}$ , elemento al que decae el  $^{26}\text{Al}$ . Estos autores sugieren entonces que los cometas se debieron formar varios millones de años después de que esas CAIs condensasen. Este resultado reciente favorece la supervivencia del hielo amorfo en cometas al estar de acuerdo con la restricción derivada del estudio de Prialnik et al. (1987).

Como ya hemos mencionado, un problema adicional relacionado con el hielo amorfo procede del hecho de que, aunque esa fase pudiese sobrevivir al calentamiento radiogénico durante los períodos iniciales, los modelos térmicos nos dicen que no está garantizado que sobreviva una vez que el cometa entre en el Sistema Solar interno y empiece a desarrollar su actividad. Klinger (1981) estudió la evolución

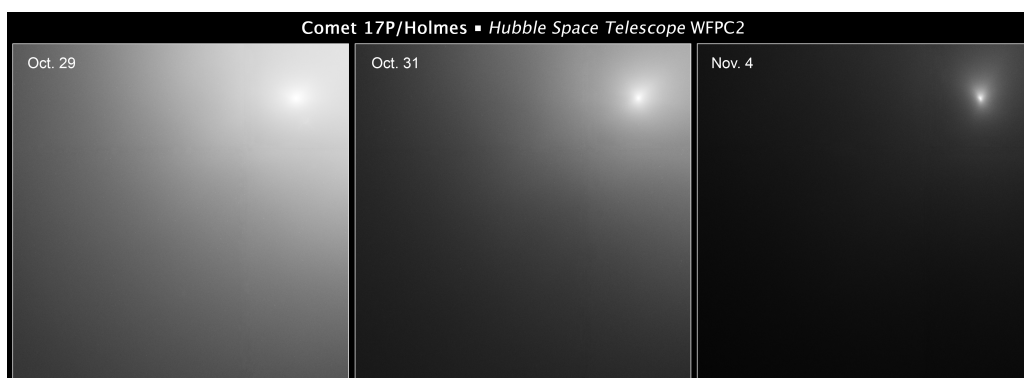
térmica de núcleos simulados, considerando como principal proceso energético la difusión de calor hacia el interior, y concluyó que los cometas de la familia de Júpiter serían cristalinos mientras que sería posible encontrar algo de hielo en la parte central de cometas como el Halley (ver también e.g. Meech y Svoren 2004; Prialnik et al. 2004). La razón principal se encuentra en la exotermicidad de la transición de fase. La cristalización de hielo amorfo puro es una reacción exotérmica muy energética liberando, aproximadamente,  $90000 \text{ J kg}^{-1}$  (ver Klinger 1981 y referencias ahí). Esa gran cantidad de energía realimentaría la cristalización la cual puede desbocarse (ver e.g. Prialnik et al. 2004 y referencias ahí). Este hecho, a raíz de experimentos recientes podría cuestionarse. Casi todos los modelos teóricos, como decimos, consideran la cristalización como una reacción exotérmica. Sin embargo Kouchi y Sirono (2001), realizando experimentos de análisis térmico diferencial en muestras de amorfo dopadas con distintos volátiles, encuentran que la cristalización se puede volver endotérmica para cantidades pequeñas de impurezas (elementos volátiles como el monóxido de carbono), como las detectadas en cometas. Si esta circunstancia se confirma, el frente de cristalización pasaría de ser una fuente de energía a ser un sumidero, algo que, según nuestro conocimiento, no ha sido explorado en modelos termofísicos cometarios. La consecuencia presumible sería un aumento significativo de la supervivencia de hielo amorfo en cometas, incluyendo los de la familia de Júpiter.

En cualquier caso, la sospecha, basada en los resultados teóricos, de que es más probable encontrar hielo amorfo en los objetos poco evolucionados ha favorecido que las evidencias observacionales de la existencia de esa fase del hielo de agua se busquen en cometas poco evolucionados, como pueden ser los Centauros o los cometas dinámicamente jóvenes, tipo Hale-Bopp. Con respecto a los primeros, una prueba indirecta de la posibilidad de existencia de amorfo se justifica en la actividad que muestran algunos de estos objetos, la cual es relativamente frecuente. Jewitt (2009) encuentra que de 23 Centauros estudiados en detalle, 9 de ellos muestran la presencia de coma. Ocurre que la temperatura estimada para estos objetos es baja para justificar la actividad por sublimación del hielo de agua y relativamente alta para que una actividad persistente se deba a volátiles que habrían desaparecido en escalas de tiempo muy cortas (como el CO y el CO<sub>2</sub>). Esto ha llevado a varios autores (e.g. Prialnik et al. 2004; Jewitt 2009; etc.) a sugerir que la actividad de estos objetos se debe a la cristalización de hielo amorfo. Hasta la fecha no disponemos de una prueba directa del hielo amorfo cometario. La que se podría considerar más directa está relacionada con la detección, ya mencionada, de granos de hielo en los cometas Hale-Bopp por Davies et al. (1997) y 2002T7 (LINEAR) por Kawakita et al. (2004). En ambos espectros no se pudo detectar la presencia de la marca en  $1.65 \mu\text{m}$  característica del hielo cristalino de agua, lo que llevo a ambos autores a sugerir que los granos de hielo estaban en estado amorfo. Hay que decir que la ausencia del pico de  $1.65 \mu\text{m}$ , en realidad, no se puede utilizar como una evidencia irrefutable de la presencia de hielo amorfo (sólo se podría decir que su detección sí indicaría que se trata de hielo cristalino). Esta marca depende de la temperatura y de la historia de irradiación que ha sufrido la

superficie (ver e.g. Mastrapa y Brown 2006). En los Centauros ocurre algo similar. Se ha detectado hielo de agua en, al menos, 7 Centauros (ver e.g. Guilbert-Lepoutre 2012) no habiéndose encontrado en ninguno el pico de cristalinidad en  $1.65 \mu\text{m}$ . De nuevo, esto no se puede considerar una prueba de su existencia. Guilbert-Lepoutre (2012), realizando simulaciones termofísicas en Centauros, obtiene que es posible encontrar hielo amorfo en estos objetos pero estaría debajo de una capa de entre 5 y 10 m de hielo cristalino, por lo que el hielo amorfo no sería detectable mediante espectroscopía remota.

Como vemos no existe una prueba definitiva a favor de alguno de los mecanismos propuestos para explicar la sublimación simultánea. Generalizando, se podría decir que cada uno de los argumentos en favor o en contra de alguno de los mecanismos encuentra contestación que, generalmente, se interpreta como justificación del otro.

### 1.3.3.3. Explosiones de actividad



**Figura 1.10:** Serie temporal tomada con el telescopio espacial Hubble que muestra el descenso en brillo del cometa Holmes tras su enorme explosión de actividad el 23 de Octubre de 2007. Créditos: NASA/ESA/JHU APL (H. Weaver)

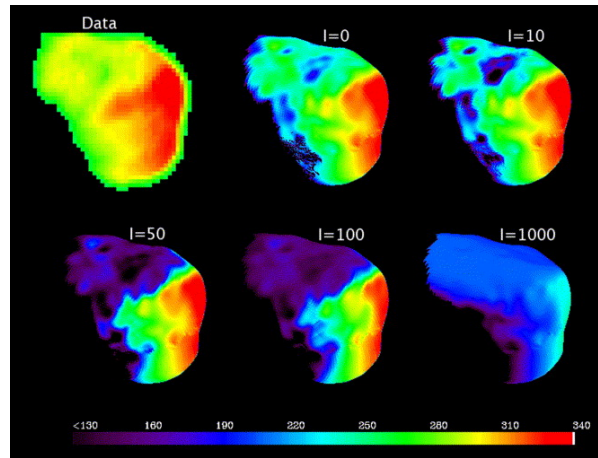
Una característica de los cometas es que, de manera aparentemente imprevisible, experimentan un aumento repentino de brillo que puede alcanzar varias magnitudes con respecto a su brillo normal. Se dice entonces que el cometa ha sufrido una explosión de actividad. Las explosiones de actividad se conocen desde hace mucho. Richter (1941) y Bobrovnikoff (1954) fueron unos de los primeros en caracterizar sistemáticamente las explosiones observadas en distintos cometas y pronto surgieron las primeras posibles interpretaciones sobre porqué ocurrían. Whitney (1955), por ejemplo, propuso que las explosiones de actividad se podrían deber, simplemente, a cambios en la energía absorbida (bien por un aumento de la actividad solar, bien por un cambio en el albedo del cuerpo) o a la vaporización accidental de concentraciones de metano o dióxido de carbono que formarían

bolsas, aumentando la tensión interna hasta que se produjese la explosión. Poco después, Donn y Urey (1956) propusieron que los aumentos repentinos de brillo se debían a reacciones químicas explosivas involucrando radicales libres y moléculas inestables. Por su parte, Klinger (1980) y Smoluchowski (1981) propusieron que las explosiones podrían ser debidas a la energía liberada en la cristalización del hielo amorfo presente en los núcleos cometarios.

Uno de los estudios relativamente más recientes sobre la información observacional de las explosiones de actividad fue realizado por Hughes (1990). Este autor encuentra que las explosiones no son infrecuentes, ocurriendo de manera episódica en todos los cometas. Hughes (1990) describe que, por debajo de las 7.5 UA, las explosiones parecían ocurrir independientemente de la distancia heliocéntrica, aunque existía cierta tendencia a ocurrir después del paso por el perihelio. Dado su carácter impredecible, muchas de las explosiones son descubiertas por astrónomos aficionados, como la más espectacular reciente del cometa 17P/Holmes, descubierta por J.A. Henríquez y que supuso un aumento del brillo entre 13 y 14 magnitudes. En la Fig. 1.10 se muestra la evolución descendente del brillo del cometa Holmes tras su explosión. Al margen de explosiones que pueden ser extraordinarias, los aumentos típicos del brillo cuando se produce una explosión están entre 2 y 5 magnitudes (Hughes, 1990), pero es posible que esto sea debido a la dificultad de detectar observacionalmente incrementos de magnitud menores por observadores aficionados. De hecho, la observación intensiva del cometa 9P/Tempel 1, objetivo de la misión Deep Impact, reveló que este cometa sufrió unas 10 mini-explosiones, con aumentos de brillo entre 0.2 y 0.6 magnitudes durante 63 días (Farnham et al. 2007; Belton et al. 2008). Filonenko y Churyumov (2009) reevaluaron las observaciones visuales de este cometa de la familia de Júpiter durante una pequeña fracción de sus últimas 4 órbitas y detectaron 6 explosiones con una amplitud de 1 mag. Estas observaciones nos confirman que, efectivamente, las explosiones de actividad aparecen incluso en objetos tan evolucionados como el Tempel 1 y que no son infrecuentes, cabría incluso decir lo contrario. A partir de los datos mencionados y extrapolando a toda la órbita (según la descripción de Hughes 1990), Belton et al. (2012) concluyen que el Tempel 1 puede haber sufrido unas 300 explosiones por órbita con una amplitud superior a 0.2-0.6 mags y unas 20 explosiones/órbita con una amplitud mayor que 1 mag. Esto lleva a Belton et al. (2012) a proponer, incluso, que serían las explosiones sufridas las responsables de las estructuras con forma de cráter que se advierten en las superficies del Tempel 1 y del Wild2 (y que se pueden ver en la Fig. 1.8). La duración de las explosiones depende de la magnitud, desde unas decenas de horas hasta varios meses. A su caracterización ha contribuido enormemente la observación del cometa 29P/Schwassmann-Wachmann, el cual es considerado paradigma del comportamiento explosivo, siendo conocido por sufrir frecuentes explosiones fácilmente observables. Ciertamente, desde los estudios de Richter (1941), es el cometa en el que más explosiones se han identificado, especialmente gracias a los estudios sistemáticos durante largos períodos de tiempo de Trigo-Rodríguez et al. (2008, 2010). Estos autores encuentran que el 29P sufre unas 7.3 explosiones por año con una duración de la decena de días y un aparente

comportamiento periódico.

Sobre el origen de las explosiones hay que decir que aún no existe una explicación definitiva. A las ya mencionadas hay que añadir, por ejemplo, la recondensación de volátiles de la superficie durante la noche cometaria (Prialnik et al., 2008), la oxidación del agua en  $H_2O_2$ , que se concentraría para finalmente descomponerse de modo rápido y exotérmico (Miles, 2007) o la posibilidad de que se deban a colisiones entre cuerpos (Fernández, 1990). Gronkowski (2007) presentó una evaluación, en términos energéticos, de los mecanismos que, en su opinión, eran la probable causa de las explosiones cometarias. Estos mecanismos serían la polimerización del HCN, impactos con meteoroides, la destrucción de granos cometarios por un aumento del viento solar y la cristalización del hielo amorfo. Su objetivo era estimar la energía liberada y los aumentos de brillo esperables según los distintos mecanismos. Su conclusión principal es que, como es de alguna manera esperable, cualquiera de los mecanismos puede ser origen de explosiones pero estimó que la cristalización de hielo amorfo era la más probable, lo que exige que el hielo amorfo haya sobrevivido en los cometas, incluso en los térmicamente evolucionados como el Tempel 1 (con las dificultades que eso conlleva, según hemos descrito en la sección 1.3.3.2.) Como hemos mencionado, la cristalización del hielo amorfo ya se propuso con anterioridad a Gronkowski (2007) como causa probable de las explosiones de actividad cometarias. De hecho, este mecanismo se propuso por varios autores para explicar un gran aumento de brillo que sufrió el cometa Halley cuando estaba a, aproximadamente, 14 UA y que duró varios meses (West et al. 1991). Espinasse et al. (1991); Schmitt et al. (1991) y Prialnik y Bar-Nun (1992), entre otros, simularon la evolución termofísica mostrando que el fenómeno podría ser explicado por la cristalización de una capa de hielo amorfo que estuviese varias decenas de metros bajo la superficie. Los aumentos de actividad se explicarían por la liberación de los volátiles atrapados en el interior del hielo amorfo cuando cristaliza. Estos modelos encuentran así una justificación para esas grandes explosiones que ocurren en cometas que probablemente contengan hielo amorfo pero dejaría abiertos otros problemas o, al menos, no proporciona todavía una explicación totalmente satisfactoria. Según las simulaciones realizadas, la cristalización del hielo amorfo acabaría por dejar de causar las explosiones relativamente rápido si la superficie no se erosiona significativamente. Así, según esas simulaciones sería difícil considerar al hielo amorfo como la causa de las explosiones frecuentes observadas en el Tempel 1 (una cada 6 días), máxime en un cometa que esos mismos modelos sugieren que ha perdido la mayor parte de su hielo amorfo, o en el cometa 29P (aproximadamente, 1 explosión cada dos meses). Estos dos cometas son los que más sistemáticamente han sido estudiados. Esto hace suponer que las explosiones de actividad son mucho más frecuentes de lo que predicen los modelos desarrollados hasta la fecha.



**Figura 1.11:** Figura 5 del trabajo de Groussin et al. (2007). En ella se comparan la temperatura calculada para la superficie de Tempel 1 a partir de los obtenidos por Deep Impact con los resultados de su modelo termofísico para distintas inercias térmicas.

#### 1.3.4. Magnitudes térmicas

Descritos algunos de los problemas que afectan a la naturaleza cometaria y, concretamente, a su estructura (como son las relativas imprecisiones en la densidad y la porosidad o la propia razón polvo-hielo) no es sorprendente que no se conozcan las magnitudes térmicas, principalmente conductividad y capacidad calorífica, que gobiernan la evolución termofísica cometaria. Generalmente, las magnitudes térmicas se agrupan en la llamada inercia térmica,  $I$ , que viene definida por la expresión siguiente:

$$I = \sqrt{\rho K c} \quad \text{WK}^{-1}\text{m}^{-2}\text{s}^{-1/2} \quad (1.3)$$

, donde  $c$  es el calor específico total del material,  $\rho$  representa la densidad de volumen del material cometario y  $K$  la conductividad total de la matriz sólida. A grandes rasgos, esta magnitud nos indica la capacidad del medio para conducir y almacenar calor. Conocer la inercia térmica es un problema fundamental pues las magnitudes térmicas gobiernan la difusión de calor hacia el interior y, por tanto, la posibilidad de que el material interno sea todavía prístino, no evolucionado. El desconocimiento en las magnitudes térmicas es uno de los grandes retos al intentar utilizar los modelos termofísicos para interpretar datos observacionales o para predecir la evolución cometaria a largo plazo. Generalmente los modelos desarrollados hasta la fecha hacen uso de distintas parametrizaciones para definir la conductividad y la capacidad calorífica que caracterizan al núcleo cometario a partir de las respectivas magnitudes de los constituyentes puros (ver e.g. Huebner et al. 2006). En cualquier caso, siempre es necesario hacer alguna suposición sobre la razón polvo-hielo o sobre la porosidad y la densidad para establecer y definir el comportamiento de las magnitudes térmicas.

La forma más directa de determinar las magnitudes térmicas es a partir de observaciones del núcleo en infrarrojo térmico. Esto es difícil por el hecho de que cuando el núcleo está relativamente cerca de la Tierra y sería fácil de observar se encuentra oculto por la coma y cuando la coma no está presente, el núcleo está a una gran distancia y, al ser pequeño, su brillo (aún más en el infrarrojo) es muy débil. Esto nos deja como mejor herramienta a las sondas espaciales para obtener datos térmicos de los núcleos cometarios. Ya se ha comentado que el espectrómetro infrarrojo IKS embarcado en las sondas Vega pudo medir la emisión térmica del núcleo del cometa Halley lo que permitió estimar su temperatura superficial (Emerich et al., 1987) de manera aproximada. Posteriormente, el espectrómetro SWIR, embarcado en Deep Space 1, nos permitió estimar la temperatura del núcleo del cometa Borrelly (Soderblom et al., 2004) pero con gran imprecisión pues el intervalo de longitud de onda utilizado estaba entre 1.3 y 2.6  $\mu\text{m}$ . El conjunto de datos más precisos hasta la fecha nos lo ha proporcionado Deep Impact cuyo espectrómetro HRI-IR nos permitió obtener un mapa de la emisión infrarroja entre 1 y 4.9  $\mu\text{m}$  resuelto sobre la superficie del núcleo (con resolución de 120 m cuando el instrumento estaba a unos 16000 km). Groussin et al. (2007) analizaron e interpretaron el espectro resuelto utilizando un modelo termofísico relativamente sencillo, cuyos resultados para la temperatura superficial utilizando diferentes inercias térmicas se pueden ver en la Fig. 1.11. Estos autores utilizaron la forma geométrica y la orientación del eje de rotación determinada a partir de las imágenes de Deep Impact (Thomas et al., 2007) y consideraron como principales términos en la ecuación de balance energético en la superficie la energía recibida, la radiada en el infrarrojo suponiendo que la emisividad era 0.9 y la energía difundida hacia el interior, parametrizada en la inercia térmica. Este modelo les permitía obtener la temperatura superficial para distintas inercias térmicas. Así, comparando las temperaturas obtenidas con las temperaturas de Planck que mejor ajustaban los espectros infrarrojos pudieron determinar que la inercia térmica debía ser inferior a  $50 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ , es decir, muy pequeña pero no nula. Este resultado es de gran transcendencia pues, según nuestro conocimiento, fue la primera y única determinación directa de la inercia térmica de la superficie de un cometa, desacoplada de otros efectos como puede ser la orientación del eje de rotación, la forma o sin intermediación de procesos que añaden incertidumbre a la determinación (como la sublimación). El análisis realizado por Groussin et al. (2007) no está exento de problemas. Por un lado, la determinación de la inercia térmica es dependiente del modelo. Esto fue mostrado por Davidsson et al. (2009) quienes, simplemente liberando la restricción de que la emisividad fuese 0.9, obtuvieron distintos conjuntos de soluciones. El segundo problema del análisis de Groussin et al. (2007) es que mientras que las temperaturas proporcionadas por el modelo era similares a las temperaturas de Planck de la región subsolar (donde la inercia térmica juega un papel mínimo al estar dominado el balance por la emisión), las temperaturas cerca del limbo mostraban diferencias de más de 40 K (región en la que el papel de la inercia térmica es más relevante). Davidsson et al. (2009) mostraron que esas diferencias se reducían considerablemente si la emisividad aparente era mucho me-



nor que 0.9 y la inercia térmica mucho mayor que la determinada por Groussin et al. (2007). Aceptar que la emisividad es mucho menor que 0.9 no es sencillo pues, bajo la ley de Kirchoff, ésta debe estar cercana a la unidad si el albedo del Tempel 1 está en torno a 0.04 (Li et al., 2007). Esto ha llevado a Davidsson et al. (2012) a reanalizar los datos incorporando efectos previamente no considerados, como la rugosidad superficial cuyo principal efecto es reducir la emisividad aparente. Con esta nueva variable y considerando los datos recalibrados tomados por el HRI-IR, Davidsson et al. (2012) proporcionan una solución satisfactoria para toda la superficie del núcleo, compatible con una emisividad de 0.9, encontrando que la inercia térmica varía entre  $30 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  en el limbo y  $100\text{-}200 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  en la región subsolar. Ésta, se puede decir, es la mejor interpretación hasta la fecha de los únicos datos directos que permiten una estimación de la inercia térmica pues proporcionan una explicación satisfactoria de todo el perfil de temperaturas manteniendo valores esperados para la emisividad. Sin embargo habría dos objeciones que resaltar. La primera es la dependencia del valor obtenido con el modelo utilizado, otro modelo con otra descripción física podría arrojar resultados diferentes. Desafortunadamente, el rango espectral de los datos tomados por HRI-IR no muestrea el máximo de emisión térmica y no está excluido que la emisividad, en la región estudiada, tenga un comportamiento local afectado por la composición de la superficie. Sería posible que, en esas longitudes de onda, la emisividad fuese menor que la asumida debido a la presencia de silicatos ricos en hierro o carbono (Davidsson et al., 2009). Este hecho se traduciría en un aumento de la inercia térmica determinada que podría duplicarse o incluso triplicarse. La segunda es que el valor obtenido hace referencia a la inercia térmica superficial, la del manto de polvo que cubre la superficie del Tempel 1. La del interior sigue siendo desconocida.

#### 1.4. La misión Rosetta.

Dada la gran importancia de los cometas para comprender los procesos que tuvieron lugar durante la formación del Sistema Solar estos cuerpos son, como hemos visto, objetivos prioritarios de las distintas agencias espaciales. Hasta la fecha, son 5 los cometas visitados por sondas espaciales: Halley, Borrelly, Wild 2, Tempel 1 y Hartley 2, con un destacado protagonismo de la agencia estadounidense NASA. Por su parte, Europa (ESA) tiene actualmente en camino hacia un cometa una de sus misiones más complejas: la misión Rosetta. El objetivo de esta misión es la exploración del cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko, un cometa de la familia de Júpiter. Rosetta consta de dos elementos principales, una sonda principal que orbitará alrededor del núcleo del 67P y un módulo de descenso llamado Philae que se posará sobre su superficie.

Rosetta fue lanzada en Marzo del 2004 y actualmente se encuentra en período de hibernación, a la espera del encuentro con el cometa, presumiblemente inactivo, a unas 4 UA del Sol. Entre enero y mayo del 2014, Rosetta realizará las maniobras

finales de acercamiento al cometa comenzando la fase de cartografiado y caracterización del núcleo en agosto de ese mismo año. Se espera que Philae se pose sobre la superficie en noviembre del 2014, cuando el cometa está todavía inactivo a unas 3 UA del Sol. La sonda principal continuará tomando datos acompañando al cometa mientras se acerca al Sol y comienza a desarrollar su actividad. La misión nominal tiene previsto terminar en diciembre del 2015.

La sonda principal consta de 11 instrumentos científicos entre los que destacaremos OSIRIS (Optical, Spectroscopic and Infrared Remote Imaging System) y GIADA, ambos con participación del Instituto de Astrofísica de Andalucía. Además, por su relevancia para este trabajo, hay que destacar el instrumento VIRTIS (Visible and Infrared Thermal Imaging Spectrometer).

El instrumento OSIRIS es el sistema de imagen destinado a cumplir los principales objetivos científicos de la misión. El instrumento consta de dos cámaras CCD de 2048x2048 píxeles cada una con una resolución de  $20 \mu\text{rad}\cdot\text{px}^{-1}$  y  $100 \mu\text{rad}\cdot\text{px}^{-1}$ , que representan una resolución en la superficie del cometa de entre 2 y 10 cm a 1 km de distancia, respectivamente. El IAA, junto con el INTA y el Dpto. de Vehículos Espaciales de la UPM, ha participado en este instrumento asumiendo una serie de tareas como el diseño térmico, ruedas de filtros, mecanismos de control y fuentes de alimentación, así como responsabilidades científicas en la explotación de datos, siendo el IAA el instituto responsable de la participación española (Thomas et al. 1998, Castro Marín et al. 2001). Los principales objetivos científicos de OSIRIS son (Keller et al., 2007):

- Determinar la topografía, morfología, estructura y composición de la superficie del cometa.
- Derivar su estructura interna.
- Hacer un mapa mineralógico de su superficie y de las áreas activas y estudiar la producción de focos violentos de actividad.
- Establecer la distribución de sus componentes mayoritarios (polvo, agua, CO, CO<sub>2</sub>) y minoritarios sobre un ciclo completo de actividad cometaria.
- Obtener imágenes de alta resolución (del orden de las decenas de centímetros) que revelarán los procesos de erosión a la vez que permitirán un diagnóstico de la composición química de las distintas capas.
- Determinar la dinámica gaseosa desde la superficie misma del cometa. Observación de las trayectorias de las partículas mayores de 2 cm.

OSIRIS permitirá, en suma, no sólo observar el cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko con gran resolución, sino que permitirá su estudio en una amplia base temporal (estará en sus inmediaciones entre mayo de 2014 y diciembre de 2015, capturando un rango significativo de distancias heliocéntricas incluyendo el perihelio) y con gran resolución espectral, lo que significará una calidad de datos sin precedentes en el estudio de cometas y del Sistema Solar.

El instrumento GIADA está destinado al estudio de las propiedades mecánicas del polvo cometario y está compuesto por tres tipos de sensores: Sistema de detección de granos (GDS), sensor de impactos (IS) y Sistema de micro balance

(MBS). Estos instrumentos medirán la masa de los granos de polvo (MBS), su velocidad (GDS+IS) y a su momento cinético (IS). El instrumento se realizó en su totalidad entre el IAA y el observatorio de Nápoles, siendo el IAA el responsable de la electrónica completa y del software de vuelo. Los objetivos principales de GIADA son (Bussoletti et al. 1999; Colangeli et al. 2007):

- Proporcionar datos sobre el flujo de polvo, sobre las propiedades dinámicas de los granos de polvo y sobre la distribución de velocidades del polvo.
- Proporcionar datos sobre las razones de deposición del polvo cometario.
- Estudio de los procesos de emisión de polvo y de la relación polvo-gas en el interior de la coma.
- Estudio de la interacción entre el polvo y la radiación y el viento solar.
- Estudio de la evolución del núcleo y su anisotropía, y de la evolución de los granos en la coma.

Como se ha mencionado, también es de especial interés el instrumento VIRTIS. Este instrumento medirá la emisión térmica de núcleo lo que nos permitirá determinar su temperatura y características térmicas superficiales. Además, VIRTIS nos proporcionará información sobre la composición y características espectrales de la coma.

Con respecto a la sonda Philae, entre los nueve instrumentos que lleva hay que destacar MUPUS (Multi-Purpose Sensors for surface and Subsurface Science) que utilizará una serie de sensores localizados en un penetrador para determinar distintas características térmicas y mecánicas de la superficie y la región subsuperficial del núcleo, hasta aproximadamente unos 30 cm (Spohn et al., 2007). Forman parte de MUPUS también los sensores de temperatura localizados en el sistema de anclaje en la superficie del propio módulo Philae. Este sistema de anclaje es un dispositivo similar a un arpón que se espera penetre hasta una profundidad de 1 ó 2 metros (Paton et al., 2010), superando con creces la región que explorará el penetrador.

## 1.5. Motivación para realizar esta memoria. Objetivos.

Dentro del contexto cometario, una de las herramientas utilizadas para avanzar en la comprensión de su naturaleza y en la interpretación de los datos observacionales son los modelos computacionales. Desde el modelo de Whipple (1950) se han desarrollado un gran número de modelos termofísicos diferentes, incluyendo distintas mejoras computacionales o aplicaciones de modelos generales a casos particulares de cometas. Prácticamente todos los modelos termofísicos desarrollados hasta la fecha siguen, con distintos grados de aproximación, la descripción cualitativa dada por Whipple (1950). Es decir, el núcleo es un cuerpo sólido constituido por una mezcla de polvo y diferentes hielos. Los modelos más sofisticados empezaron a desarrollarse en los años 80. Éstos eran, generalmente, unidimensionales y se centraban en algún aspecto concreto de la naturaleza cometaria como la formación de

manto (e.g. Mendis y Brin 1977; Fanale y Salvail 1984), la cristalización de hielo amorfo (e.g. Klinger 1981; Herman y Podolak 1985) o la diferenciación química (e.g. Espinasse et al. 1989;1991). Poco a poco, los modelos se fueron complicando física y computacionalmente, incluyendo distintos procesos combinados (e.g. Prialnik y Bar-Nun 1990; Tancredi et al. 1994; Orosei et al. 1995; de Sanctis et al. 1999; etc.) aunque seguía dominando la aproximación monodimensional y, en el mejor de los casos, esférica. El primer modelo con un tratamiento cuasi-3D de la difusión del calor hacia el interior del núcleo fue presentado por Enzian et al. (1997). Los efectos de la forma geométrica fueron tratados por primera vez por Colwell y Jakosky (1987) y Colwell et al. (1990), que estudiaron las consecuencias de la presencia de cráteres en la producción de agua. Geométricamente, el modelo más completo fue desarrollado en nuestro grupo (Gutiérrez, 2001) que desarrolló una herramienta para describir los efectos de formas irregulares tridimensionales que podían rotar incluso en modo complejo. Algunos de los modelos termofísicos desarrollados se centran en aspectos de microfísica pero de posible gran impacto en la producción de agua como es la absorción de radiación de luz en una capa finita de la superficie (Davidsson y Skorov, 2002) o la condensación de material sublimado en la superficie así como procesos de compactación (Kossacki et al., 1999).

Hay que decir que, hasta la fecha, los modelos geométrica y dinámicamente avanzados, como el desarrollado en nuestro grupo por Gutiérrez et al.(2000, 2001) son, desde el punto de vista termofísico, simples. Por otro lado, los modelos avanzados desde el punto de vista termofísico, como por ejemplo el de Rosenberg y Prialnik (2010) se apoyan en una descripción geométrica y dinámica muy limitada. La simplicidad en alguno de esos aspectos compromete la capacidad del modelo para interpretar datos observaciones, especialmente los de gran calidad como los que tomará la misión Rosetta (ESA).

Esta memoria tiene como principal objetivo el desarrollo de un modelo termofísico avanzado como apoyo científico a la misión Rosetta, completando así la sofisticada descripción geométrica y dinámica ya desarrollada en nuestro grupo. Se persigue así construir el modelo cometario más completo de los desarrollados hasta la fecha.

Además de disponer de una herramienta que nos permita analizar e interpretar datos de Rosetta, también se tiene el objetivo científico de avanzar en la comprensión de la naturaleza cometaria. En esta introducción se han intentado resumir algunos de los problemas, todavía abiertos, que afectan a la naturaleza cometaria (y, por tanto, a la comprensión de los procesos que tuvieron lugar durante las primeras fases de formación de nuestro Sistema Solar). Estos problemas afectan a la formación y estructura nucleares con gran incertidumbre en magnitudes clave como es la densidad cometaria. También afectan a la composición, donde existen dudas sobre la diversidad composicional y su origen así como sobre la razón polvo-hielo, magnitud de importancia capital que afectaría significativamente a la evolución termofísica cometaria. Directamente relacionado con la evolución termofísica está la actividad cometaria donde también hemos intentado mostrar que existe incertidumbre debido a nuestro limitado conocimiento de las magnitudes

térmicas, a nuestra pobre comprensión de los procesos de producción del componente volátil (incluyendo las frecuentes explosiones observadas en cometas) y de la formación de manto.

Un problema abierto de especial relevancia, por sus implicaciones sobre la posibilidad de encontrar material prístino en cometas, es el de la existencia y supervivencia del hielo amorfo en la estructura cometaria. Como hemos visto no existe una prueba definitiva en favor de la existencia de hielo amorfo en cometas y casi todos los argumentos en su favor pueden ser contestados. Sin embargo, hay un indicio que, en nuestra opinión, sí favorece claramente la presencia de hielo amorfo, al menos frente a los clatratos. Este indicio es la sublimación a grandes distancias observada en cometas (ver e.g. Meech et al. 2009), a temperaturas intermedias entre la sublimación de compuestos altamente volátiles (que, por tanto, desaparecerían rápidamente de la región superficial) y las de sublimación del agua. El hielo amorfo, que se reestructura y cristaliza, podría ser una explicación viable para la actividad a grandes distancias heliocéntricas. La inmensa mayoría de los modelos (ver e.g. Prialnik et al. 2004 y referencias allí) que tratan con la evolución del hielo amorfo centran el estudio en el efecto de las características dinámicas, es decir, cómo afecta a la evolución del frente de cristalización las características de las órbitas. Según nuestro conocimiento, no se ha estudiado la evolución del frente de cristalización teniendo en cuenta la incertidumbre que afecta a las principales magnitudes cometarias (e.g. razón polvo-hielo). Además, casi todos los modelos consideran la reacción como exotérmica pura y solo en contadas ocasiones (Enzian et al., 1997) la energía liberada en la cristalización es reducida significativamente (aún manteniéndola netamente exotérmica). Sería conveniente evaluar la evolución termofísica de los cuerpos helados teniendo en cuenta que los experimentos de Kouchi y Sirono (2001) sugieren que la cristalización de amorfo impuro puede ser endotérmica. Hay dos observables que, según lo descrito, podrían estar directamente relacionados con la presencia de hielo amorfo en cometas: las explosiones de actividad, como las detectadas en el cometa 29P/Schwassmann-Wachmann y la posible presencia de granos de hielo amorfo en la coma, al menos, en cometas dinámicamente nuevos como el Hale-Bopp. En ese contexto, uno de los problemas abiertos sería determinar cómo afecta la incertidumbre en las principales magnitudes cometarias en la evolución del frente de cristalización, para evaluar la posibilidad de que éste esté relativamente cerca de la superficie. Otro problema abierto sería obtener una explicación para la ocurrencia de mini-explosiones, incluso en cometas en los que los modelos desarrollados suponen que no hay hielo amorfo relativamente cerca de la superficie (como el Tempel 1) o la alta frecuencia de explosiones observadas en los cometas sistemáticamente observados (como Tempel 1 o 29P/Schwassmann-Wachmann).

Así, como objetivo científico tras el desarrollo del modelo termofísico nos proponemos utilizar el modelo desarrollado en esta memoria para estudiar posibles implicaciones de la presencia de hielo amorfo en núcleos cometarios, teniendo en cuenta lo mencionado en la introducción de esta memoria. Utilizaremos los datos observacionales de dos de los cometas mejor observados y, presumiblemente, me-

nos evolucionados, el 29P/Schwassmann-Wachmann y el Hale-Bopp con el fin de evaluar la posibilidad de la existencia de hielo amorfo en ellos y constreñir, en la medida de lo posible, aquellas magnitudes cometarias sobre las que existe gran incertidumbre.

A modo de resumen y para terminar esta introducción, mencionar que esta tesis se estructura en 3 líneas de trabajo que se desarrollarán de manera sucesiva:

1.- Planteamiento, justificación, desarrollo y exposición de un modelo válido, en general, para describir medios porosos helados y, en particular, núcleos cometarios. Se pretende construir un modelo geométrica, dinámica y termofísicamente avanzado, en base a nuestro conocimiento actual que nos permita estimar la tasa de producción de agua, elementos más volátiles y material refractario. Con ello se persigue disponer de una herramienta que nos pueda proporcionar una posible interpretación de la naturaleza cometaria y su evolución termofísica en base a la comparación de resultados del modelo con datos observacionales.

2.- Para intentar avanzar en la comprensión de la naturaleza cometaria, utilizaremos el modelo desarrollado para evaluar posibles efectos de la presencia de hielo de agua amorfo en la estructura cometaria. En primer lugar, realizaremos un estudio en condiciones idealizadas que, teniendo en cuenta la incertidumbre asociada a magnitudes estructurales y térmicas cometarias, nos permita estudiar cómo evoluciona el frente de cristalización. Se pretende definir aquellas circunstancias físicas, si las hay, en las que el hielo amorfo podría sobrevivir relativamente cerca de la superficie nuclear y, en cualquier caso, evaluar las posibilidades de la supervivencia del material más prístino en el interior del núcleo (si el hielo amorfo fuese un constituyente inicial de los núcleos cometarios).

3.- Evaluado el comportamiento del hielo amorfo en una situación idealizada, como continuación del trabajo anterior y como aplicaciones directas del modelo desarrollado, se realizarán simulaciones en circunstancias realistas representando la naturaleza de los cometas 29P/Schwassmann-Wachmann y Hale-Bopp para determinar:

a.- si el modelo desarrollado nos puede proporcionar una interpretación satisfactoria simultáneamente de todos los datos observacionales conocidos de los objetos mencionados.

b.- cuáles son las magnitudes físicas características de la naturaleza cometaria que mejor reproducen el comportamiento observacional de los cometas considerados.

La elección de esos dos cometas (29P y Hale-Bopp) se justifica en su naturaleza, presumiblemente, poco evolucionada, lo que los define como objetos ideales para evaluar las posibles consecuencias de la presencia del hielo amorfo en su interior si éste existe.

Realizadas estas tareas, quedará evaluada la capacidad del modelo para describir razonablemente el comportamiento observacional de los cometas estudiados. Estaremos, pues, en condiciones de garantizar que el modelo presentado en esta memoria constituye una herramienta apropiada para el estudio de la naturaleza cometaria. Podremos, por tanto, comenzar a realizar simulaciones de cometas

como el 67P que puedan proporcionar información sobre su posible evolución y servir de apoyo a las estrategias de observación de Rosetta así como ayudar a la interpretación de los datos que obtenga.

## Capítulo 2

# Descripción del modelo Termofísico

Por modelo entenderemos una representación simplificada de una parte de la realidad, que en la práctica se traduce en un código numérico. En este capítulo describiremos el modelo que hemos desarrollado para simular núcleos cometarios así como su implementación en un código numérico. En primer lugar trataremos las hipótesis físicas que nos permitirán plantear las ecuaciones que utilizaremos para simular el comportamiento de nuestro sistema. A continuación, detallaremos el método numérico que utilizaremos para resolver dichas ecuaciones. Finalizaremos discutiendo las magnitudes clave del modelo, tanto las que están mejor establecidas como aquellas sobre las que hay menos acuerdo y son, por tanto, susceptibles de ser restringidas.

### 2.1. El papel de los modelos

Con nuestros medios actuales, una de las formas de ampliar nuestro conocimiento acerca de ciertos sistemas es mediante el uso de modelos, dentro de los que estarían los modelos computacionales. En esencia, un modelo computacional (en adelante sólo modelo) es simplemente un conjunto de hipótesis que, en última instancia, se traducen en una serie de ecuaciones que describen el sistema que intentamos conocer. Con el modelo podemos explorar las consecuencias de ciertas hipótesis y así bien descartarlas, comprobar bajo qué condiciones pueden ser correctas o descubrir si hay alguna cuestión que no hayamos considerado o no podamos explicar con nuestros conocimientos actuales.

Los modelos se utilizan sistemáticamente en ciencia para interpretar observaciones. A partir de los datos obtenidos, se aplican modelos que representan las hipótesis más establecidas y se deducen propiedades o características de los objetos de estudio. Es importante ser consciente de este uso de los modelos, no confundiendo los resultados obtenidos con resultados experimentales.

La primera dificultad que presenta la mayoría de los modelos es que aún cuando



conceptualmente sean relativamente simples requieren ajustar una gran cantidad de parámetros que no conocemos (o no con la suficiente precisión) al no tener datos claros sobre las magnitudes a las que están asociados. Algunos de dichos parámetros pueden hacer variar los resultados obtenidos significativamente. Se hace entonces necesaria una exploración general de todos ellos para identificar los que son clave y encontrar el rango en el que permiten obtener una interpretación física. También hay que tener en cuenta que añadir procesos al modelo, lo que generalmente aumenta la cantidad de parámetros, no siempre resulta en la obtención de una mejor interpretación de los hechos observacionales. Otro problema asociado al desarrollo de modelos es que las ecuaciones en las que se sustentan no suelen ser fáciles de resolver, lo que hace necesario implementar métodos numéricos complejos, además de simplificaciones para poder resolverlos o hacerlo de modo efectivo y computacionalmente asumible.

En cualquier caso es esencial recalcar que los resultados de los modelos son simplemente la aplicación práctica de teorías o hipótesis con intenciones predictivas y que como tales deben ser contrastadas con observaciones y experimentos. Podemos obtener gran cantidad de información utilizando modelos siempre que no perdamos esto de vista y, de hecho, conozcamos sus limitaciones concretas.

### **2.1.1. Modelizado de sistemas porosos helados**

Como su propio nombre indica, los modelos termofísicos resultan de la resolución simultánea de un modelo físico y otro energético, aproximándose así a un tipo de sistema que no era posible tratar adecuadamente con modelos más simples que no acoplaban la energía y masa. Clásicamente en un sistema poroso tratamos el transporte de masa de un fluido (líquido o gas) en un medio con una cierta permeabilidad. Así suelen utilizarse para representarlos modelos en los que generalmente no se considera la temperatura o ésta se incluye de modo estático, suponiendo un perfil constante. Por otro lado, los modelos puramente térmicos tratan únicamente el transporte energético en un medio cuyas características suponemos constantes.

Cuando tratamos medios porosos helados, no podemos desacoplar el transporte de energía del de materia, ya que las características del propio medio varían con la temperatura cuya evolución es, a su vez, influida por los cambios en el medio. De este modo, los medios porosos helados forman sistemas termofísicos fuertemente acoplados y como tales exhiben un comportamiento complejo. En primer lugar, además de permitir el paso de un flujo de masa a través del sistema de poros, la propia matriz puede sufrir transformaciones y cambios de estado que a su vez influyen en el transporte energético a través del medio. Asimismo, los cambios de estado de la matriz, además de modificar las características físicas y térmicas del medio (como por ejemplo la porosidad o conductividad), también añaden (o merman) material al fluido que se transporta en el medio.

En general, para resolver modelos debemos traducirlos a ecuaciones. En este caso, en el que pretendemos resolver fenómenos de transporte, lo que trataremos serán las variaciones que sufre con el tiempo la magnitud que debemos resolver

en cada punto del dominio espacial. Se obtienen así ecuaciones en derivadas parciales, que presentan variaciones tanto espaciales como en el tiempo. Para ello, lo primero que debemos hacer es plantearlas en un dominio espacial concreto. Las condiciones impuestas en la frontera de dicho dominio son de gran importancia, ya que fijarán cuál de las infinitas posibles soluciones de la ecuación es la de nuestro sistema y deben ser compatibles con él para que éste tenga sentido físico y se pueda resolver. Análogamente, es necesario también fijar unas condiciones iniciales adecuadas, que también influirán en la solución obtenida en nuestro sistema. La variabilidad de los medios porosos helados provoca también que su geometría sea alterada, aumentando por tanto la complejidad del problema en gran medida. Esto sucede por dos razones, en primer lugar el hecho de que el uso de una nueva geometría implica nuevas fronteras y por tanto las condiciones de contorno deben ser modificadas en consecuencia. En segundo lugar, en casos como el de medios porosos helados, es complejo cuantificar qué parte de la actividad cambia las características internas del medio y qué parte es la responsable de modificar las fronteras. A lo largo de este capítulo, describiremos detalladamente cómo hemos abordado estos problemas.

### **2.1.2. Características generales de nuestro modelo**

El modelo que vamos a describir es general, y puede ser utilizado para describir sistemas helados diferentes, cambiando sus condiciones de contorno e iniciales. En este trabajo, la aplicación fundamental que haremos será la simulación de núcleos cometarios. Como ya se mencionó en la motivación de esta memoria, la idea es construir una descripción termofísica avanzada de la naturaleza cometaria para acoplar con modelos geométrica y dinámicamente más completos desarrollados en nuestro grupo. Por ello, en esta memoria nos centraremos principalmente en el aspecto termofísico. Las cuestiones geométricas y dinámicas que complementarían este modelo se pueden consultar en Gutiérrez (2001). El modelo que aquí se presenta puede tratar, en primera aproximación, con cualquier geometría del núcleo, teniendo en cuenta los cambios de iluminación debido a la rotación del cuerpo y los posibles efectos estacionales de la orientación del eje de rotación cuando el cometa se mueve en su órbita. Sin embargo, para las aplicaciones posteriores mostradas en esta memoria y ante la falta de información, se considerará que los núcleos son esféricos, aunque se tendrán en cuenta los efectos de la rotación y de la orientación del eje.

Para diseñar la termofísica compleja, el modelo se construye básicamente sobre las hipótesis de Whipple (1950), considerando el hecho adicional (como es nuestro interés) de que inicialmente el hielo de agua presente en el núcleo cometario estará en fase amorfa. El núcleo estará constituido por una mezcla de hielo de agua y otro componente volátil, que en nuestro caso será el volátil secundario mayoritario cometario (monóxido de carbono), y material refractario (polvo), este último caracterizado por una distribución de tamaños. El volátil secundario podrá estar bien atrapado dentro del hielo amorfo, bien en forma sólida en la matriz, condensa-

do libre. La matriz que define la estructura nuclear será porosa y permitirá el flujo de energía y gas a través de ella. Conforme el Sol calienta la superficie, la temperatura del núcleo aumenta, controlada por la rerradiación térmica, la sublimación de componentes volátiles y la difusión de la energía. El perfil de temperatura en el interior dictará la sublimación o condensación de elementos volátiles en el interior de los poros, el transporte de masa así como la cristalización que, a su vez, liberará el volátil ocluido en el interior del hielo amorfo que cristaliza así como una cierta cantidad de energía. El gas liberado en la sublimación (que puede ocurrir en la superficie o en el interior afectando consistentemente al propio perfil de temperatura) arrastrará consigo las partículas de polvo que pueda levantar, dejando tras de sí las más pesadas. Esto hará que, dependiendo de las circunstancias físicas, se pueda formar un manto de material refractario en la superficie. El modelo tendrá en cuenta, además, que esta superficie retrocede por la erosión que se produce al perder masa (en forma de gas sublimado y polvo arrastrado). Conforme el núcleo evolucione térmicamente la zona volátil más superficial quedará constituida sólo por hielo cristalino, encontrándose el hielo amorfo a cierta profundidad. Siempre que haya material volátil atrapado en el hielo amorfo, aún cuando inicialmente no haya material volátil secundario condensado libre, se formará una región de dicho componente volátil por debajo de la zona cristalina. Esta región se formará por la condensación, en la zona más fría del núcleo cometario, del material volátil liberado en la cristalización y transportado hasta allí.

Lo dicho hasta ahora es la descripción cualitativa que caracteriza nuestro modelo que, como se puede ver, exige resolver de manera acoplada las ecuaciones de transporte de masa y energía en un medio poroso. Los principales elementos que acoplan nuestro sistema son que la energía se invierte en transformar masa (sublimar y cristalizar esencialmente) y que el transporte de masa (como flujo de gas a través de los poros) transporta a su vez energía. La resolución numérica de estas ecuaciones y el tratamiento computacional de la geometría tridimensional para representar el núcleo exige una discretización tanto de la superficie como del interior del núcleo. En lo que sigue utilizaremos los términos celda y nodo para describir esa discretización computacional de la superficie y el interior, respectivamente.

En resumen, se pretende entonces desarrollar un código informático que resuelva numéricamente las ecuaciones de transporte de masa y energía en toda la superficie y parte del volumen de un cuerpo que represente un núcleo cometario, discretizado conveniente y adecuadamente, teniendo en cuenta la descripción cualitativa anterior.

En relación al modelizado termofísico cometario, como mencionamos en la introducción, existe un gran número de descripciones que incluyen distintas aproximaciones y simplificaciones. En nuestra descripción no haremos un análisis detallado de todas ellas, sino sólo de las más importantes en relación a nuestro trabajo. En la bibliografía es posible encontrar dos referencias clave que describen, hasta la fecha de publicación, los principales esfuerzos en el modelizado cometario. Estos trabajos de referencia son Prialnik et al. (2004) y Huebner et al. (2006). Este último resume los esfuerzos de distintos grupos en el desarrollo de un modelo

termodinámico cometario, realizando una comparación exhaustiva, en circunstancias comunes, del comportamiento de los distintos modelos, evaluando las consecuencias de las diferencias tanto en las hipótesis de trabajo como en su implementación. En esas referencias es posible encontrar información sobre las principales hipótesis de los modelos, ampliamente asumidas por la comunidad y cuya utilización rara vez se justifica (como por ejemplo la expresión de la sublimación de Knudsen que veremos más adelante).

Hay que decir que aunque en la descripción general de nuestro modelo no realizaremos una comparación exhaustiva con modelos previos (al ser éstos muy numerosos), sí discutiremos ampliamente y en detalle las diferencias de nuestro modelo con aquellos que han sido utilizados para las mismas aplicaciones que se presentan en los capítulos posteriores.

En las secciones que vienen a continuación, describiremos las suposiciones en las que nos basamos, las aproximaciones que vamos a utilizar y lo que las justifica, así como la notación con la que vamos a describir el modelo.

Antes de nada, es importante no perder de vista los objetivos a los que está orientado este estudio, y la información que para alcanzarlos pretendemos obtener con nuestro modelo. La finalidad básica es la comparación de los resultados de nuestras simulaciones con las observaciones, y así obtener información acerca de los núcleos cometarios. Para ello, nuestras simulaciones nos darán estimaciones de la producción, tanto de agua o de gas de algún otro material volátil como del polvo arrastrado por los gases que escapan del núcleo. Otro dato importante que podemos obtener de nuestro modelo es la temperatura, tanto la superficial como su perfil en profundidad. También obtendremos perfiles en profundidad de las densidades de los distintos materiales que componen los núcleos cometarios. Aunque no disponemos de datos observacionales del interior de los núcleos cometarios y, por lo tanto, no podemos comparar estos perfiles con las observaciones, a partir de ellos sí que podremos conocer aspectos acerca de la evolución térmica del núcleo así como información general acerca de los núcleos que nos permitirán, por ejemplo, dar límites superiores para el porcentaje de volátiles secundarios, o las posibilidades de conservación de material prístino a profundidades accesibles.

## **2.2. Hipótesis físicas**

Nuestro modelo pretende representar, aún de manera simplificada, el material cometario teniendo en cuenta el conocimiento que tenemos actualmente. A continuación describiremos las hipótesis físicas generales que nos permitan definir nuestro modelo.

### **2.2.1. Conceptos básicos**

En primer lugar es importante señalar que realizaremos una representación macroscópica de nuestro sistema, en el sentido de que las variables que lo describen son una aproximación discreta o promedio de las características del sistema en

cada elemento de volumen cometario. A pesar de que en algún momento nos plantearemos cuestiones acerca de la microestructura del medio, será siempre para poder deducir las parametrizaciones (ya macroscópicas) necesarias para modelizar los procesos característicos del medio cometario.

Las magnitudes principales que intentaremos obtener de nuestro modelo son las densidades de los distintos materiales que componen el núcleo, que en general denotaremos como  $\rho_{ind}^{est,\alpha}$ , donde *est* se refiere al estado en el que está (por ejemplo, hielo o vapor, en el caso de los materiales volátiles),  $\alpha$  al material en sí e *ind* es un índice que indica localización espacial. En caso de que alguna de estas tres etiquetas no sea necesaria dejaremos de utilizarla. Por ejemplo, en el caso del polvo, la etiqueta de estado no será necesaria al ser siempre sólido salvo en el caso de que nos refiramos a la densidad compacta, concepto que describiremos en la siguiente sección. Al describir los diferentes componentes del modelo ampliaremos esta descripción de la notación, que se puede consultar también en la tabla 2.1.

Para aludir a cualquiera de los materiales que componen el sistema nos referiremos a su densidad, siempre en las unidades del Sistema Internacional. En el caso de los sólidos, cuando hablemos de la densidad de algún componente nos referiremos a su densidad actual o porosa, esto es, cantidad de masa de material en nuestra matriz sólida por unidad de volumen de cometa. Estas densidades las notaremos generalmente como  $\rho^{ice,\alpha}$ , donde  $\alpha$  denota el material, y puede ser “am” en el caso del hielo amorfo de agua, “cr” en el del hielo cristalino o “polv” para el polvo (en este caso, obviamente, no se utilizará la etiqueta de estado ice). De ahora en adelante, por simplicidad, cuando tratemos el componente volátil secundario en la descripción hablaremos del caso del monóxido de carbono (simbolizado como “CO”), asumiendo que en caso necesario se puede cambiar por cualquier otro material, típicamente dióxido de carbono o metano. También hablaremos de densidades compactas, un parámetro característico de cada material que indica la cantidad de masa por unidad de volumen de material no poroso o, dicho de otro modo, la mayor cantidad de material que se puede tener por unidad de volumen. En este caso, lo explicitaremos llamándoles densidades compactas y utilizando una “c” en la etiqueta de estado, esto es:  $\rho^{c,\alpha}$ , donde análogamente al caso anterior  $\alpha$  puede ser H<sub>2</sub>O, polv y CO. El material conjunto de la matriz sólida queda definido por las densidades de cada uno de los componentes que acabamos de mencionar. Al sumar todas las densidades porosas  $\rho^{ice,\alpha}$  obtendremos la densidad total de la matriz helada, que notaremos como  $\rho$  cuando no haya lugar a confusión. Análogamente a este caso, otras propiedades del material conjunto se obtendrán como combinación de las de cada uno de los componentes, pesándolas con las densidades, como describiremos con más detalle posteriormente. A estas magnitudes están asociadas las fracciones en masa de cada componente sólido:

$$X_{\alpha} = \frac{\rho^{ice,\alpha}}{\rho} \quad (2.1)$$

De este modo, en lugar de dar las densidades porosas de cada componente, podemos dar la densidad de volumen del material y las fracciones de masa, ya que

**Cuadro 2.1:** Tabla resumen de los parámetros y la notación que utilizaremos en esta memoria

Parámetro	Nombre	Unidades
$\rho^{\text{ice},\alpha}$	Densidad actual de hielo de $\alpha$	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{polv}}$	Densidad actual de polvo	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{vap},\alpha}$	Densidad de vapor de $\alpha$	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{c},\alpha}$	Densidad compacta del material $\alpha$	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{sat},\alpha}$	Densidad de saturación de $\alpha$	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho$	Densidad actual total de la matriz sólida	$\text{kg m}^{-3}$
$X_\alpha$	Fracción de masa de material $\alpha$	-
$T$	Temperatura	K
$p$	Porosidad	-
$K$	Conductividad total de la matriz	$\text{W K}^{-1} \text{m}^{-1}$
$K_\alpha$	Conductividad del material $\alpha$	-
$h$	Factor de Hertz	-
$c_\alpha$	Calor específico del material $\alpha$	-
$z$	Variable profundidad	m
$r$	Variable radio	m
$R$	Radio del cometa	m
$I$	Inercia térmica	$\text{W K}^{-1} \text{m}^{-2} \text{s}^{-1/2}$
$J_\alpha$	Flujo del material $\alpha$	-
$q_\alpha$	Producción interna del material $\alpha$	-
$R_g$	Constante de los gases perfectos	-
$\sigma$	Constante de Stefan-Boltzmann	-
$\epsilon$	Emisividad	-
$S$	Superficie específica	$\text{m}^{-1}$
$L$	Camino libre medio del gas en la matriz	m
$l$	Camino libre medio del gas según teoría cinética	m
$d_0$	Diámetro del poro	m
$\mu_\alpha$	Masa molecular del material $\alpha$	-
$\psi$	Tortuosidad	-
$H_\alpha$	Calor latente de sublimación del material $\alpha$	$\text{J kg}^{-1}$
$H_{\text{crist}}$	Calor latente de cristalización (neto)	$\text{J kg}^{-1}$
$f_{\text{atr}}$	Fracción de volátil atrapado en el hielo amorfo	-

son información equivalente.

Una vez tenemos las densidades sólidas, tanto porosas como compactas, podemos ya definir la porosidad de nuestro medio, de la siguiente manera:

$$p = 1 - \frac{\rho^{\text{ice,am}} + \rho^{\text{ice,cr}}}{\rho^{\text{c,H}_2\text{O}}} - \frac{\rho^{\text{ice,CO}}}{\rho^{\text{c,CO}}} - \frac{\rho^{\text{polv}}}{\rho^{\text{c,polv}}}. \quad (2.2)$$

La ecuación 2.2 representa la proporción de vacío que hay en nuestra matriz porosa. Consideremos ahora los casos extremos para obtener el rango de valores en los que la porosidad tiene sentido físico. Cuando el medio está vacío obviamente

las densidades porosas serán nulas, tomando la porosidad el valor 1 al estar todo el volumen compuesto de vacío. Respecto al caso contrario, el máximo valor que puede alcanzar la densidad porosa es la del material compacto (ya que por propia definición se trata de la mayor cantidad de masa que se puede encontrar por elemento de volumen), haciéndose la porosidad nula. Así, los valores aceptables para la porosidad estarán en el intervalo  $(0,1)$ , que es el rango en el que nos vamos a mover en nuestras simulaciones, siendo los casos extremos degeneraciones del sistema. En nuestras simulaciones partiremos de una porosidad inicial (generalmente elevada, coherentemente con lo que hemos mencionado acerca del material cometario en el capítulo anterior), pero nuestro sistema evolucionará con el tiempo, compactándose la matriz sólida si hay recondensación de hielo o haciéndose más porosa cuando hay sublimación.

Como se puede deducir de las definiciones que acabamos de dar, las densidades porosas, la densidad total y la porosidad están íntimamente relacionados, de modo que no es necesario dar todos los datos, sino que (supuesto que conocemos la densidad compacta de cada material), dadas las densidades porosas de cada componente obtendremos la densidad total y la porosidad asociadas. Recíprocamente, si tenemos una porosidad (resp. densidad total) y las fracciones de masa de cada componente podremos obtener tanto las densidades porosas como la densidad de volumen (resp. porosidad). De ahora en adelante, utilizaremos indistintamente unos u otros, dando estas relaciones por supuestas. En el caso en el que demos todos los datos tendremos en cuenta que, aún siendo redundantes, deben ser coherentes, para no caer en inconsistencias físicas.

### 2.2.2. Ausencia de fase líquida

Una de las condiciones características de los núcleos cometarios es que se mueven en un ambiente con una presión casi nula. Es por ello que podemos asumir que la presión total del sistema es la asociada a los gases procedentes de la sublimación, que está limitada superiormente por la de saturación. En la discusión siguiente trataremos el caso del agua, ya que el razonamiento para otros compuestos volátiles es análogo. Como se puede ver en el diagrama de fases del agua 1.1, no hay agua líquida a bajas presiones por debajo de los 273.13 K, donde hay un punto triple en el que serían estables los tres estados. En general, las zonas de los cometas en las que hay hielo no suelen estar a temperaturas mayores que unos 200 K, ya que al ser los núcleos cometarios altamente porosos y la presión en el exterior del núcleo prácticamente nula, el transporte de gases es altamente eficiente (como detallaremos en la sección asociada al flujo de gases). Por lo tanto, nos movemos en la zona del diagrama de fases en la que el hielo pasa a gas directamente y viceversa.

Por estas razones, ninguno de los modelos de sistemas cometarios que conocemos contiene la posibilidad de fase líquida en el núcleo. Sin embargo, vamos a mencionar un par de modelos para TNOs (que, como hemos visto, son objetos relacionados con los núcleos cometarios) que sí consideran la posibilidad de que

los componentes volátiles licúen. Es importante notar que dichos modelos consideran la evolución temprana y a muy largo plazo de los núcleos y que la fuente principal de calor es el decaimiento de componentes radiogénicos incorporados en el polvo. El primero de estos modelos aparece descrito en los trabajos de Merk y Prialnik (2003) y Merk y Prialnik (2006) y simula el proceso de acrecimiento (que en sí mismo tiene consecuencias térmicas) y calentamiento. Los resultados de este modelo son que se pueden alcanzar temperaturas elevadas e incluso agua líquida en bastantes condiciones para cuerpos de radio final entre 2 y 32 Km, lo que implicaría que los cuerpos helados pueden ser prístinos sólo en determinadas condiciones. Sin embargo, es importante notar que dicho modelo no incluye transporte de gases, que podría cambiar los resultados de modo significativo. El modelo de Desch et al. (2009) simula el calentamiento de Caronte, el compañero de Plutón, con un código que tiene en cuenta transporte de calor y posible diferenciación del cuerpo. En este caso, utilizan amoníaco, que rebajaría el punto de fusión de agua.

A pesar de los modelos que acabamos de mencionar, el nuestro (al igual que todos los modelos para la evolución de núcleos cometarios que conocemos) no considerará la fase líquida de los elementos volátiles. Ignorar la presencia de gases teniendo en cuenta que su producción es observada en los cometas no tiene sentido, y considerar las interacciones químicas de otros materiales volátiles con el agua está más allá del objetivo de este estudio. De este modo, en nuestro sistema, el hielo sublima directamente (y también a la inversa, el vapor condensa directamente en hielo) sin pasar por el estado líquido. Así, tendremos hielo de los diferentes componentes que vamos a tratar, vapor asociado a estos hielos y material refractario. Por tanto, el sistema constará de una matriz sólida, mezcla de material refractario y de los distintos hielos que integran el núcleo, con poros en los que residirá (y a través de los cuales se moverá) el vapor que haya sublimado.

### **2.2.3. El sistema está en equilibrio térmico local**

Esta suposición equivale a que todos los materiales en un mismo punto del espacio están a la misma temperatura, lo que implica que todos los componentes de nuestro sistema están acoplados térmicamente. En realidad, los diferentes componentes de nuestro sistema no tienen que tener necesariamente la misma temperatura, ni los diferentes componentes sólidos de la matriz, ni los vapores. Así, habría que considerar para cada uno de ellos una temperatura diferente y, por lo tanto, plantear una ecuación diferente para cada una de ellas, con parámetros distintos y acopladas entre sí a su vez por términos energéticos de intercambio de calor entre los diferentes subsistemas. Al suponer acoplamiento térmico, podemos sumar las ecuaciones de la temperatura de todos los materiales, de modo que obtendremos una ecuación general para la temperatura. Esta suposición es razonable en nuestro caso, porque, como hemos dicho, tratamos el sistema desde una perspectiva macroscópica, de modo que la temperatura que consideramos es la temperatura promedio del conjunto del material del sistema. Además, el esfuerzo para alcanzar un segundo orden en precisión no encuentra apoyo en las observa-



ciones, al ser tan grande la incertidumbre asociada a magnitudes clave como la conductividad, densidad, porosidad o razón hielo-polvo.

#### **2.2.4. Hielo amorfo**

Como se ha mencionado en la introducción, uno de los motivos principales de este trabajo es el estudio del proceso de cristalización, su evolución y las posibles consecuencias de su presencia en los cometas. Para ello, en primer lugar describiremos con mayor detalle lo que conocemos acerca del hielo amorfo, el proceso de cristalización y el comportamiento del hielo amorfo con impurezas, para establecer las bases de las hipótesis y parametrizaciones que vamos a utilizar en nuestro modelo.

##### **2.2.4.1. Fases del hielo amorfo**

En primer lugar, es importante notar que decir simplemente hielo amorfo es una imprecisión, de modo que antes de nada vamos a hacer una descripción algo más detallada (para más información acerca de las fases amorfas del agua se pueden consultar e.g. Giovambattista et al. 2005; Angell 2004 o Yue y Angell 2004). Como hemos dicho en la introducción existen varias fases amorfas de hielo de agua, fenómeno que se conoce como poliamorfismo del hielo de agua. El hielo amorfo de baja densidad (LDA, por sus siglas en inglés) es una de las formas de hielo amorfo sobre la que hay mayor acuerdo. Es la que mejor se conoce, de modo que es la que describiremos en mayor detalle y a la que nos referiremos cuando hablemos de hielo amorfo en general. Se puede obtener de diversas formas, entre ellas deposición de vapor a presiones muy bajas y temperaturas entre unos 77 y 120K y tiene una densidad aproximada de 940 kg/m<sup>3</sup>. Como hemos dicho, es un amorfo, y por lo tanto no presenta estructura molecular ordenada.

Además de la que acabamos de describir, hay otras formas de hielo amorfo propuestas, cuyas características (e incluso existencia como fase separada) son todavía controvertidas. La primera de ellas es el hielo amorfo de alta densidad (HDA) que también ha sido descrito de modo bastante concluyente. Con una densidad media de unos 1.15 g/cm<sup>3</sup>, se obtiene por deposición de vapor a temperaturas menores de 77k, o sometiendo hielo cristalino (cúbico o hexagonal), o LDA a gran presión a baja temperatura. Recíprocamente, el calentamiento de HDA a bajas presiones resultaría en un cambio de fase a LDA. Las transformaciones entre HDA y LDA son cambios de fase complejos, ya que ninguno de ellos tiene estructura fija (es una transición vítrea), por lo que hay dudas acerca de si constituyen una transición de primer orden o una transición de fase más parecida a las que ocurren entre estados líquidos. El hielo amorfo de muy alta densidad (VHDA), es otra forma vítrea del hielo de agua, más densa que el HDA (con densidad aproximada de 1.25 g/cm<sup>3</sup>), que ha sido descubierta recientemente, aunque hay ciertos indicios de que podría ser una forma relajada del HDA a altas temperaturas. En cualquier caso, como se puede consultar en el trabajo de Giovambattista et al. (2005) si-

mulaciones moleculares producen estados correspondientes a las tres formas que acabamos de mencionar y transiciones entre ellos al simular procesos como calentamiento (respectivamente enfriamiento) isobárico e isocórico o compresión (resp. decompresión) isoterma.

Teniendo en cuenta lo que acabamos y las condiciones de formación de los materiales cometarios ya mencionadas, podría ser que el hielo amorfo incorporado a los núcleos cometarios fuese HDA, ya que es el que se forma por deposición de vapor a bajas presiones a temperaturas tan bajas. Éste, al ser calentado pasaría a LDA, que a su vez pasaría a cristalino cúbico a temperaturas relativamente altas. Sin embargo, no conocemos las características de la transición vítrea entre ambas especies (incluso hay autores que defienden que, de hecho, no es una transición de fase propiamente dicha), de modo que por simplicidad, asumiremos una única especie de hielo amorfo, que se corresponderá con LDA, dado que es el que mejor conocemos y el que sufre la cristalización, que es el objetivo de nuestro estudio. Como ya se ha mencionado, en la gran mayoría de nuestras simulaciones partiremos de núcleos que contienen inicialmente hielo amorfo de agua, cuya densidad notaremos  $\rho^{\text{ice,am}}$  o simplemente  $\rho^{\text{am}}$ .

#### 2.2.4.2. Cristalización

El hielo amorfo de agua se puede mantener durante largo tiempo, metaestablemente, a temperaturas muy bajas, aunque cristaliza en hielo cristalino cúbico siguiendo una ley de activación dependiente de la temperatura. La cristalización es significativa a partir de unos 140 K. La variación en la cantidad de hielo amorfo en cada instante será una fracción de la cantidad presente, y su magnitud depende de la temperatura. El hielo amorfo pasará a hielo cristalino y, en caso de que haya algún otro material volátil atrapado en su interior, la fracción correspondiente pasará al estado gaseoso del material en cuestión.

Dicho esto, podemos definir ya la ecuación que describe el proceso de cristalización del hielo amorfo de agua en función de la temperatura  $T$  y el tiempo  $t$  tal y como lo vamos a aplicar a sistemas cometarios:

$$\frac{\partial \rho^{\text{am}}}{\partial t} = -\lambda \rho^{\text{am}} \quad (2.3)$$

donde la ley de activación para la cristalización,  $\lambda$ , es monótona creciente y viene dada por (Schmitt et al., 1989):

$$\lambda(T) = 1,05 \cdot 10^{13} e^{-\frac{5370}{T}} \quad \text{s}^{-1} \quad (2.4)$$

que representa la velocidad específica de cristalización frente a la temperatura y es la inversa de la escala de tiempo para la cristalización representada en la figura 2.1. Como se puede deducir de 2.4 para temperaturas bajas, la función  $\lambda$  tenderá a 0, de modo que, sustituyendo en la ecuación 2.3, obtendremos una variación casi nula en la cantidad de hielo amorfo. A medida que aumente la temperatura, la fracción de hielo que cristalizará (y dejará de ser amorfa, por lo tanto), será cada

vez mayor, hasta llegar a cristalizar prácticamente la totalidad en una unidad de tiempo a medida que  $\lambda$  aumente. La función  $\lambda$  alcanza la unidad alrededor de los 180 K, y en ese momento cristalizaría de golpe todo el hielo amorfo presente (llegados a este punto presumiblemente muy poco o ninguno).

Conocemos dos maneras por las cuales se podría revertir el proceso de cristalización (pasándose, pues de una estructura cristalina cúbica a una amorfa). La primera de ellas es el bombardeo electrónico, que puede dar lugar a hielo amorfo de baja densidad a partir de hielo cristalino cúbico. Este proceso podría ocurrir en las superficies cometarias al ser iluminadas por el Sol (de hecho, como ya hemos mencionado, se utiliza el grado de amorfización del hielo de agua para estimar la edad de superficies heladas en el Sistema Solar, asumiéndose que las superficies cristalinas son hielos relativamente jóvenes), si no fuese porque en general ocurre a escalas de tiempo muy largas. Además, cuando este bombardeo es más intenso es también cuando el cometa está más cerca del Sol y, por tanto, en caso de que haya hielo de agua en la superficie, ésta estará a temperaturas lo suficientemente altas como para que la cristalización sea más rápida que la amorfización, siendo pues la primera la que ocurre netamente. La segunda es la transformación del hielo cristalino cúbico en amorfo de alta densidad si se le aplica la suficiente presión rápidamente a bajas temperaturas. Las condiciones cometarias hacen altamente improbable que se apliquen altas presiones en un corto espacio de tiempo, salvo tal vez por una colisión. Sin embargo un choque de estas características podría muy bien ser catastrófico, pudiendo romper el núcleo o como mínimo calentarlo lo suficiente como para que se volviese a producir la cristalización. En nuestro modelo no vamos a considerar este tipo de eventos, por ser relativamente poco frecuentes estadísticamente. Así, teniendo en cuenta todo lo que acabamos de mencionar, consideraremos la cristalización como un proceso irreversible en los núcleos cometarios.

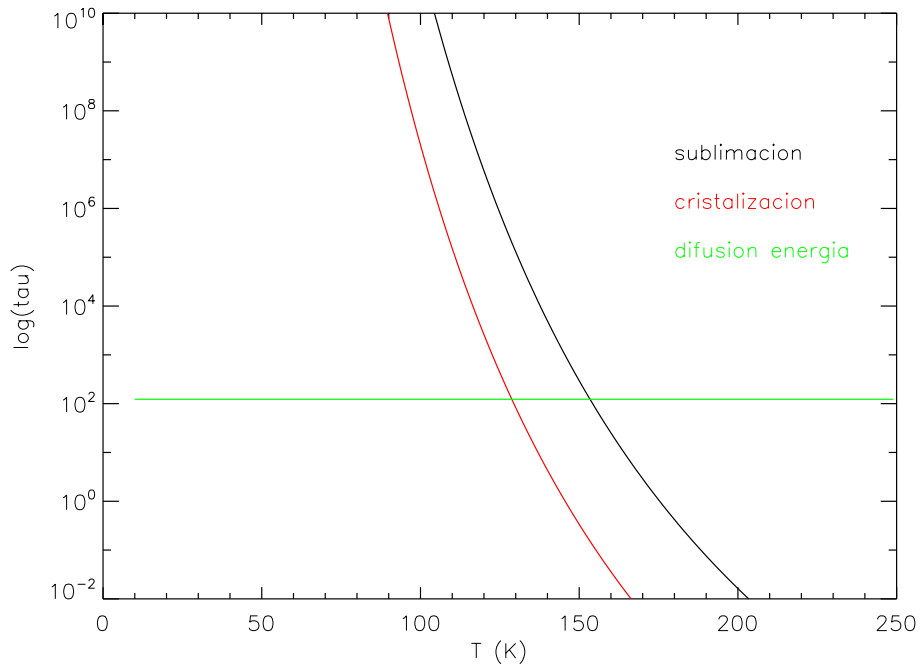
El conocimiento general acerca del hielo amorfo indica que la cristalización ocurre a temperaturas más bajas que la sublimación, pero cabe preguntarse si en condiciones cometarias ambos procesos podrían ser significativos, o si cuando la sublimación fuese relevante el hielo que sufriría el proceso sería ya cristalino. Para cuantificarlo, es necesario conocer la presión de saturación del hielo amorfo, dato que, al igual que muchos otros acerca del hielo amorfo, no conocemos. En casos como este nos vemos obligados a utilizar los datos del hielo cristalino, ya conocidos y los más próximos a priori a los del hielo amorfo, ya que al menos se refieren a la misma sustancia.

La escala de tiempo de cada proceso nos da una idea de su velocidad, normalmente dependiendo de la temperatura. Cuanto más pequeñas sean, más rápido será el proceso. Por ello, compararlas nos indica cual de ellos se producirá más rápido y nos permite identificar los más significativos en cada rango de temperaturas. Las escalas de tiempo de los procesos principales en el modelado termofísico de núcleos cometarios se puede consultar en el trabajo de Prialnik et al. (2004). En el caso de la cristalización, esta escala de tiempo es la inversa de la velocidad específica de cristalización dada por la función 2.4. En cuanto a escala de tiempo

de la sublimación, su expresión viene dada por

$$\tau_{\alpha} = \frac{\rho^{\text{ice},\alpha}}{SP_{\alpha}\sqrt{\frac{m_{\alpha}}{2\pi kT}}} \quad (2.5)$$

donde  $S$  es la superficie específica del sistema,  $P_{\alpha}$  es la presión de saturación del material  $\alpha$ ,  $m_{\alpha}$  su masa molecular y  $k$  la constante de Boltzmann.



**Figura 2.1:** Escala de tiempo de tres de los procesos principales que trataremos en nuestro sistema. Estas escalas están calculadas para un núcleo compuesto de hielo cristalino, con una porosidad de 0.5, una inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y radio de poro  $1.0 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ . El resto de parámetros utilizados para calcularlas son los utilizados en Huebner et al. (2006).

De la figura 2.1 resulta evidente que, efectivamente, cuando la sublimación es significativa, lo más plausible es que el hielo amorfo ya haya cristalizado al menos prácticamente en su totalidad. Es por esto que en nuestro sistema el hielo amorfo sólo sufrirá un proceso, que es el de cristalización, asumiendo que la sublimación se producirá ya en el hielo cristalino.

### 2.2.4.3. Hielo amorfo de agua con impurezas

El hielo amorfo es un material altamente poroso, tanto micro como macroscópicamente, y es un hecho aceptado por la comunidad científica que (ver, e.g Bar-Nun

et al. 1985, Bar-Nun y Laufer 2003 o Collings et al. 2003) precisamente por ello es capaz de atrapar moléculas de otros elementos volátiles en su estructura. En los huecos que deja la estructura del hielo amorfo, pueden quedar atrapadas ciertas moléculas pequeñas, adsorbidas en la matriz amorfa y que serían liberadas al producirse la cristalización. Esto ha sido estudiado por numerosos experimentos de laboratorio, entre ellos los de desorción programada realizados por Collings et al. (2004) y Gálvez et al. (2007). En la configuración más general de dichos experimentos, el hielo amorfo era depositado a bajas temperaturas y presiones junto a otros materiales más volátiles. Posteriormente la muestra era calentada gradualmente hasta la cristalización y posterior sublimación del agua. Los vapores liberados durante el proceso eran recogidos, obteniéndose así perfiles que muestran la cantidad de gas liberado en cada momento. Los resultados muestran la sublimación de los gases más volátiles a la temperatura esperada y posteriormente una nueva liberación de material volátil a la temperatura de la cristalización, lo que indica que una fracción de gases quedó atrapada en el hielo amorfo y liberada en la cristalización. El estudio de Gálvez et al. (2007), centrado en las interacciones del  $\text{CO}_2$  con el agua, hace además espectroscopía de muestras de hielos de ambos componentes depositadas a 80 K de modos diferentes obteniendo mezclas de  $\text{CO}_2$  tanto con hielo amorfo de agua (de baja densidad) como con cristalino. Sus resultados indican que el  $\text{CO}_2$  interactúa de dos modos diferentes con el hielo, uno de las cuales desaparece completamente a los 105 K con hielo cristalino y permanece en las muestras con hielo amorfo (con mayor o menor intensidad según el método de deposición utilizado). Esto indica que cierta cantidad de  $\text{CO}_2$  queda efectivamente atrapada cuando el hielo es amorfo. Es importante notar que en los experimentos de desorción programada también se observó liberación de compuestos volátiles junto a la sublimación del agua, cuando el hielo de agua debía ser ya casi completamente cristalino. Este fenómeno implica, bien que todavía queda cierta cantidad de hielo amorfo con gases atrapados en proceso de cristalización, bien que una fracción de elementos volátiles queda en el hielo ya cristalizado (por una cristalización incompleta o algún otro mecanismo de atrapamiento) o bien que el hielo amorfo sublima directamente.

Por las razones que acabamos de mencionar, incluiremos en nuestro modelo un tanto por ciento de la cantidad inicial de hielo amorfo que corresponderá al componente volátil secundario, que será liberado en forma de vapor al producirse la cristalización. En ese momento, los compuestos volátiles liberados consumirán (según las necesidades concretas de cada estudio) una parte de la energía liberada en la cristalización al ser desorbidos del hielo amorfo. En secciones posteriores describiremos con mayor detalle las cuestiones energéticas asociadas a la cristalización del hielo amorfo con impurezas, ya que la energía neta liberada en este proceso todavía es fuente de desacuerdo en el ámbito científico. Es importante resaltar que, al suponer que las impurezas modifican la energía neta liberada en la cristalización, implícitamente estamos suponiendo que la desorción de las mismas (y no sólo su liberación) se produce a la misma temperatura que la cristalización, consumiendo instantáneamente parte de la energía liberada. Si suponemos que la

desorción ocurre a temperaturas más bajas, la contribución de la energía liberada en el cambio de fase sería la misma que con hielo puro de agua y se debería consumir la energía necesaria para desorber las sustancias dopantes antes de que ocurra la cristalización.

### **2.2.5. El vapor puede fluir a través del sistema de poros**

Asociado al hielo de cada uno de nuestros materiales volátiles, tendremos también vapor residendo en los poros, cuya densidad denotaremos como  $\rho^{\text{vap},\alpha}$ , donde, como es habitual,  $\alpha$  se refiere al material volátil, pudiendo ser “H<sub>2</sub>O” ó “CO”. Como hemos mencionado anteriormente, en las condiciones cometarias el hielo sublima sin pasar por el estado líquido generando así los gases que llenarán los poros de nuestra matriz. Dichos gases pueden moverse a través de los poros y, con ellos, transportar también cierta cantidad de energía. A continuación, pasamos a describir los motivos que nos llevan a la parametrización de dicho flujo de gases que utilizaremos en nuestro modelo. El transporte de energía asociado al flujo de gases será tratado posteriormente, en la sección dedicada a la energía.

#### **2.2.5.1. Consideraciones generales sobre el flujo de masa**

El cálculo riguroso del flujo de vapor en un sistema como el nuestro es muy costoso computacionalmente. Por ello, en el contexto cometario se han utilizado en muchas ocasiones hipótesis adicionales que simplifican enormemente la expresión del flujo con el fin esencial de ahorrar mucho tiempo de computación. La primera de dichas hipótesis se basa en la idea de la gran eficiencia del transporte de los gases hacia el exterior de la matriz, que hemos mencionado anteriormente y ahora desarrollaremos. Además de en la baja presión exterior, esta idea se fundamenta en la baja fuerza cohesiva del material cometario, y se puede consultar en el trabajo de Choi et al. (2002). Las estimaciones acerca de la fuerza que mantiene el material cometario unido son del orden de  $10^3$  Pa (Sirono y Greenberg 2000), de modo que si el vapor no puede salir, la presión y la temperatura en los poros aumentarán, excediendo la fuerza cohesiva incluso para fracciones bajas de hielo en el material conjunto. Es por esto que aún un aumento moderado de la presión provocaría la apertura de grietas que permitirían el escape de gas. De ahí, Choi et al. (2002) deducen que la presión de gas en el interior de la matriz será en general menor que la de saturación, y así la mayoría del calor se invertirá en sublimación. De este modo, la ecuación de la masa se simplifica al ser la permeabilidad suficiente como para permitir un estado cuasi-estático en el interior y como resultado, todo el gas que se produce en el interior será expulsado del núcleo. La otra hipótesis, utilizada frecuentemente en el contexto cometario para simplificar la ecuación de la masa (y se usa, por ejemplo, en el trabajo de Tancredi et al. 1994) se basa en la idea opuesta: que el vapor en el interior del cometa está en equilibrio con el hielo. Por lo tanto su presión de vapor puede ser aproximada por la de saturación, salvo en una capa muy delgada de la superficie (del orden de las decenas de  $\mu\text{m}$ ) cuando la sublimación

es significativa. Esta capa se modelizaría aparte, suponiendo que en ella el sistema es cuasi-estático por la eficiencia de la expulsión de gas en una capa superficial tan delgada y porque cuando la consideremos el proceso más significativo será la sublimación, que tendrá una escala de tiempo muy corta. Esta aproximación puede ser útil en ciertas circunstancias, pero tiene varias limitaciones. La primera de ellas es que esta suposición sólo es válida para un componente volátil mayoritario, de modo que haya hielo suficiente como para que se mantenga la presión de saturación del hielo aunque la temperatura fluctúe. Esto provoca que si el hielo se evapora, quedando un manto de polvo, esta descripción deja de ser válida. Además, ya desde el punto de vista de la aplicación práctica cuando la sublimación es significativa hay que acoplar el sistema de la capa al interior, y las interfaces (aún surgiendo de manera natural, que no es siquiera el caso) son zonas complejas numéricamente, lo que obliga a considerar varios regímenes para que sea viable.

Nosotros utilizaremos una descripción completa del flujo, a pesar de las desventajas computacionales, utilizando únicamente las simplificaciones que describiremos a continuación. La razón es que, aunque las dos hipótesis que acabamos de mencionar tienen sentido en el contexto cometario, ambas impiden por construcción el fenómeno de recondensación. Una descripción completa del flujo nos indicará si se dan las condiciones para que se produzca la recondensación, que será tratada en caso necesario.

### 2.2.5.2. Régimen de flujo

En última instancia los gases son moléculas que chocan entre sí y con los límites del volumen que ocupan. Su forma de transportarse dependerá de la densidad de gas, que indica la cantidad de moléculas por unidad de volumen y, por lo tanto, la probabilidad de colisiones. A grandes rasgos, cuando las densidades son bajas, habrá pocas moléculas moviéndose en el volumen, de modo que las probabilidades mayores de choque serán con las fronteras. La situación será la inversa para altas densidades. En el primer caso el flujo sería de Knudsen y en el segundo sería de Poiseuille o viscoso. Una manera de cuantificar las probabilidades de choque y caracterizar el régimen de flujo cuando el gas habita un sistema de poros, es el llamado número de Knudsen,  $Kn$ .  $Kn$  es la razón entre el camino libre medio (dado por la teoría cinética) de las partículas que componen el gas y el diámetro de los poros. Como se deduce de su definición, cuando  $Kn$  sea mucho menor que la unidad la distancia media que recorrerán las moléculas antes de chocar entre sí será mucho menor que la distancia a la pared del poro y por lo tanto serán las colisiones entre moléculas las más probables. Los flujos en estas condiciones serán por lo tanto viscosos. Por el contrario, para valores mayores que 1 las moléculas tendrán mayores probabilidades de chocar contra las paredes del capilar y estaremos en las condiciones de régimen de Knudsen.  $Kn$  vendrá dado por la siguiente expresión:

$$Kn = \frac{l}{d_0} = \frac{kT}{d_0 \sigma_\alpha P_\alpha} \quad (2.6)$$

donde la segunda igualdad se ha obtenido al sustituir  $l$ , el camino libre medio de la molécula de gas  $\alpha$  dado por la teoría cinética,  $k$  es la constante de Boltzmann,  $\sigma_\alpha$  la sección eficaz de la molécula  $\alpha$  y  $P_\alpha$  la presión. Si sustituimos en 2.6 valores típicos para el agua (ver Prialnik et al. 2004) obtendremos que  $l \sim 4$  cm, de modo que para valores del radio del poro del orden o menores que el mm tendremos que el régimen de Knudsen será apropiado para describir el flujo de nuestro sistema.

El régimen de transporte que vamos a utilizar en este trabajo para simular el material cometario es por lo tanto el régimen de Knudsen. El hecho de considerar las colisiones entre moléculas escasas tiene una ventaja adicional, y es que permite tratar el flujo de cada uno de los componentes por separado. De este modo, la ecuación de continuidad para la masa de cada material resulta independiente de la de los demás, acoplándose todas en la ecuación de balance energético. Cuando se consideran flujos viscosos de varios componentes, éstos deberán estar acoplados, al ser altamente probables las colisiones entre moléculas de ambos materiales volátiles. Si bien varios autores consideran la posibilidad de que en algunos momentos se pase a flujo viscoso, el único modelo que conocemos que calcula rigurosamente el transporte gaseoso de una mezcla binaria de gases es el de Enzian et al. (1997). De nuevo, como las circunstancias en las que se puede dar un flujo viscoso se pueden considerar marginales, se trataría de un efecto de limitado impacto y, en todo caso, de segundo orden

En nuestro modelo el flujo para cada material  $\alpha$  vendrá dado por la siguiente expresión (ver e.g. Prialnik 1992):

$$J_\alpha = -L\nabla\left(\sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_\alpha}}\rho^{\alpha,\text{vap}}\right) \quad (2.7)$$

donde  $R_g$  representa la constante de los gases perfectos,  $\mu_\alpha$  la masa molecular y  $L$  el camino libre de las moléculas en el medio, que será descrito en detalle en la sección siguiente. El término de la raíz cuadrada representa la velocidad térmica de las moléculas, de modo que, multiplicado por su densidad se puede entender como un parámetro de movilidad del gas (Tancredi et al., 1994), indicando la tendencia del vapor a desplazarse. Así, el flujo vendrá dado por la variación espacial en la movilidad del gas, pesada por el camino libre. Es importante tener en cuenta que la aparición de  $R_g$  en la expresión 2.7 implica también que estamos asumiendo que tratamos con gases ideales. Esta suposición es aceptable en nuestras condiciones ya que, al estar en régimen de Knudsen, las colisiones entre moléculas son más improbables que con las paredes de los poros. Es por ello que, al menos en primer orden, podemos despreocupar las interacciones moleculares y por lo tanto suponer que nuestros gases se comportan como gases ideales.

En un sistema como el nuestro, cuya composición y características van evolucionando con el tiempo, cabe preguntarse si las condiciones para el flujo continúan siendo como suponemos al principio. En estas circunstancias, parece lógico utilizar una expresión intermedia tipo Adzumi, de la siguiente forma:

$$J = a_0 J_{Kn} + a_1 J_{Vis} \quad (2.8)$$



donde  $J$ ,  $J_{Kn}$  y  $J_{Vis}$  representan las expresiones para el flujo total, de Knudsen y viscoso, respectivamente, y  $a_0$  y  $a_1$  son dos coeficientes en el intervalo  $[0,1]$ , que deben sumar uno y varían según las condiciones. Sin embargo, el trabajo de Prialnik et al. (2004) nos da las condiciones para simplificar este tipo de expresión. La ecuación 2.7 es formalmente similar a la del flujo viscoso cuando suponemos la temperatura uniforme, de modo que podemos obtener una interpolación entre ambos regímenes que nos permitirá utilizar un flujo apropiado en cada momento, y tiene la siguiente expresión:

$$J = \left(1 + \frac{9\pi}{256Kn}\right)J_{Kn} \quad (2.9)$$

donde  $Kn$  es el número de Knudsen, que como ya hemos mencionado es el cociente entre el camino libre medio de una molécula de gas  $l$  y el diámetro del poro  $d_0$ . Así, de la ecuación 2.9 se deduce que para valores grandes de  $Kn$  la expresión que tendremos es exactamente la del flujo de Knudsen, y para valores pequeños el flujo irá incrementando continuamente hasta llegar a valores de flujo viscoso. Sin embargo, como ya hemos mencionado, el asumir la posibilidad de cambio a flujo viscoso con una expresión como esta puede ser inconsistente con algunas de las hipótesis que hacemos, a saber, que los flujos de los distintos materiales volátiles son independientes y que los gases se comportarán como gases ideales. Por estas razones, asumiremos que nuestro sistema se mantiene en las condiciones del régimen de Knudsen.

### 2.2.6. Estructura microscópica del medio

A la hora de describir el transporte de masa a través de la matriz o la cantidad que puede sublimar es clave la estructura microscópica que tiene nuestro medio, de modo que debemos detallar la configuración interna de los poros y el material de la matriz. Aunque nuestro modelo es macroscópico, la microestructura es importante a la hora de definir sus parámetros. Típicamente se consideran dos posibilidades: que supongamos que el material está compuesto de pequeñas esferas de un diámetro determinado, o que lo consideremos un medio sólido atravesado por capilares de tortuosidad  $\psi$ . La tortuosidad es un parámetro similar en magnitud a uno y que representa una corrección para tener en cuenta lo torcidos que están los capilares. El caso  $\psi = 1$  sería el de cilindros rectos.

La primera magnitud en la que influirá la microestructura supuesta para el material es el camino libre medio de una molécula en el medio, que denotaremos  $L$ , y que se puede entender como una corrección del flujo para tener en cuenta la permeabilidad de la estructura particular que suponemos para nuestra matriz. No se debe confundir con el camino libre medio de una partícula de gas libre dado por la teoría cinética que notamos como  $l$  y depende únicamente de las colisiones entre moléculas, sino que en este consideraremos los choques entre las moléculas del gas y las paredes del medio. Para el caso en el que consideramos un medio compuesto de capilares,  $L$  vendrá dado por la siguiente expresión (ver, e.g. Huebner et al. 2006):

$$L = \frac{4pd_0}{3\psi^2} \quad \text{m} \quad (2.10)$$

donde se puede ver que el camino libre medio dependerá del diámetro de los capilares  $d_0$ , su tortuosidad  $\psi$  y de la porosidad  $p$  del elemento de volumen. Como es de esperar por su definición, fijados  $d_0$  y  $\psi$ , el parámetro  $L$  aumenta con la porosidad, aunque queda acotado ya que el diámetro del poro limita la distancia que puede recorrer una molécula. Análogamente, también aumenta con el tamaño del poro y disminuye con la tortuosidad.

En el caso en el que la estructura del medio sea la de esferas de diámetro  $d_0$ , el parámetro  $L$  vendrá dado por (ver, e.g. Huebner et al. 2006):

$$L = \frac{16p^{\frac{3}{2}}d_0}{3(1-p)^{\frac{1}{3}}} \quad \text{m} \quad (2.11)$$

Como se puede deducir de la ecuación anterior, fijado un diámetro  $d_0$  para las esferas que componen la matriz sólida, el parámetro  $L$  tiende a infinito cuando la porosidad tiende a 1. Si bien el límite de porosidad 1 implicaría un elemento de volumen vacío, un camino libre medio infinito no es razonable, ya que debería estar acotado al menos por el camino libre medio dado por la teoría cinética  $l$ . Además, nuestra descripción del flujo (y, de hecho, del sistema completo) que acabamos de hacer pierde sentido en el vacío. La razón principal es que el vacío implicaría la destrucción de la matriz así como de la geometría intrínseca del medio y nociones como el régimen de Knudsen. Aún así, el hecho de que el parámetro  $L$  no este acotado puede causar un aumento artificial del flujo, así como inestabilidades numéricas. Es por ello que, escogeremos la descripción de los capilares.

Otra magnitud de importancia relacionada con la microestructura es la superficie específica,  $S$ , que está asociada a la sublimación.  $S$  representará la superficie lateral de las paredes de los poros en cada elemento de volumen, que es desde la que se producirá la sublimación. Como ya hemos justificado, nosotros utilizaremos la aproximación de los capilares, de modo que el parámetro  $S$  tendrá la expresión siguiente:

$$S = \frac{4p}{d_0} \quad \text{m}^{-1} \quad (2.12)$$

donde, como antes,  $p$  representa la porosidad y  $d_0$  el diámetro de la sección circular de los capilares de nuestra matriz.

Es importante mencionar que en esta expresión va implícita la suposición de que el coeficiente (o eficiencia) de adhesión del gas a las paredes es la unidad. El coeficiente de adhesión es una magnitud que se utiliza en química de superficies para cuantificar la eficiencia de un gas al adsorberse en una superficie y viene dado por el cociente entre la cantidad adsorbida en la superficie y la cantidad que impacta en ella. Así, dicho coeficiente será la unidad cuando todo el gas que toque la superficie quede adsorbido y cero cuando todas las moléculas que impacten reboten. Esta suposición hace que sublimación y condensación, una vez modelizadas y

entendidas como funciones matemáticas, sean inversas. En cualquier caso, estudios como el de Brown y George (1996), hallaron experimentalmente que el coeficiente de adsorción del agua en hielo de agua a bajas temperaturas es 0.99 (con un error de 0.03), de modo que se puede asumir perfectamente que el coeficiente de adhesión es uno y podemos entender que la condensación y sublimación son procesos inversos también en sentido matemático.

### 2.2.7. Sublimación y producción de gas

Es conocimiento general que la actividad cometaria está asociada a la sublimación de los hielos del núcleo, de modo que es importante modelizar este proceso cuidadosa y adecuadamente. A lo largo de esta sección veremos cómo parametrizar el proceso de sublimación (y el de condensación, que es su inverso) y también la forma que tomará la producción total de gas del cometa, que es la que en última instancia se puede comparar con las observaciones. Ya hemos mencionado que el hielo sublima directamente (y a la inversa, el vapor condensa en hielo sin pasar por la fase líquida) y que el vapor de todos los componentes reside en los poros, no considerándose densidad de la matriz.

#### 2.2.7.1. Sublimación y condensación

Como ya hemos mencionado, el vapor de nuestro sistema provendrá de la sublimación de los hielos que componen la matriz del sistema. El vapor de agua (resp. de monóxido de carbono) sublimará a partir del hielo cristalino (resp. del hielo de CO) cuando su densidad de vapor sea menor que la de saturación (que denotaremos como  $\rho^{\text{sat},\alpha}$ , siendo  $\alpha$  “H<sub>2</sub>O.” o “CO”) que sigue una ley que crece exponencialmente con la temperatura. Cuando la densidad de vapor es mayor que la de saturación el vapor condensará en el mismo tipo de sólido del que sublima, de modo que el sistema tienda siempre al equilibrio. La parametrización de la tasa de sublimación-recondensación en el interior del modelo está asociada, además de a las densidades de vapor existentes y de saturación, a la velocidad térmica asociada al gas y, en el interior, a la superficie específica  $S$ , descrita en la sección anterior, que cuantifica el área de superficie lateral de poros por unidad de volumen.

Llamaremos tasa de producción a la cantidad de hielo que sublima por unidad de tiempo. La expresión clásica para la tasa de producción por unidad de área para el hielo puro es la llamada tasa de producción de Hertz-Knudsen, que notaremos como  $Q_{\text{HK}}$  y está basada en la teoría cinética. Ésta nos indica que el flujo de un gas escapando al vacío es:

$$Q_{\text{HK}} = \frac{1}{4}nv = \frac{1}{4}n\sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu_\alpha}} \quad (2.13)$$

donde  $n$  es la densidad molecular del gas y  $v$  su velocidad media. La segunda igualdad se obtiene sustituyendo esta velocidad por la velocidad térmica, asumiendo

que la función de distribución de las velocidades del gas a temperatura  $T$  es Maxwelliana. Teniendo en cuenta todo lo anterior, la expresión de la producción de gas para cada material  $\alpha$ , que denotaremos  $q_\alpha$  y nos dará cantidad de hielo sublimada o condensada en el interior de nuestra matriz, será:

$$q_\alpha = S \sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_\alpha}} (\rho^{\alpha,\text{sat}} - \rho^{\alpha,\text{vap}}) \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^3\text{s}} \quad (2.14)$$

donde  $R_g$  es la constante de los gases perfectos,  $T$  es la temperatura,  $\mu_\alpha$  la masa molecular del material  $\alpha$  y el parámetro  $S$  representa la superficie específica. En esta ecuación, hemos trasladado la densidad y la velocidad a las variables que utilizaremos en nuestro modelo. Como hemos mencionado en la sección 2.2.5, el término de densidad multiplicado por la velocidad se puede entender como un parámetro de movilidad del gas. Considerándolo así, la producción de vapor en el interior vendrá dada por la diferencia entre la capacidad para moverse del gas en saturación y la que tiene en ese momento, pesada por la superficie específica  $S$ .

Llegados a este punto, estamos preparados para definir el frente de sublimación de un componente volátil. En los núcleos cometarios, al venir el aporte energético principal de la superficie, los compuestos volátiles irán desapareciendo también desde las zonas más superficiales a medida que la temperatura aumenta lo suficiente como para que la sublimación sea significativa. En ese momento, dado que estamos suponiendo un acoplamiento térmico perfecto entre los distintos materiales de la matriz sólida, la energía dejará de aumentar la temperatura en esa zona, ya que será invertida principalmente en sublimar el elemento volátil en cuestión. Por la misma razón, el transporte energético será también mínimo. Se formará, pues, un frente de sublimación para cada elemento dependiente de su volatilidad por debajo del cual el núcleo se conservará a temperaturas más bajas. El frente irá avanzando hacia el interior a medida que reciba energía y el material volátil en cuestión vaya sublimando. Este frente, además, estará rodeado de zonas con presión más baja (ya que un lado desemboca en el exterior del cometa y en el otro las temperaturas son bajas, aún habiendo equilibrio con el hielo), de modo que el flujo de gas será particularmente intenso en esta zona. Una parte del vapor se moverá hacia la superficie y será expulsada del cometa, mientras que otra fluirá hacia el interior, donde recondensará al llegar a zonas más frías.

La parametrización de la sublimación del hielo superficial sigue la misma filosofía que en el interior, teniendo en cuenta que en una mezcla de polvo y hielo sólo una fracción  $f_\alpha^{\text{sup}}$  de la superficie está recubierta por hielo y por lo tanto es susceptible de sublimar. De este modo, si suponemos que el exterior del núcleo está a densidad nula, tendremos:

$$Q_\alpha^{\text{sup}} = f_\alpha^{\text{sup}} \sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_\alpha}} \rho^{\alpha,\text{sat}} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}} \quad (2.15)$$

donde la notación es análoga a la de la ecuación 2.14. El factor de superficie  $f_\alpha^{\text{sup}}$  se calcula en función de las densidades porosas  $\rho^\alpha$  y compactas  $\rho^{c,\alpha}$  de los

materiales implicados, de modo que la porosidad de la matriz también está tenida en cuenta implícitamente. Los factores de superficie se calculan dos a dos, de manera sucesiva. Así, en primer lugar calcularemos el del hielo (suma del de todos los componentes) y a partir de éste obtendremos las fracciones de cada uno de los hielos. A continuación presentaremos el cálculo completo para el factor de superficie del agua y el del monóxido de carbono, supuesto que nuestro sistema tiene hielos de ambos, así como polvo.

$$f_{\text{ice}}^{\text{sup}} = \left( 1 + \frac{\rho^{\text{c,ice}} \rho^{\text{polv}}}{\rho^{\text{ice}} \rho^{\text{c,polv}}} \right)^{-1} \quad (2.16)$$

$$f_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{sup}} = f_{\text{ice}}^{\text{sup}} \left( 1 + \frac{\rho^{\text{c,H}_2\text{O}} \rho^{\text{CO}}}{\rho^{\text{H}_2\text{O}} \rho^{\text{c,CO}}} \right)^{-1} \quad (2.17)$$

$$f_{\text{CO}}^{\text{sup}} = f_{\text{ice}}^{\text{sup}} - f_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{sup}} \quad (2.18)$$

donde las densidades  $\rho^\alpha$  se refieren a las densidades en la superficie y  $\rho^{\text{ice,c}}$  indica la densidad compacta del conjunto helado, que hemos calculado también como suma de las de los hielos que componen la mezcla.

Es importante incidir en todas las suposiciones que se hacen en nuestro modelo, de modo que podamos estudiar sus consecuencias en el sistema. En este caso, en la expresión 2.15 estamos asumiendo que el flujo de retorno del gas sublimado en la superficie es nulo. Esto puede no ser cierto a altas temperaturas porque en dichas condiciones la coma será relativamente densa en las zonas circumnucleares. Así, la sublimación superficial no estaría ocurriendo en condiciones perfectas de vacío, obteniéndose una producción superficial efectiva menor a la dada por la ecuación 2.15. El modo más sencillo de considerar la condensación superficial es tratándola como que una proporción fija del flujo saliente vuelve a condensar, como sucede en Prialnik et al. (2004).

### 2.2.7.2. Densidades de saturación

Las densidades de saturación de los distintos materiales en función de la temperatura son esenciales en un sistema como el nuestro. La densidad de saturación regula el proceso de sublimación (lo que es equivalente a la producción de gas en el interior de la matriz), y por lo tanto, también el flujo. Las expresiones para ellas son normalmente ajustes empíricos, aunque los datos a las temperaturas y presiones que nos ocupan son muy escasas, en caso de existir. En nuestro caso, utilizaremos la expresión más habitual en el contexto cometario, de la forma siguiente (Prialnik et al., 2004):

$$\rho^{\text{sat},\alpha}(T) = \frac{\mu_\alpha}{R_g T} A_\alpha e^{\frac{-B_\alpha}{T}} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (2.19)$$

donde al igual que anteriormente,  $\mu_\alpha$  es el peso molecular del material  $\alpha$ , y  $R_g$  y  $T$  son la constante de los gases perfectos y la temperatura, respectivamente. El

factor  $\frac{\mu_\alpha}{R_g T}$  se utilizará para pasar de la función de la presión de saturación a la de la densidad, suponiendo implícitamente que se verifica la ley de los gases perfectos. Las constantes  $A_\alpha$  y  $B_\alpha$  de 2.19 son las que varían de material a material y se pueden encontrar por ejemplo en la revisión de Prialnik et al. (2004). En el caso de los materiales volátiles que utilizaremos en este trabajo, agua y monóxido de carbono, tendremos  $A_{\text{H}_2\text{O}} = 356 \cdot 10^{10}$ ,  $B_{\text{H}_2\text{O}} = 6141,667 \text{ K}$ ,  $A_{\text{CO}} = 0,12631 \cdot 10^{10}$  y  $B_{\text{CO}} = 764,16 \text{ K}$ .

Existen algunas parametrizaciones más complejas, que se pueden ver en el trabajo de Huebner et al. (2006) y tienen la forma siguiente:

$$\rho^{\text{sat},\alpha}(T) = \frac{\mu_\alpha}{R_g T} 10^{A_\alpha + \frac{B_\alpha}{T} + C_\alpha \log_{10} + D_\alpha T} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \quad (2.20)$$

donde, como en el caso anterior,  $\alpha$  representa el material y el factor que multiplica a la exponencial es para obtener la densidad a partir de la presión de saturación.

La incertidumbre asociada a la medida de las magnitudes cometarias (que hemos mencionado en el capítulo anterior) hace que un sistema de tipo cometa no sea adecuado para verificar lo adecuado de cada una de estas expresiones. Además, en el caso particular del agua, el componente volátil principal, las expresiones 2.19 y 2.20 tienen valores muy similares en el rango de temperaturas que vamos a considerar, de modo que finalmente nos hemos decidido por la parametrización más simple.

### 2.2.7.3. Producción total de gas

Las cantidades de los distintos gases producidas por el núcleo de un cometa son, evidentemente, uno de los resultados más importantes que se pueden obtener de nuestro modelo, ya que son directamente comparables con las observaciones. Es por ello que a continuación pasaremos a detallar la expresión que tomará dicha producción en nuestro modelo. Es evidente que una parte considerable de la producción de gas vendrá dada por la sublimación directa desde la superficie del núcleo, que, como hemos mencionado, estimaremos mediante la expresión 2.15. Sin embargo, es importante también la contribución del flujo de gases procedente del interior del núcleo, sobre todo cuando no existe hielo en la superficie del material volátil en cuestión (por ejemplo, porque se haya creado un manto de polvo en el que estén agotados los compuestos volátiles).

Para parametrizar la contribución de dicho flujo en nuestro modelo continuaremos con la misma filosofía de la producción por sublimación. Además, consideraremos que todo el vapor que reside en los poros a la altura de la superficie será expulsado a la coma, y seguiremos usando la suposición de presiones nulas en el exterior del cometa.

$$Q_\alpha^{\text{flu}} = \sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_\alpha}} \rho_{\text{sup}}^{\text{vap},\alpha} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}} \quad (2.21)$$

donde la notación es la habitual. Esta ecuación es muy similar a la de la tasa de sublimación superficial de nuestro modelo (dada por la ec. 2.15). Esto tiene sentido ya que, como hemos dicho, la idea subyacente a la tasa de sublimación de Hertz-Knudsen 2.13 (en la que está basada 2.15) es la del gas que escapa al vacío, que es precisamente lo que asumimos que ocurre al vapor de los poros de la superficie del núcleo.

Llegados a este punto podemos describir la producción total de material  $\alpha$  que saldrá de la superficie cometaria y vendrá dada por:

$$Q_{\alpha}^{\text{tot}} = Q_{\alpha}^{\text{sup}} + Q_{\alpha}^{\text{flu}} = \sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_{\alpha}}} (f_{\alpha}^{\text{sup}} \rho^{\text{sat},\alpha} + \rho_{\text{sup}}^{\text{vap},\alpha}) \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}} \quad (2.22)$$

### 2.2.8. Tratamiento del polvo

Todas las observaciones de cometas muestran pequeños granos de polvo en la coma, cuya dispersión de la luz procedente del Sol es responsable de la mayoría de su brillo. Dichos granos de polvo proceden también del núcleo, fuente de todo el material observado en la coma, siendo arrastrados por el gas expulsado. A continuación explicaremos las dificultades que conlleva el tratamiento de los procesos sufridos por el material refractario, para terminar describiendo la expresión que obtendremos para la producción de polvo, a comparar con las observaciones.

En el contexto cometario se han hecho muchas aproximaciones diferentes acerca del comportamiento del polvo de los núcleos cometarios. Una de las más simples, que se utiliza en Tancredi et al. (1994), es considerar la fracción de polvo  $X_{\text{polv}}$  constante. De este modo no hace falta calcular la densidad ya que se puede obtener a partir de la de los hielos. Esto implica que cuando el hielo sublima desaparece también la misma cantidad de polvo, de modo que no se puede formar un manto de material refractario. En el trabajo de Tancredi et al. (1994), esta suposición tiene el objetivo de mantener la coherencia del modelo ya que, como hemos visto en el apartado del flujo, para asumir que la presión de vapor es la de sublimación en el interior del cometa debemos tener hielo suficiente, y mantener la razón polvo-hielo constante es una forma de garantizarlo.

Otra aproximación simple y opuesta a la anterior es la utilizada en Prialnik y Rosenberg (2009), que permite hacer que el tratamiento de polvo sea bastante sencillo. En ella el polvo es estático y se queda donde estaba inicialmente. A medida que los diferentes materiales volátiles subliman, queda un manto de polvo altamente poroso que no colapsa. Es evidente que este tipo de modelos tiene un problema, ya que no consideran producción de polvo desde el núcleo cometario, y sin embargo el polvo se observa en la coma. Para solventar esto, a pesar de que no es coherente con las hipótesis que utilizan para hacer los cálculos, en ocasiones hacen estimaciones de la producción de polvo a partir de la de gas.

En la línea de la aproximación que acabamos de mencionar está también la de Kossacki y Szutowicz (2008). En dicho trabajo, aunque no se considera que quede intacto, el polvo también se queda en la superficie y va formando un manto.

El manto, en esta ocasión, es compacto y sólo puede ser eliminado en un evento explosivo debido al aumento de presión en el medio helado que hay debajo. En este modelo se consideran dos fases, una que representa el manto de polvo y otra el medio helado, cada una de ellas con sus características y ciertas simplificaciones en el tratamiento termofísico. De este modo, en el manto únicamente se consideran conducción del calor y flujo de vapor mientras en la zona helada asumen que la presión de vapor de agua es la de saturación. En este trabajo se supone que la sublimación ocurre justo debajo del manto de polvo y sus consecuencias son aumentar el espesor del manto y hacer que receda la superficie.

Un tratamiento realmente riguroso del polvo requiere modelizar correctamente el proceso de arrastre del polvo por el flujo de gases. Tendremos que cuantificar tanto el que finalmente sale arrastrado hacia la coma como el movimiento del polvo en el interior del cometa. Para modelizar esto es imprescindible en primer lugar definir una distribución de tamaños para el polvo y, en general, asumir que el comportamiento de los granos de material refractario se pueden aproximar por el de granos esféricos. También necesitaremos parametrizar la cantidad de polvo que puede arrastrar el gas y para cada flujo, el tamaño máximo de partículas que pueden ser arrastradas (tanto hacia el exterior como hacia el interior). También habrá que tener cuidado con el diámetro de los poros, ya que si es más pequeño que el de los granos de polvo, aunque el gas lleve fuerza suficiente las partículas no podrán atravesarlos, pudiendo además atrancar el poro. De este modo, además de tener muchos otros parámetros que no se conocen claramente, tendremos varias ecuaciones nuevas de conservación de la masa que resolver, una para cada tamaño de granos de polvo que consideremos, lo que ralentiza enormemente la resolución numérica de las ecuaciones.

La solución por la que hemos optado es un término medio entre un tratamiento riguroso y las aproximaciones simplistas que hemos visto al principio de esta sección. Este tipo de aproximación nos permitirá estimar la producción de polvo en la coma sin elevar el coste computacional demasiado. Esencialmente, trataremos el polvo que está en la superficie de modo riguroso, pero para el interior utilizaremos una suposición similar la de Choi et al. (2002) que hemos visto para el flujo de gases, aunque moderada.

Para calcular el polvo que será expulsado del núcleo del cometa, en primer lugar, asumiremos una distribución discreta de tamaños para el polvo y luego calcularemos el tamaño máximo de las partículas que pueden ser arrancadas del núcleo,  $r_{crit}$ . Para ello se calculan la fuerza de la gravedad que actúa sobre la partícula (que será la de la gravedad cometaria menos un factor de corrección debido a la fuerza centrífuga provocada por la rotación) y la fuerza de arrastre del flujo de gas. A partir de ellas obtendremos la aceleración de la partícula de polvo  $\hat{a}$ , que vendrá dada por la siguiente expresión (Huebner et al., 2006):

$$\hat{a} = \frac{1}{2} C_D \frac{\hat{\sigma}}{\hat{m}} \rho_g (v_g - \hat{v}) |v_g - \hat{v}| - \left( \frac{MG}{R^2} - \omega^2 R \cos^2(\theta) \right) \quad (2.23)$$

donde  $\hat{\sigma}$ ,  $\hat{m}$  y  $\hat{v}$  son, respectivamente la sección eficaz, la masa y la velocidad de la



partícula de polvo,  $v_g$  es la velocidad del gas,  $C_D$  es el coeficiente de arrastre del polvo por el flujo de gases,  $M$  es la masa del cometa,  $R$  su radio,  $G$  la constante gravitacional,  $\omega$  la velocidad angular de rotación y  $\theta$  la latitud cometaria a la que se encuentra la partícula. Así, el primer sumando del lado derecho de la igualdad 2.23 representa la aceleración provocada en la partícula por el flujo de gases y el segundo la provocada por la gravedad cometaria, corregida como hemos dicho por la rotación.

Así, las partículas que no serán arrancadas de la superficie del núcleo tendrán  $\hat{a} = 0$  y  $\hat{v} = 0$ . Suponiendo además, que las partículas son esféricas y hechas de polvo compacto obtendremos la siguiente expresión para el radio crítico:

$$r_{\text{crit}} = \frac{3C_D}{8} \frac{\rho_g v_g^2}{\left(\frac{MG}{R^2} - \omega^2 R \cos^2(\theta)\right)} \quad (2.24)$$

Esta ecuación nos da el radio máximo de las partículas que pueden ser arrastradas de la superficie del núcleo por una cierta cantidad de gas (en nuestro caso, cuando tengamos varias especies volátiles sumaremos las de ambos gases), pero no limita en algún modo la cantidad de polvo que puede ser arrastrada del núcleo. En última instancia los granos de polvo serán arrastrados al ser golpeados por las moléculas de gas, pero no está clara que la masa máxima de polvo que puede ser arrastrada por el gas sea menor o igual que la masa de gas. De hecho, como hemos visto en la introducción, producciones de polvo y gas calculadas a partir de datos observacionales y el hecho de que el único mecanismo de expulsión de polvo considerado en los modelos termofísicos sea arrastre por gas indican que el cociente entre producciones de gas y polvo,  $ef$ , suele ser mayor que la unidad. Dado que no conocemos las dependencias de  $ef$ , lo consideraremos una constante y de este modo, la producción total de polvo vendrá dada por:

$$Q^{\text{polv,tot}} = ef(Q^{\text{H}_2\text{O,tot}} + Q^{\text{CO,tot}}) \quad (2.25)$$

esta producción se repartirá entre las diferentes categorías  $r_i$  del polvo pesándolas según su distribución de tamaños inicial,  $\phi(r)$ , obteniendo:

$$Q^{\text{polv,i}} = Q^{\text{polv,tot}} \frac{\phi(r_i)}{\sum_{\{i|r_i < r_{\text{crit}}\}} \phi(r_i)} \quad (2.26)$$

Cada una de las producciones  $Q^{\text{polv,i}}$  se irá restando a la densidad del polvo de la categoría  $i$  ordenadamente desde la superficie hacia el interior. Al tratar el polvo de este modo, estamos utilizando la idea básica subyacente de que sale de modo eficiente del cometa (aunque más moderadamente que lo que hacían Choi et al. 2002 con el vapor). Dicha idea es adecuada en nuestro caso ya que no consideramos que el vapor esté necesariamente en saturación en las zonas heladas. Para evitar el posible problema de que las partículas más pequeñas terminen originándose por debajo de los frentes de sublimación, y por lo tanto en zonas donde no hay un flujo neto hacia el exterior, limitamos la profundidad a la que podemos sacar las partículas con la del máximo en la densidad de vapor.

Respecto a la influencia de la producción de polvo en la erosión (como reiteraremos en la sección siguiente), al igual que haremos con los materiales volátiles, únicamente la parte procedente de la superficie será contada en la recesión de la superficie. La producción interna de polvo afectará únicamente a la porosidad de la matriz.

### 2.2.9. Erosión y geometría

La erosión del núcleo es una consecuencia del proceso de sublimación del material volátil. Está íntimamente relacionada con la geometría del núcleo y además es responsable de cambiar las condiciones de iluminación y, por lo tanto, la cantidad energía que sustenta la sublimación. Lamentablemente, el efecto de la erosión es difícil de simular rigurosamente, y aún más de manera eficiente ya que se debe calcular qué parte del material expulsado del núcleo afectará a la porosidad interior y cual hará que la superficie receda. Además tratarla de forma rigurosa en el tiempo implicaría eliminar el material erosionado apropiadamente en cada elemento de volumen y modificar en consecuencia la geometría completa del núcleo en cada paso temporal. Aparece además el problema de cómo va a afectar la recesión de la superficie a aspectos como la variación en la pendiente en cada zona.

#### 2.2.9.1. Parametrización de la erosión

Cuantificar la recesión de la superficie debida a la sublimación del material del núcleo es compleja, y los modelos para núcleos cometarios han propuesto varias formas de parametrizar el problema. Los modelos que la tratan de la manera más simple no la consideran en absoluto, asumiendo que el polvo no es arrastrado, de modo que solamente el hielo recede dejando atrás un manto de polvo muy poroso (denominado en ocasiones “castillo de hadas”, por esta característica) que no colapsa, como hacen en el modelo tridimensional de Prialnik y Rosenberg (2009). Kossacki y Szutowicz (2008), en su trabajo acerca de la sublimación bajo mantos de polvo en modelos cometarios utilizan una aproximación similar. En él asumen que la sublimación de todo el hielo de una capa de anchura  $\Delta$  se traduce en la formación de una capa de polvo de ancho  $\Delta_d$  (que tendrá también una porosidad característica fijada por ellos) y una recesión de la superficie  $\Delta - \Delta_d$ . Finalmente, haciendo uso de ciertas asunciones geométricas (que impondrán ciertas restricciones sobre los valores de la porosidad y  $\Delta_d$ ), suponen que  $\Delta_d = 0,5\Delta$  para realizar sus simulaciones.

Tancredi et al. (1994) hace uso de la suposición inversa, ya que cuenta únicamente la que sería recesión de los componentes volátiles como de todo el núcleo, asumiendo implícitamente que el polvo se va también, manteniendo la fracción de polvo del cometa constante a lo largo del tiempo. Su expresión para la recesión del radio vendrá entonces dada por:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = - \sum_{\rho_{\text{sup}}^{\text{ice},\alpha} \neq 0} \frac{Q_{\text{sup}}^{\alpha}}{\rho_{\text{sup}}^{\text{ice},\alpha}} \quad \text{m} \quad (2.27)$$

Otros trabajos, como por ejemplo los que se presentan en Huebner et al. (2006), tienen una parametrización similar de la erosión a la que acabamos de mencionar, aunque consideran sólo agua. Además, al pesar la producción sustraen a la densidad helada la de vapor en la superficie de modo que contribuya a la recesión superficial.

Nosotros consideraremos que a la erosión contribuye únicamente la producción que proviene de la superficie del cometa, tanto de los materiales volátiles como del polvo. La producción procedente de zonas interiores del núcleo contribuirá únicamente a la variación de la porosidad en el interior de la matriz del sistema. Además, a la hora de parametrizar la recesión superficial, utilizaremos como peso también el conjunto del material total, de modo que sea un proceso conjunto que englobe simultáneamente a todos los componentes de la matriz sólida. De este modo, la variación en el radio del cometa debido a la expulsión de material sólido de su superficie vendrá dada por:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = - \frac{\sum_{\alpha} Q_{\text{sup}}^{\alpha}}{\rho} \quad \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (2.28)$$

donde  $R$  es el radio del cometa,  $\rho$  su densidad de volumen y  $Q_{\text{sup}}^{\alpha}$  es la producción superficial del material  $\alpha$ , esto es la cantidad de material que pasa de la superficie a la coma, ya sea por sublimación (en cuyo caso  $\alpha$  sería  $\text{H}_2\text{O}$  o  $\text{CO}$ ), o arrastre (en el caso del polvo). Es importante que notemos que en el caso en el que supongamos el núcleo compuesto únicamente por hielo de agua la densidad de volumen será igual a la del hielo de agua y por lo tanto la expresión 2.27 coincide con 2.28.

### 2.2.9.2. El problema geométrico

Las imágenes que tenemos de núcleos cometarios y que hemos visto en el capítulo anterior nos revelan que su forma es irregular. Uno de los primeros modelos en los que se considera esto es el de Gutiérrez (2001), en los que se exploran las diferencias en las producciones de cuerpos esféricos y de cuerpos irregulares, representados como formas gaussianas aleatorias<sup>1</sup>. En dicho trabajo, se fijaba una geometría inicial y se calculaba para ella el horizonte de cada celda. En esencia, el horizonte es el que vería un observador situado en dicha celda, de modo que si el Sol está posicionado por encima del horizonte local en el sistema de referencia de la celda, ésta estará iluminada. El problema es que esto requiere gran cantidad de cálculos adicionales que pueden hacer el código final demasiado lento, y por tanto computacionalmente inviable, aún en el caso de que no se haga con

<sup>1</sup>Una forma gaussiana aleatoria es una esfera que se somete a una transformación aleatoria de radios, de modo que se consigue un objeto irregular, con accidentes como montes o valles, pero lo suficientemente suave como para utilizarla en modelos numéricos

demasiada precisión. Es por ello que se calcula una única vez para la geometría inicial sin considerar el efecto de la erosión en la geometría e iluminación. Si en un sistema unidimensional como el nuestro queremos implementar la erosión en cada paso, debemos tener cuidado al tratar la evolución geométrica ya que aunque cada elemento de superficie sufre una erosión diferente, debemos garantizar, por consistencia, que la superficie mantenga una regularidad suficiente. Con regularidad nos referimos a que, al dividir la superficie, los bordes de los diferentes elementos de superficie coincidan, de modo que no se creen nuevas superficies laterales (escalones) que hagan que tengamos más superficies que las que se tratan con un modelo unidimensional, generando inconsistencias. De este modo, con la erosión la pendiente de las celdas superficiales cambiaría y para poder representar un accidente escarpado deberemos muestrearlo adecuadamente. El problema principal de esta aproximación es que los modelos unidimensionales suelen situar los nodos en perpendicular a la superficie, de modo que un cambio en pendiente cambiaría la localización de los nodos interiores. La aproximación inversa al problema de la evolución geométrica sí permitiría el escalonamiento de la superficie y no que haya cambios de pendiente de la superficie, siendo los últimos representados por la altura de dichos escalones. La ventaja de este método es que la normal a cada elemento superficial no cambiaría nunca y los nodos internos no modificarían su posición. En definitiva, se trata de diferentes representaciones a la hora de describir de manera discreta un sistema geométrico complejo y su posible evolución.

La dificultad y la falta de precisión intrínsecas al tratamiento de la evolución geométrica de los núcleos cometarios hace que la mayoría de los modelos no traten las consecuencias geométricas de la erosión, en el caso de que la consideren. Esto puede ser aceptable como primera aproximación cuando la erosión es pequeña comparada con el radio, como suele ocurrir en el contexto cometario. No es una excepción el modelo de Lasue et al. (2008). Ese trabajo es similar al de Gutiérrez (2001) en el sentido de que utilizan también geometrías que se desvían de la esfericidad (en este caso armónicos esféricos a los que pueden añadir cráteres) con un tratamiento cuasi-3D. Estos autores calculan la recesión de la superficie en cada paso temporal, y cuantifican la erosión acumulándola y restándola al radio local inicial, pero tampoco tratan la evolución de la geometría.

En los últimos años, se han hecho algunos esfuerzos en el campo de la evolución de la forma. Uno de los primeros trabajos en este sentido es el de Cohen et al. (2003), que explora las diferencias en el efecto acumulativo de la erosión de un núcleo esférico para dos inclinaciones diferentes del eje de rotación. En él se trata la erosión utilizando un modelo unidimensional a lo largo de un meridiano de cometa, y está limitado a geometrías suaves (sin accidentes geológicos como montañas, valles o cráteres). Este trabajo, aunque sencillo, pone de manifiesto la influencia de la inclinación del eje de rotación en los núcleos cometarios, al mostrar las diferencias en la forma final de núcleos con ejes a diferentes inclinaciones. Respecto a los accidentes topográficos, los trabajos de Colwell y Jakosky (1987) y Colwell et al. (1990) fueron también pioneros. En el primero de ellos, se simulaba la evolución de una zanja ideal en hielo puro sometida a condiciones de iluminación similares

a las cometarias, obteniendo que las zanjas tienden a aumentar en profundidad debido a la iluminación mutua. El segundo trabajo mejoraba el modelo, tratando la evolución de cráteres y zanjas de modo más completo. Con él, obtuvieron que, en general, los cráteres y zanjas tendían a producir mayor cantidad de gas lejos del Sol (la topografía tendía a enfocar la radiación solar en el fondo, aumentando la producción allí) y que éstos podían elongarse o cambiar de forma. Es importante notar que estos trabajos utilizan únicamente una pequeña parte de la superficie y composición simplificada, ya que de otro modo resultarían inviables.

Merece la pena mencionar en esta sección el único modelo totalmente tridimensional y cómo tratan en él las consecuencias de la erosión. Si bien en el trabajo Prialnik y Rosenberg (2009) se formaba un manto de polvo que prevenía la erosión en el de Rosenberg y Prialnik (2010) sí se considera recesión de la superficie. El modelo es tridimensional, que tiene en cuenta la conducción lateral del calor tanto en latitud como en longitud. El problema es que, al estar planteadas las ecuaciones en coordenadas esféricas, su modelo sólo es aplicable a este tipo de geometrías. Así, su aproximación al problema de la erosión es que ellos calculan la recesión de la superficie y luego rellenan el elemento de volumen que debería quedar vacío con un material ficticio que es un conductor perfecto. El problema de esta idea (muy original por otro lado) es que debido a la conducción lateral los escalones que se forman en la superficie se convierten también en productores con las condiciones de la celda contigua. Además, ésta (al igual que el resto de las celdas) recibe la radiación Solar como si la geometría fuese una esfera perfecta y sin sombras, de modo que las consecuencias de la geometría o de la erosión en la iluminación no son consideradas. Efectivamente, cuando en sus simulaciones consideran erosión significativa (cambiando la distribución de polvo) y la geometría varía, la producción se vuelve excesiva en un orden de magnitud frente a las observaciones.

Nosotros haremos lo mismo que Lasue et al. (2008) y Gutiérrez (2001) que es considerar rigurosamente una geometría inicial compleja y calcular la erosión sufrida en cada celda pero despreciar las consecuencias de la recesión superficial. Esto implica considerar que la recesión en el radio del baricentro de cada celda se aplica directamente, de modo que la nueva superficie estaría desplazada  $\partial R$  en paralelo hacia abajo. A medida que las celdas vayan erosionando de formas distintas entre sí, la superficie, que originalmente era poligonal pero regular (en el sentido de que los nodos que definían la superficie de celdas contiguas estaban superpuestos) se irá convirtiendo en una superficie escalonada. Esto es aceptable como primera aproximación, al ser pequeña la magnitud de la erosión frente a la del radio al estar limitadas en tiempo nuestras simulaciones.

### 2.2.10. Ecuación de la masa

Llegados a este punto, podemos pasar ya a la descripción de la ecuación de la masa, una de las que vamos a resolver en nuestro sistema. En esencia, lo que debemos resolver para cada componente es la ecuación de conservación de masa, que indica que la variación en la cantidad de un determinado material en cada

elemento de volumen y en cada instante (en todas las fases consideradas) debe ser igual a la divergencia del flujo de vapor, que mide la cantidad de vapor que sale y entra en nuestro elemento de volumen. En caso de que haya una fracción  $f_{atr} > 0$  de material atrapado en el hielo amorfo, que será liberado en la cristalización, este aporte se añadirá como fuente adicional. Así, la ecuación de la masa tendrá la forma general siguiente:

$$\frac{\partial \rho^{\text{ice},\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{\text{vap},\alpha}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_\alpha + f_{atr} \frac{\partial \rho^{\text{ice},\text{am}}}{\partial t} \quad (2.29)$$

El lado izquierdo de la ecuación expresa la variación en la cantidad de material  $\alpha$  a través de todas sus fases. En el lado derecho,  $J_\alpha$  representa el flujo de vapor (cuya divergencia nos dará el vapor que entra o sale de nuestro elemento de volumen) y el último término la cantidad de material atrapado en el hielo amorfo liberado durante la cristalización.

En el caso que nos ocupa debemos separar, para cada material, la ecuación general de la masa en sus diferentes fases, ya que no nos preocupa únicamente la cantidad global de un componente, sino también cuantificar la que hay en cada estado para conocer el medio y determinar el flujo. Así, desacoplaremos la ecuación de la masa 2.29 obteniendo:

$$\frac{\partial \rho^{\text{ice},\alpha}}{\partial t} = -q_\alpha \quad (2.30)$$

que expresa que la variación en la cantidad de hielo de material  $\alpha$  en cada elemento de volumen, será igual a la cantidad que haya sublimado o condensado, i.e. la producción  $q_\alpha$ , cuya expresión hemos definido (ec. 2.14). Respecto al vapor, sustituyendo la ecuación del hielo 2.30 en la de la masa 2.29 tendremos:

$$\frac{\partial \rho^{\text{vap},\alpha}}{\partial t} = q_\alpha - \nabla \cdot J_\alpha + f_{atr} \frac{\partial \rho^{\text{ice},\text{am}}}{\partial t} \quad (2.31)$$

donde tendremos en cuenta tanto la producción como el flujo de gas y la aportación de vapor liberado en la cristalización del hielo amorfo, de modo que las ecuaciones 2.30 y 2.31 sumadas darán la ecuación de conservación de la masa 2.29, como pretendíamos.

En el caso del agua, al tener en cuenta también el hielo amorfo, estas ecuaciones toman una forma ligeramente distinta, ya que el hielo de agua se descompone en amorfo y cristalino. En primer lugar, hay que añadir la ecuación que transforma el hielo amorfo a cristalino 2.3, que se separa de las otras. También hay que tener en cuenta que, como ya hemos mencionado, la cristalización ocurre a temperaturas más bajas que la sublimación del agua y por lo tanto el hielo que sublimará será cristalino. De este modo, la ecuación para el hielo de agua 2.30, pasa a ser la del hielo cristalino, y hay que añadirle el término fuente debido a la cristalización, obteniendo:

$$\frac{\partial \rho^{\text{ice},\text{cr}}}{\partial t} = (1 - f_{atr}) \frac{\partial \rho^{\text{ice},\text{am}}}{\partial t} - q_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2.32)$$

De modo similar, en la ecuación del vapor 2.31 ya no tiene sentido añadir el término de material volátil atrapado en el hielo amorfo, y por lo tanto, en el caso del agua tendremos:

$$\frac{\partial \rho^{\text{vap,H}_2\text{O}}}{\partial t} = q_{\text{H}_2\text{O}} - \nabla \cdot J_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2.33)$$

donde la notación es análoga a la del caso general de la masa.

### 2.2.11. Transporte de energía

En los modelos cometarios en general, la fuente de energía que inicia la evolución térmica, disparando el resto de procesos, es la energía recibida del Sol a medida que el núcleo se acerca al mismo. Por ello, es importante describir adecuadamente la forma en que esa energía se transporta hacia el interior del núcleo. El papel que juega en este proceso la conducción de estado sólido a través de la matriz helada es primordial. A la hora de tratar el transporte de energía por conducción de estado sólido, es muy importante definir primero ciertos conceptos.

En primer lugar, recordamos el concepto de inercia térmica, que será una magnitud clave en la evolución de nuestro sistema, aunque no aparecerá de forma explícita en nuestras ecuaciones. La inercia térmica de un material se puede definir como la resistencia de éste a variar su temperatura: cuanto mayor sea, más difícil será de calentar. Es por eso que es una función dependiente del calor específico, densidad y conductividad (y, a través de ellas también de la porosidad). En nuestro caso, consideraremos la inercia térmica de nuestra matriz sólida completa, que viene dada por la expresión 1.3, descrita en el capítulo anterior.

El calor específico de un material se define como la cantidad de calor que hay que suministrar a una unidad de masa para aumentar su temperatura un grado. Además, a volumen constante es la derivada de la energía interna del sistema respecto a la temperatura. Es una magnitud importante ya que forma parte de la inercia térmica (como se puede ver en la ecuación 1.3), apareciendo en la ecuación de la energía como parte de la energía interna del sistema. El calor específico del material conjunto vendrá dado por  $c = \sum_{\alpha} X_{\alpha} c^{\alpha}$ , donde  $X_{\alpha}$  y  $c^{\alpha}$  son, respectivamente, la fracción en masa y el calor específico del material  $\alpha$ , siendo  $\alpha$  sólido.

La conductividad de la matriz,  $K$ , es de gran importancia en el sistema, ya que controla el paso de energía a través de la matriz y por lo tanto tiene gran influencia a la hora de determinar si dicha energía será transportada a mayor profundidad o permanecerá en ese elemento de volumen, bien aumentando su temperatura, cristalizando el hielo amorfo o sublimando el hielo cristalino. En nuestro sistema, describiremos la conductividad de estado sólido del modo siguiente:

$$K = (1 - p)^{\frac{2}{3}} h \frac{K_{\text{am}} \rho^{\text{am}} + K_{\text{cr}} \rho^{\text{cr}} + K_{\text{CO}} \rho^{\text{CO,ice}} + K_{\text{polv}} \rho^{\text{polv}}}{\rho^{\text{am}} + \rho^{\text{cr}} + \rho^{\text{CO,ice}} + \rho^{\text{polv}}} \quad (2.34)$$

donde  $K_{\alpha}$  es la conductividad de cada uno de los materiales,  $h$  representa el factor de Hertz y  $p$  la porosidad.

El factor  $(1 - p)^{\frac{2}{3}}$  representa una reducción en magnitud de la conductividad, pensada para tener en cuenta los espacios vacíos debidos a la porosidad del material. Esta y otras aproximaciones al efecto de la porosidad en la conductividad se pueden consultar en el trabajo de Prialnik et al. (2004), donde se discuten con cierta amplitud. En muchos modelos, éste último factor no se considera, y se utiliza un factor de Hertz en el que está incluido de manera implícita. En nuestro caso más general utilizaremos ambos, de modo que variaciones de la porosidad automáticamente se reflejen en la conductividad

El factor de Hertz, que es un parámetro estructural para medios granulares, fue definido originalmente como el cociente entre el área de contacto de una esfera, bajo la atracción gravitatoria, con un plano horizontal rígido y la sección transversal de esta esfera. Evidentemente, en un sistema como el nuestro, poroso, de gravedad baja y en el que ni siquiera consideramos que la microgeometría de la matriz sólida esté necesariamente compuesta de esferas, este parámetro pierde su sentido original. En este caso representa simplemente una reducción de la conductividad del material por la superficie en contacto del sistema internamente (indeterminada, en este caso). Conocidas las conductividades de los materiales compactos y siendo la porosidad una magnitud resultado de la propia evolución del sistema, el parámetro de Hertz nos ofrece la posibilidad de ajustar la conductividad térmica efectiva que caracteriza los núcleos cometarios. Además, variarlo nos permitirá comparar la evolución de sistemas con conductividades de diferentes magnitudes y así comprobar cuáles son más compatibles con las observaciones.

Nuestro sistema también considerará que el flujo de gases transporta una cierta cantidad de calor de un lugar a otro del núcleo, que para cada material volátil  $\alpha$  vendrá dado por la expresión:

$$H_{\text{vap},\alpha} = c^{\text{vap},\alpha} J_{\alpha} \cdot \nabla T \quad (2.35)$$

donde  $c^{\text{vap},\alpha}$  representa el calor específico del vapor de material  $\alpha$  y  $J_{\alpha}$  es el flujo de vapor de  $\alpha$ . Esta expresión es consecuencia del hecho de que el calor específico se puede considerar la derivada frente a la temperatura de la energía interna de material  $\alpha$ , de modo que el segundo miembro de 2.35 se puede considerar el producto de la derivada espacial de la energía interna por el flujo de gases.

Un efecto que no está incluido en nuestro modelo es el transporte radiativo a través de los poros de la matriz. Es el calor debido a la radiación térmica de las paredes de los poros, que es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura. Autores como, por ejemplo, Enzian et al. (1997) lo incluyen en la conductividad, al añadirle el sumando  $2 * d_0 * \epsilon \sigma T^3$ , que es la derivada de la expresión de la radiación del cuerpo negro, multiplicada por el radio del poro. En las zonas donde hay hielo de agua, la temperatura no suele superar los 200 K y la contribución de este factor es pequeña. Sin embargo, en zonas como mantos de polvo se pueden alcanzar temperaturas de 400 K y podría no ser así. Sustituyendo en el factor de radiación  $T=400$  K, su magnitud es aproximadamente 7 veces el diámetro del poro. Como modelizamos sistemas en los que los poros tienen diámetro promedio



muy pequeño (del orden de  $10^{-4}$  m), la contribución de este término también es pequeña comparada con la conductividad de estado sólido de nuestra matriz (que, aunque pequeña suele ser al menos un orden de magnitud mayor).

### 2.2.12. Ecuación de la energía

La ecuación de la energía es la que nos permitirá estimar la temperatura en nuestro dominio espacial y es clave en nuestro sistema, al ser los procesos de sublimación de hielos significativos únicamente a partir de ciertas temperaturas (como se discutió anteriormente y se puede ver en la gráfica 2.1). A continuación, describiremos la ecuación de conservación de la energía, que es la que acopla de manera efectiva los distintos materiales de nuestro sistema.

$$\sum_{\alpha} \rho^{\alpha} c^{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla T) - H_{\text{crist}} \frac{\partial \rho^{\text{am}}}{\partial t} + \sum_{\alpha} H_{\alpha} \frac{\partial \rho^{\text{ice},\alpha}}{\partial t} - \sum_{\alpha} c^{\text{vap},\alpha} J_{\alpha} \cdot \nabla T \quad (2.36)$$

donde  $T$  es la temperatura, que será la incógnita a resolver. Respecto a los demás símbolos,  $\rho^{\alpha}$  representa la densidad del material  $\alpha$ ,  $c^{\alpha}$  su calor específico,  $K$  la conductividad,  $H_{\text{crist}}$  el calor (neto) liberado en la cristalización,  $J_{\alpha}$  el flujo gaseoso del compuesto volátil  $\alpha$  y  $H_{\alpha}$  el calor latente de sublimación del material  $\alpha$  (esto es, el que será consumido para sublimar el hielo y liberado en el caso de que éste condense).

De este modo, el lado izquierdo de la ecuación representa la variación en la energía interna del sistema  $u$ , ya que para cada material  $\alpha$  y suponiendo que el proceso es a volumen constante (como podemos hacer en nuestro caso, al menos en el interior), tendremos que  $\frac{\partial u^{\alpha}}{\partial T} = c^{\alpha}$ . En el lado derecho de la ecuación 2.36 el primer término representa el calor conducido fuera o dentro de nuestro elemento de volumen por conducción de estado sólido, el segundo la energía liberada en la cristalización, el tercero la energía consumida por la sublimación de los diferentes materiales volátiles (o liberada en caso de que lo que se produzca es condensación) y el último el calor transportado por el flujo de gas.

El calor latente de sublimación es la energía que se debe suministrar al hielo para que se produzca la sublimación y que es liberada cuando el vapor condensa. En nuestro sistema es un parámetro de relativa importancia, ya que regula la magnitud del sumidero (respectivamente fuente) de energía que es la sublimación (respectivamente recondensación) de elementos volátiles en nuestra ecuación de la energía 2.36. Será también de gran importancia la energía neta liberada en la cristalización del hielo amorfo, que es un parámetro sobre el que no hay apenas acuerdo en la comunidad científica. Los valores que vamos a asumir para estos y otros parámetros serán discutidos con mayor detalle posteriormente, en la sección 2.4, dedicada a los parámetros.

### 2.2.13. Condiciones de contorno

Las ecuaciones en derivadas parciales no quedan perfectamente determinadas para resolver hasta que no añadimos las condiciones de contorno e iniciales, que nos permiten elegir una de las infinitas funciones que, sin ellas, serían solución. Además, dichas condiciones son clave a la hora de concretar la definición final de nuestro modelo según el sistema real al que pretendamos aplicarlo. Así, para que nuestro modelo represente un núcleo cometario, debemos suministrarle las condiciones de frontera adecuadas. Como su propio nombre indica, estas condiciones nos indican el valor de nuestras incógnitas (o de alguna transformación de ellas) a lo largo de las fronteras de nuestro dominio espacial.

Comenzaremos por describir las condiciones de contorno en la superficie. La ecuación que describirá la conservación de la energía en nuestra superficie cometaria será:

$$\frac{C_{\text{sol}}(1 - A)\cos(\theta_i)}{r_h^2} = \epsilon\sigma T^4 + K\nabla T + \sum_{\alpha} H_{\alpha}Q_{\alpha,\text{sup}} \quad (2.37)$$

donde  $C_{\text{sol}}$  representa la constante solar <sup>2</sup>,  $\theta_i$  el ángulo cenital del elemento de superficie  $i$  (el ángulo que forma la normal al elemento con la dirección de la luz solar),  $A$  el albedo,  $r_h$  la distancia al Sol,  $\epsilon$  la emisividad,  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann, y el resto de parámetros ya han sido introducidos anteriormente (y se pueden consultar en la tabla 2.1). Así, el lado izquierdo de la ecuación representa el flujo energético procedente del Sol incidente en la superficie del cometa. El segundo miembro incluye el calor rerradiado al exterior, el transportado hacia el interior por conducción de estado sólido y el invertido en la sublimación superficial, respectivamente.

Respecto a la masa, es suficiente dar la condición de contorno para el vapor, ya que sustituyéndola en la ecuación general de la masa 2.29, incluyendo la producción superficial e integrando en profundidad en el elemento de volumen superficial, obtendremos a partir de ella la del hielo de cada componente volátil. Esta condición es controvertida y hay varias posibilidades para ella. El trabajo de Sanctis et al. (2003) supone que la densidad de vapor es igual a la de saturación cuando hay hielo, principalmente por cuestiones de estabilidad del sistema, pero esta aproximación no es adecuada porque siempre nos daría una producción proporcional a la de saturación para la temperatura superficial. Cuando se ha formado un manto de polvo, la condición de contorno que utilizan estos autores para la masa de material volátil en la superficie es que la densidad de vapor es nula, lo cual tampoco nos parece realista. Nuestra visión es que la superficie del cometa siempre es atravesada por un flujo procedente del interior, por pequeño que sea (siempre que haya vapor del material  $\alpha$  en el interior, obviamente). Es por ello que utilizaremos la aproximación utilizada por Tancredi et al. (1994), que es la consistente con nuestra concepción del flujo procedente del interior:

---

<sup>2</sup>La constante solar es la cantidad de energía procedente del Sol en forma de radiación solar por unidad de tiempo y superficie a una unidad astronómica

$$Q_{\alpha}^{\text{vap}} = \sqrt{\frac{R_g T}{2\pi\mu_{\alpha}}} \rho_{\text{sup}}^{\text{vap},\alpha} = J_{\alpha,\text{sup}} \quad \frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}} \quad (2.38)$$

Respecto a la frontera interior, nuestras condiciones de contorno de energía y masa de cada componente serán que el gradiente de temperatura y de vapor se anulan. Es por ello que para ser coherentes debemos resolver hasta una profundidad mínima. De este modo captaremos toda la zona del cometa en la que los procesos que nos interesan tienen lugar y por ello se verificará que el gradiente de temperatura y el flujo de vapor se anulan. Para garantizar esto, introduciremos el concepto de profundidad de onda térmica,  $\delta$ . La profundidad de onda térmica se define como la profundidad a la que la amplitud de una variación sinusoidal de la temperatura que se propaga hacia el interior ha decrecido un factor  $e$ , y en general viene dada por la expresión (e.g. Huebner et al. 2006):

$$\delta = \sqrt{\frac{KP}{2\pi\rho c}} \quad \text{m} \quad (2.39)$$

donde  $P$  es el período de la variación, y  $K$ ,  $\rho$  y  $c$  son la conductividad, densidad y capacidad calorífica del material en cuestión. En un gran número de casos, los puntos de la superficie del núcleo estarán sometidos a una variación periódica del flujo de luz incidente, como consecuencia de la rotación y del movimiento orbital. Teniendo esto en cuenta, se puede considerar que la longitud de onda térmica nos proporciona una medida aproximada de la profundidad que alcanzará la energía recibida por la superficie. Si en un  $\delta$  de profundidad, la perturbación ha decrecido un factor  $e$  es razonable considerar que a una profundidad varias veces  $\delta$  la perturbación estará prácticamente amortiguada. Como ejemplo, consideraremos un núcleo compuesto únicamente por hielo cristalino de agua con una densidad media de  $500 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $P$  un período orbital de 2000 días, calor específico de  $1610 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  y la conductividad del hielo cristalino a 140 K reducida por un factor de Hertz de 0.01,  $\delta$  tomará un valor aproximado de 1.3 metros. Estos valores, que representarían las características físicas del cometa Wirtanen, son los utilizados por Huebner et al. (2006). Es importante notar, que si en lugar de hielo cristalino considerásemos hielo amorfo a la misma temperatura la profundidad térmica sería  $\delta = 0,2 \text{ m}$ , más de un factor 6 menor. Así, al resolver sistemas hasta una profundidad mayor que varias veces la profundidad de onda térmica, todavía estamos considerando valores de  $z_f$  lo suficientemente pequeños frente al radio, que suele ser del orden de los kilómetros.

### 2.3. Cálculo numérico

Una parte importante del modelizado es también resolver las ecuaciones que representan el sistema planteado de la manera más apropiada posible. Aquí es donde nos enfrentamos a las dificultades computacionales que conlleva la resolución numérica de sistemas de ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Es por

ello que nos vemos obligados a imponer nuevas restricciones, necesarias para la resolución efectiva de nuestro modelo.

### 2.3.1. Trataremos un sistema unidimensional y planoparalelo

Para comenzar la resolución de las ecuaciones, en primer lugar dividiremos la superficie del cuerpo en celdas de tamaño angular fijado y en cada una de ellas resolveremos las ecuaciones planteadas en una dimension, la profundidad  $z$ . De este modo, lo que haremos es aproximar un volumen no homogéneo y de geometría compleja por una serie de sistemas unidimensionales independientes. Este planteamiento se conoce como cuasi-3D, ya que, a pesar de la unidimensionalidad de cada uno de los sistemas, sí que muestreamos en todo momento las latitudes y longitudes de toda la superficie nuclear. Esto implica que no consideramos la conducción lateral de calor a través del núcleo cometario, lo que está justificado por la baja conductividad que se cree que tiene el material cometario (ver, por ejemplo la revisión hecha por Prialnik et al. 2004). Esta baja conductividad implica que, supuesto un núcleo esférico, el tiempo característico de conducción del calor desde el polo al ecuador es del orden de la vida cometaria de modo que, como haremos simulaciones limitadas en el tiempo, puede ser despreciado. Por esta razón, la unidimensionalidad es una aproximación ampliamente usada por la comunidad dedicada al modelizado termofísico de núcleos cometarios. Recientemente Rosenberg y Prialnik (2010) han presentado modelos en los que sí consideran la conducción lateral del calor, aunque el precio a pagar por ello es que, por construcción, están limitados a la utilización de geometrías esféricas. Trabajos como el de Gutiérrez (2001) demuestran que el hecho de utilizar geometrías irregulares hace variar significativamente los resultados respecto a los obtenidos con esferas.

La unidimensionalidad del sistema asociado a cada celda implica que la única dimensión posible de transporte, tanto de masa como de energía, es la del propio sistema, que será en este caso la perpendicular a la superficie. Sin embargo, este argumento no sería válido al incluir en la ecuación de la energía fuentes de calor internas que no irían en la dirección normal a la superficie, y además también estamos descartando la posibilidad de flujo lateral de material. Esto puede justificarse en este caso debido a que nuestra aproximación es macroscópica. Estamos tratando una serie de celdas que dividen la geometría a tratar, definidas por un valor promedio en un punto central. Este valor representaría tanto a una celda homogénea como a una celda con variaciones internas que tenga la misma media. Teniendo esto en cuenta, y que el transporte tanto de masa como de energía a través de una frontera depende del gradiente, se puede considerar que estamos representando en promedio una celda con valores en la frontera que impliquen que no haya flujos o que estos sean despreciables, de modo que nuestro sistema unidimensional es consistente con uno tridimensional que puede funcionar como aproximación del real.

Respecto a utilizar aproximaciones plano-paralelas, equivale a ignorar que el volumen de los elementos va variando a medida que aumentamos la profundi-

dad. Sin embargo, si únicamente consideramos elementos hasta una profundidad determinada, dependiente de la curvatura que a su vez depende del radio, la aproximación plano-paralela todavía es adecuada. Para ilustrarlo, utilizaremos el caso de una esfera que tiene curvatura positiva e igual a la inversa del radio. Para una superficie cóncava, valdría el mismo razonamiento en un elemento de volumen colocado al revés. En el caso esférico, pues, la superficie de los elementos de área será  $S = \theta Rh$ , donde  $\theta$  es el ángulo en radianes,  $R$  el radio de la esfera y  $h$  la longitud del segmento de radio que ocupa el sector asociado al elemento. Así, es evidente que este área decrecerá al reducir el radio. El volumen del elemento entre los radios  $R$  y  $R_2$ , esto es con profundidad  $z = R - R_2 > 0$  vendrá dado por:

$$V_{\text{esf}} = \theta h \frac{R + R_2}{2} z \quad (2.40)$$

Al asumir la aproximación planoparalela estamos despreciando la diferencia entre  $R$  y  $R_2$  en el cálculo de las áreas, de modo que

$$V_{\text{pl}} = \theta h R z \quad (2.41)$$

y entonces el error en volumen en todo el dominio considerado será

$$e = V_{\text{pl}} - V_{\text{esf}} = \theta h \left( R - \frac{R + R_2}{2} \right) z = \theta h \frac{z^2}{2} \quad (2.42)$$

que será aceptable siempre que limitemos la profundidad  $z$  de modo que sea pequeña frente al radio, cosa que haremos en nuestro sistema. Como hemos dicho en la sección 2.2.13, resolveremos hasta una profundidad igual a varias veces la profundidad de onda térmica, del orden de los metros, que nos garantizará que llegamos hasta una profundidad suficiente como para mantener la coherencia con las condiciones de contorno. A su vez, la profundidad de resolución también es pequeña frente al radio del cometa, del orden de los kilómetros. El buen comportamiento de nuestro sistema se puede comprobar a posteriori con los perfiles simulados que se obtengan. Además, el resolver únicamente hasta una profundidad relativamente pequeña nos permite, unido a la unidimensionalidad que acabamos de comentar, utilizar geometrías irregulares que de otro modo serían computacionalmente muy costosas, recordando eso sí que estamos trabajando en aproximación de primer orden.

### 2.3.2. Funcionamiento global del modelo: Descripción del programa y diagrama de flujo

El modelo termofísico que presentamos se puede considerar, como ya hemos anticipado en la introducción, el módulo que permite un tratamiento realista de los procesos internos del núcleo dentro de un modelo completo que incluye el cálculo de la posición del cometa en su órbita así como el tratamiento de la rotación y de la iluminación (sombras incluidas). Así, nuestro modelo termofísico irá incluido como parte de uno global en el que se tratan todas esas cuestiones.

Una vez calculada la posición del cuerpo respecto al Sol (tanto en órbita como en rotación) y la iluminación recibida por cada zona del cometa, el sistema que debemos resolver para simular termofísicamente núcleos cometarios consta de la ecuación de la energía 2.36 y las de la masa 2.3, 2.30, 2.31, así como las condiciones de contorno, obteniendo el siguiente sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho^{\text{am}}}{\partial t} = -\lambda \rho^{\text{am}} \\ \frac{\partial \rho^{\text{ice,cr}}}{\partial t} = (1 - f_{\text{atr}}) \frac{\partial \rho^{\text{ice,am}}}{\partial t} - q_{\text{H}_2\text{O}} \\ \frac{\partial \rho^{\text{vap,H}_2\text{O}}}{\partial t} = q_{\text{H}_2\text{O}} - \nabla \cdot J_{\text{H}_2\text{O}} \\ \frac{\partial \rho^{\text{ice},\alpha}}{\partial t} = -q_\alpha \\ \frac{\partial \rho^{\text{vap},\alpha}}{\partial t} = q_\alpha - \nabla \cdot J_\alpha + f_{\text{atr}} \frac{\partial \rho^{\text{ice,am}}}{\partial t} \\ \sum_\alpha \rho^\alpha c^\alpha \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla T) - H_{\text{crist}} \frac{\partial \rho^{\text{am}}}{\partial t} - \sum_\alpha H_\alpha \frac{\partial \rho^{\text{ice},\alpha}}{\partial t} \\ \quad - \sum_\alpha c^{\text{vap},\alpha} J_\alpha \cdot \nabla T \end{array} \right. \quad (2.43)$$

La resolución se hará mediante un método de diferencias finitas, por lo tanto, sustituiremos el problema continuo original por un problema discreto aproximado cuya solución será un vector de valores que aproxime los valores de la función incógnita en nuestra malla. Concretamente utilizaremos el método de Crank-Nicolson, que tiene una convergencia de orden dos<sup>3</sup> con estabilidad numérica, en el sentido de que puede manejar problemas con escalas de tiempo muy distintas (problemas rígidos), como ocurre en este caso. El método de Crank-Nicolson es, en esencia, un promedio entre el explícito (que utiliza una aproximación progresiva en tiempo) y el implícito (que utiliza una aproximación regresiva). De este modo se plantean las ecuaciones aproximadas en el instante intermedio del paso temporal. Aproximaremos, pues las derivadas de nuestras ecuaciones del modo siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y}{\partial t} &= \frac{Y(x_j, t_{i+1}) - Y(x_j, t_i)}{dt_i} \\ \frac{\partial Y}{\partial x} &= \frac{Y(x_{j+1}, t_{i+1}) - Y(x_{j-1}, t_{i+1}) + Y(x_{j+1}, t_i) - Y(x_{j-1}, t_i)}{4dx} \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde  $Y=Y(x,t)$  es la función en tiempo y espacio cuyas derivadas pretendemos aproximar (en nuestro caso será  $Y=T$  ó  $Y=\rho^{\text{est},\alpha}$ ) La variable  $x$  es una variable espacial asociada a nuestra profundidad  $z$  que definiremos más adelante (ec. 2.45) y que nos permitirá utilizar estas aproximaciones (que están pensadas para mallas espaciales equiespaciadas) con una profundidad que siga una distribución exponencial. La variable temporal es la habitual. Los subíndices  $i$  y  $j$  representan los distintos nodos espaciales y temporales de nuestro mallado, y  $dt_i$  y  $dx$  son los pasos temporal y espacial, respectivamente, siendo  $t_{i+1} = t_i + dt_i$ ,  $i \geq 0$  y  $x_{j+1} = x_j + dx$ ,  $j \in 1 \dots N - 1$ . La primera ecuación de 2.44 representa una diferencia finita centrada de orden 2 en el instante  $t_{i+1/2}$  y la segunda es un promedio temporal de las diferencias centradas en espacio. La resolución simultánea

<sup>3</sup>Convergencia de orden  $n$  para un método de diferencias finitas significa que en una malla de tamaño  $h$ , la solución numérica obtenida se separa de la solución real menos que  $h^n$ . El exponente  $n$ , pues, regula la velocidad con la que nuestra solución numérica se acerca a la real al hacer el paso  $h$  tender a cero.

de todas las ecuaciones del sistema 2.43 hace necesario que utilicemos un método iterativo que irá convergiendo a las soluciones buscadas. Aprovecharemos las iteraciones para realizar una linealización de los términos no lineales, aproximándolos por el iterante anterior y resolviendo en cada iteración una serie de sistemas tri-diagonales.

La figura 2.2 contiene el diagrama de flujo con los pasos básicos que seguirá el programa con el que resolveremos las ecuaciones de nuestro modelo.

### 2.3.3. Mallado espacial y resolución temporal

En cuanto al mallado espacial, la zona más crítica a la hora de resolver las ecuaciones es la superficie, ya que recibe grandes cantidades de energía procedente del Sol a medida que se acerca al perihelio y es esta energía la que activa todos los procesos que vamos a considerar en el núcleo cometario. Es por eso que en la zona superficial se hace necesario un mallado más fino que en la más profunda. Para ello se hace necesario un cambio de variable ya que las aproximaciones que estamos utilizando son válidas para una malla regular, en la que los nodos sean equidistantes. Dicho cambio nos permitirá distribuir los nodos de la malla a distancias exponencialmente crecientes, y es el siguiente (ver Tancredi et al. 1994):

$$x = e^{-\beta(\frac{z}{R})} \quad (2.45)$$

donde  $z$  es la variable profundidad,  $R$  el radio total del cometa y  $\beta$  es un parámetro numérico que nos permitirá regular la pendiente de la exponencial y por tanto la proporción entre las distancias de los nodos, según el radio y los objetivos de nuestro estudio. De este modo, si nos movemos desde la superficie hasta una profundidad  $z_{max} < R$ , el intervalo  $x \in (e^{-\beta(\frac{z_{max}}{R})}, 1)$

Respecto a la resolución temporal, haremos un paso adaptativo, que nos permitirá muestrear adecuadamente los procesos en nuestro sistema, aún cuando algunos de ellos (la sublimación) tienen a altas temperaturas escalas de tiempo mucho más pequeñas que las del resto. Partiremos de un paso temporal  $dt$  inicial que irá variando según sea necesario: Cuando llevemos varios pasos con el mismo  $dt$ , probaremos uno mayor. A la inversa, cuando encontremos algún problema en la resolución de las ecuaciones de densidad y temperatura, (por ejemplo, cuando se viole alguna ley de conservación global o simplemente no converja el método iterativo) reduciremos el paso temporal. Esta regulación del paso “a posteriori” puede parecer poco efectiva, pero en casos como este es mejor que utilizar las escalas de tiempo descritas en la Fig. 2.1 como indicación del paso temporal que vamos a necesitar. Pasos temporales tomados de dichas escalas de tiempo nos garantizan que el método va a funcionar bien, pero en general son valores prohibitivamente pequeños desde un punto de vista computacional. La verificación de la conservación de la masa que se realiza tras cada paso temporal es garantía de que los resultados obtenidos con el paso temporal finalmente elegido son adecuados.

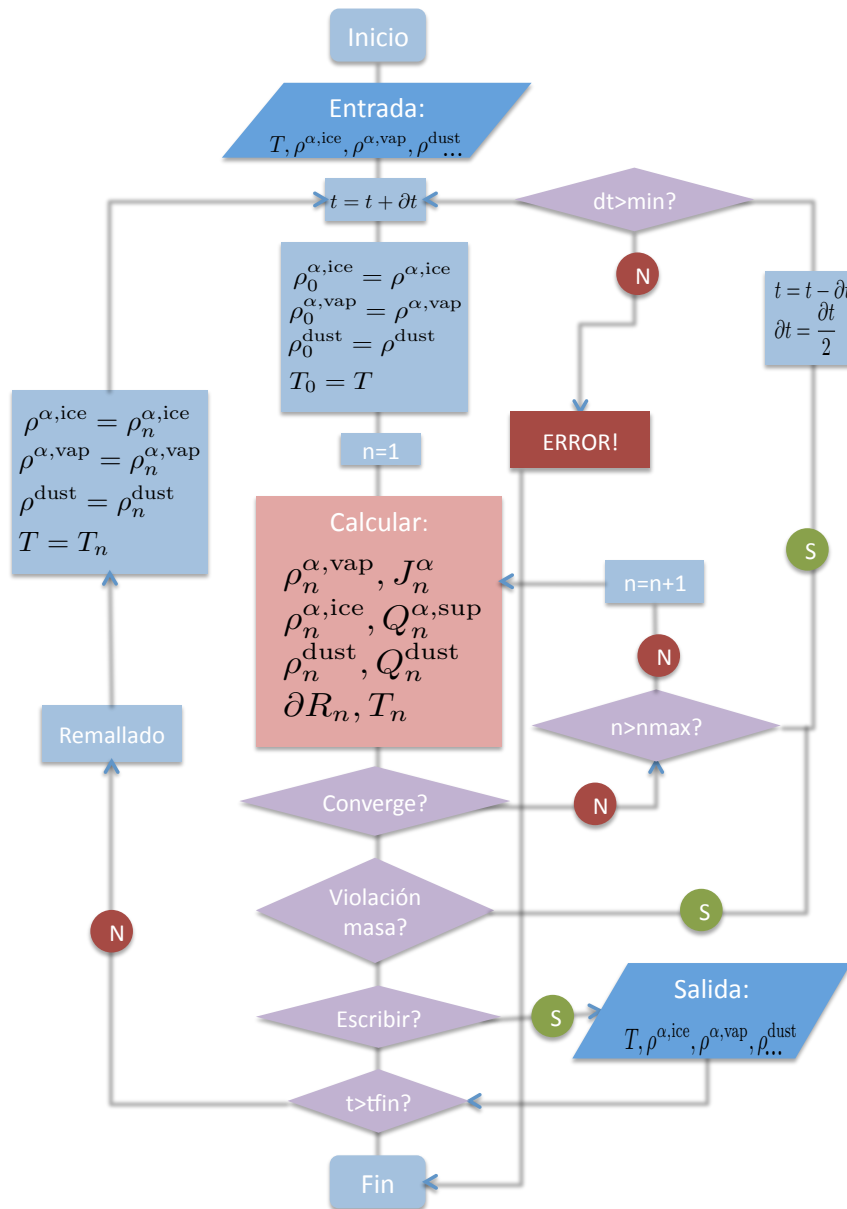


Figura 2.2: Diagrama de Flujo con los pasos básicos que sigue nuestro programa.



## 2.4. Parámetros

Una vez planteadas las ecuaciones y el modo en que vamos a resolverlas, debemos dar valores a ciertas magnitudes de modo que las parametrizaciones que hemos descrito se concreten y las únicas incógnitas en el sistema sean las densidades y la temperatura.

Entre los parámetros que se incluyen en el modelo distinguiremos cuatro grupos a los que llamamos: parámetros materiales, parámetros cometarios, condiciones iniciales y parámetros numéricos.

### 2.4.1. Parámetros materiales

Por parámetros materiales nos referimos a las características y propiedades de los materiales que forman nuestro sistema, como serían las constantes de las presiones de saturación, la capacidad calorífica, los calores latentes, densidades, conductividades de los distintos materiales que integran nuestro sistema, etc. En la bibliografía especializada se puede ver que muchos de esos parámetros están bien definidos y su magnitud es comúnmente asumida (e.g. las constantes de las presiones de saturación). Sin embargo, también se pueden encontrar parámetros que adoptan distintos valores según el modelo. Por ejemplo, para la conductividad del material refractario, los distintos modelos utilizan valores que van desde los  $6 \cdot 10^{-4} \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  (Tancredi et al., 1994) hasta los  $10 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ , típica de los silicatos (e.g. Huebner et al. 2006). Esa “dispersión” se puede justificar en el hecho de que el material refractario cometario es una mezcla de diversos materiales que no permiten, ante la falta de información, reducir la incertidumbre en esa magnitud.

En este momento entendemos que no tiene sentido realizar una descripción exhaustiva de todos los parámetros materiales sobre los que no existe consenso. Estos parámetros serán descritos, justificados y comparados con los utilizados por los distintos modelos usados para las mismas aplicaciones que las descritas en los capítulos siguientes.

Hay que decir que dentro de este grupo de parámetros materiales deberíamos incluir la energía liberada en la cristalización pero dada su importancia y que es una de las magnitudes clave sobre la que existe incertidumbre, lo consideramos dentro del grupo de parámetros cometarios.

### 2.4.2. Parámetros cometarios

Por parámetros cometarios entendemos aquellas características que definen la naturaleza cometaria. Estas magnitudes son las que se describieron ampliamente en la introducción e incluirían la razón polvo-hielo, el contenido de monóxido de carbono libre, el contenido de monóxido de carbono atrapado, la densidad del núcleo, su inercia térmica y, por nuestra elección, la energía liberada en la cristalización. Es necesario considerar aquí también la distribución de tamaños que caracteriza el polvo cometario.

A excepción de la energía liberada en la cristalización, de la que hablaremos a continuación, la incertidumbre asociada a estas características cometarias fue descrita en la introducción. En las aplicaciones del modelo presentadas posteriormente se describirán los intervalos de esas magnitudes que serán objeto de estudio. Nuestro objetivo, como se ha mencionado anteriormente, es ver si el modelo nos proporciona una interpretación de los hechos observacionales que nos permita restringir estos intervalos.

#### 2.4.2.1. Energía liberada en la cristalización

El atrapamiento de compuestos volátiles por el hielo amorfo tiene también consecuencias energéticas, ya que parte de la energía liberada en la cristalización podría ser invertida en la desorción de dichos volátiles. Sin embargo, cuantificar la energía invertida en la liberación de los elementos dopantes es complicado y actualmente no existe acuerdo experimental ni teórico a ese respecto. La mayoría de los modelos termofísicos (principalmente desarrollados para simular cometas o análogos cometarios) describen la energía neta liberada en la cristalización de manera similar (ver, e.g. Prialnik 1992), calculándola como la del hielo amorfo puro de agua menos la energía de desorción del dopante, pesada por la fracción de gas atrapado en la matriz.

Cuando la energía invertida en la liberación de los dopantes se calcula como  $u^{gas} - u^{am}$  (siendo  $u^{gas}$  y  $u^{am}$  las energías específicas internas del dopante y del hielo amorfo, respectivamente), su contribución es muy pequeña, quedando el proceso de cristalización altamente exotérmico, como se puede consultar en los trabajos de Prialnik (1992) o Tancredi et al. (1994). Para el caso de que el dopante sea monóxido de carbono, estos autores estiman la energía de desorción aproximadamente como  $6 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$  de gas atrapado. Esta aproximación equivale a considerar que el material atrapado en el hielo amorfo se comporta como un gas. Este valor implica una reducción muy pequeña de la energía neta liberada, ya que la fracción de gas atrapado en la matriz amorfa se considera muy pequeña (generalmente menor que un 10%). En casos como estos, la cristalización constituye una importante fuente interna de energía y, como se activa al aumentar la temperatura, evoluciona como un proceso en cadena. Por esta razón, como se ha mencionado en la introducción, la cristalización de hielo amorfo con impurezas ha sido propuesta como causa de las explosiones de actividad observadas en algunos cometas.

Sin embargo, hay experimentos de laboratorio que indican que la energía invertida en la desorción de dopantes volátiles atrapados en el hielo amorfo de agua podría ser mucho mayor que el valor que acabamos de mencionar. Sandford y Allamandola (1990) calcularon a partir de experimentos acerca de la eficiencia de adsorción de mezclas de gases depositadas la energía de enlace superficial del CO en hielo de agua como  $5.17 \times 10^5 \text{ J kg}^{-1}$ , y la volúmica como  $1.65 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1}$  ( $1.72 \times 10^6 \text{ J kg}^{-1}$  para el caso de muestras calentadas). Manca et al. (2001) y Allouche et al. (1998) basándose en resultados tanto experimentales como teóricos

estimaron la energía de desorción del CO de la superficie del hielo de agua como  $3.57 \times 10^5 \text{ J kg}^{-1}$ . Además Allouche et al. (1998), utilizando cálculos cuánticos, defienden que la energía del enlace en el volumen es cuatro veces la superficial. Con estos valores, para una cantidad suficiente de impurezas la contribución de la desorción del CO atrapado es del mismo orden que la energía liberada en la cristalización del hielo amorfo de agua. Para el valor dado por Sandford y Allamandola (1990) para la energía de enlace volúmica del CO en muestras no calentadas, la cristalización sería endotérmica para cantidades de CO mayores que un 5.1 % en masa (respecto a la cantidad de agua), lo cual es un porcentaje dentro de lo aceptado para cometas. Estos resultados están en la línea de los obtenidos por Kouchi y Sirono (2001) en experimentos de Análisis Térmico Diferencial (DTA) en muestras amorfas dopadas con varios volátiles. Estos autores encontraron que la cristalización era endotérmica cuando la cantidad de impurezas de CO era mayor que un 3 % en masa.

Hasta ahora pocos modelos cometarios consideran que la cristalización pueda ser endotérmica o siquiera energéticamente neutra. Entre ellos, está el de Sirono y Yamamoto (1999), que estiman la contribución energética de los dopantes como su calor latente de sublimación (que para el caso del CO sería  $2.93 \times 10^5 \text{ J kg}^{-1}$ ). El material volátil atrapado en el hielo amorfo se comportaría en este caso como hielo. También Enzian et al. (1997) usan la misma parametrización para la energía neta liberada, aunque en las simulaciones que presentan la cantidad de dopante no sobrepasa el umbral de la endotermicidad.

Entendemos que el comportamiento del hielo amorfo y, concretamente, su contribución energética es una magnitud que puede depender de las condiciones de formación del propio hielo amorfo. Estas condiciones, tanto por falta de información como por dificultades prácticas, son difíciles de simular. Sabemos que la capacidad del hielo amorfo de atrapar elementos volátiles en su estructura depende de su temperatura de formación (e.g. Notesco y Bar-Nun 2005) y que existen grandes dificultades para construir muestras macroscópicas de hielo amorfo impuro a muy bajas temperaturas, como las supuestas para la formación cometaria (Bar-Nun y Laufer 2003). Generalmente las muestras de hielo amorfo utilizadas en el laboratorio tienen un espesor del orden de las  $\mu\text{m}$ , siendo difícil generar muestras más grandes. Ello es porque, dada la baja conductividad del hielo amorfo, no puede eliminar eficientemente la energía de condensación que se libera cuando se deposita, dando lugar a su cristalización. Bar-Nun y Laufer (2003) obtuvieron muestras de varios centímetros de espesor raspando láminas de hielo amorfo con un espesor de  $\mu\text{m}$  y acumulando los granos de hielo obtenidos a temperaturas mayores que las supuestas para la formación cometaria. Para esas muestras macroscópicas no se evaluó la energía liberada en la cristalización.

Por todo lo descrito, entendemos que la energía liberada en la cristalización, que depende de la capacidad de atrapamiento del hielo amorfo y de su estructura y temperatura de formación es una magnitud que presenta gran incertidumbre. Nuestro objetivo será evaluar su posible impacto en la evolución termofísica cometaria y para ello, en las distintas aplicaciones, se considerará un parámetro

libre.

### 2.4.3. Condiciones Iniciales

En general, utilizaremos condiciones iniciales homogéneas, compatibles con lo que sabemos acerca de los núcleos cometarios. El motivo principal para ello es que, en última instancia, las observaciones de cometas nos proporcionan valores promedio que quedan perfectamente representados por este tipo de condiciones. Además, es interesante en sí mismo ver cómo evolucionan las condiciones homogéneas, ya que tal y como está planteado nuestro sistema, las condiciones de iluminación harán que el cometa evolucione de modo distinto según la región. Finalmente, hay que tener cuidado a la hora de incluir posibles inhomogeneidades, ya que podrían enmascarar el efecto de otras magnitudes.

Trabajos como el de Rosenberg y Prialnik (2010), que estudia el efecto de inhomogeneidades internas del material en modelos cometarios, indican que pueden tener gran influencia en la temperatura superficial, actividad y erosión del núcleo. Sin embargo, ante la falta de información sobre el interior cometario, esos trabajos tienen un interés puramente teórico. Si pretendemos describir o interpretar, en primer orden de aproximación, el comportamiento de cometas reales, como son las aplicaciones de los capítulos 4 y 5 de esta memoria, lo conveniente y apropiado, ante la falta de información, es comenzar por sistemas homogéneos. Nuestro objetivo es estudiar el efecto de magnitudes como por ejemplo la inercia térmica o la razón polvo-hielo. Una vez restringidas estas características, es cuando cabría estudiar otras, como la estructura y perfil en composición interno de los núcleos cometarios que son todavía completamente desconocidas. Debemos hacer hincapié en los parámetros que peor definidos están en el contexto cometario, ya que es a la hora de acotar éstos cuando aparece una de las utilidades primordiales de los modelos de núcleos cometarios. En general, para estudiar el efecto de la variación de magnitudes en las que hay incertidumbre, haremos simulaciones con varios valores dentro del rango aceptado por la comunidad para determinar cuáles de ellos son más compatibles con las observaciones.

Dentro de las condiciones iniciales está la temperatura inicial del núcleo. Según la discusión dada en la introducción, existen evidencias observacionales que sugieren que la temperatura de formación de los núcleos cometarios está entre 20 y 30 K. Esos valores son típicamente asumidos en el modelizado cometario. En nuestro caso también consideraremos esa hipótesis como válida pero además, en el capítulo siguiente, estudiaremos el efecto de que la temperatura inicial sea mayor.

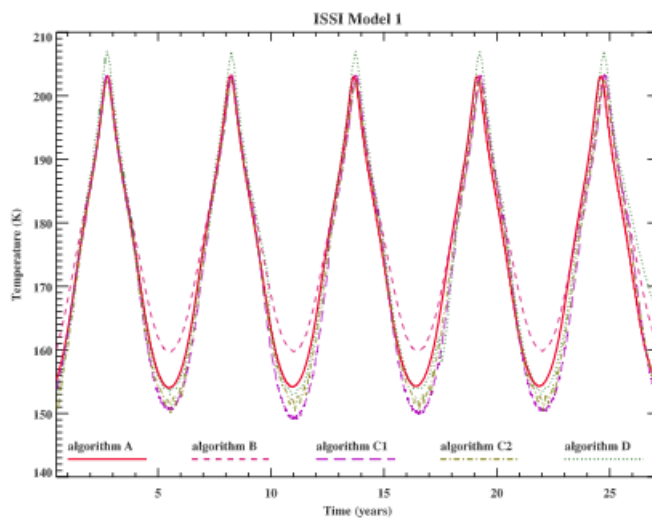
### 2.4.4. Parámetros numéricos

En los parámetros numéricos están incluidos las variables que controlan la discretización de la superficie y el interior del núcleo como son: el número de celdas superficiales, el número de nodos de integración de las ecuaciones, el parámetro  $\beta$  de la ecuación 2.45 (que nos permite aumentar el número de nodos cerca de

la superficie) y la profundidad de integración (i.e. localización de la frontera inferior). Dichos parámetros dependen de las condiciones de la aplicación concreta del modelo. Por ejemplo, típicamente las ecuaciones se resuelven hasta una distancia 10 veces la profundidad de onda térmica, para estar seguros de que la amplitud de onda térmica se ha amortiguado suficientemente y la condición de frontera interior está localizada a una profundidad adecuada. La profundidad de onda térmica,  $\delta$ , dada por la expresión 2.39, depende del período que se esté considerando. Esto hace que se deba adaptar a las circunstancias del cometa que se pretende simular. Los parámetros numéricos elegidos en cada ocasión serán descritos en las aplicaciones concretas presentadas en esta memoria.

## 2.5. Pruebas realizadas sobre el funcionamiento del modelo numérico

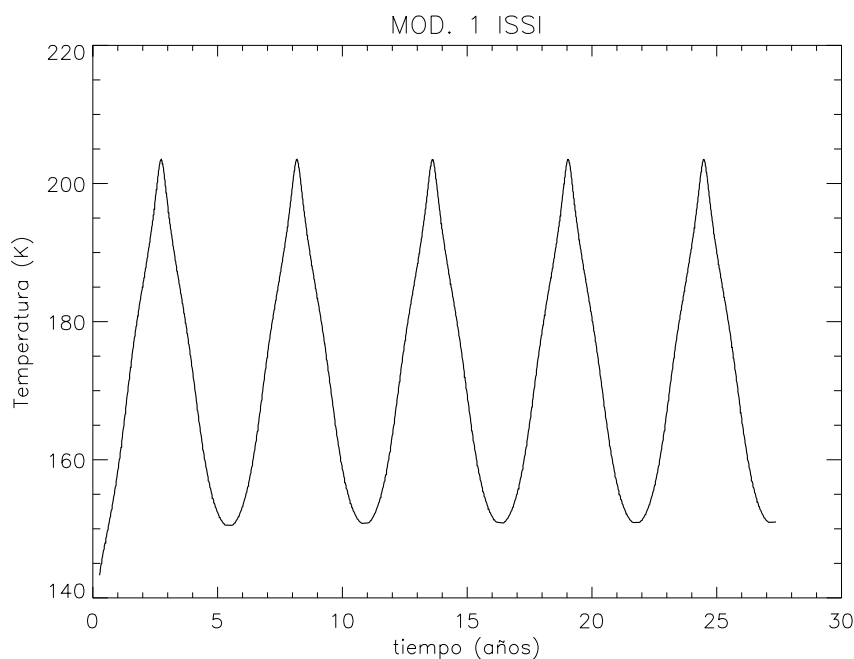
Como ya se ha comentado, la implementación del modelo cuenta con un algoritmo de paso adaptativo que define el paso temporal de acuerdo a, entre otras cosas, la verificación global de la conservación de la masa. Por tanto, el sistema no puede proporcionar una solución, aún matemáticamente aceptable, que suponga una violación física de esa ley de conservación. Esto supone una garantía con respecto al funcionamiento del código. Además, se han hecho comparaciones, en la medida de lo posible, con resultados de otros códigos.



**Figura 2.3:** Resultados de los distintos modelos comparados en el trabajo Huebner et al. (2006) para el caso de un núcleo compuesto de hielo cristalino en una órbita similar a la del cometa Wirtanen.

En Huebner et al. (2006) se recogen los resultados de un experimento poco frecuente. En 2002 se reunió un grupo de diferentes expertos en modelizado del

interior cometario que compararon el comportamiento y soluciones de sus distintos modelos, 5 en total, bajo diferentes circunstancias físicas, 7 en total (incluyendo núcleos constituidos por hielo cristalino puro, cristalino y monóxido de carbono y casos con cristalino, monóxido de carbono y polvo). Desde el punto de vista geométrico, consideraron un cuerpo esférico con el eje perpendicular a la órbita en una órbita típica de los cometas de la familia de Júpiter y utilizaron la temperatura superficial máxima y las producciones totales como variables de comparación. El resultado no fue, en cierta manera, sorprendente. Distintos modelos con distintas implementaciones, daban resultados diferentes. Se podría decir, como se muestra en la Fig. 2.3, que cerca del perihelio, cuando el proceso energético dominante es la sublimación, todos los modelos coinciden, prácticamente, en la temperatura superficial. Las diferencias aparecen, o se acentúan, a grandes distancias heliocéntricas, cuando la difusión térmica adquiere importancia al reducirse el papel de la sublimación por la reducción de la temperatura.



**Figura 2.4:** Resultados de temperatura máxima superficial para la aplicación de nuestro modelo al “Modelo 1” del trabajo de Huebner et al. (2006), comparables a los presentados en el mismo que recogemos en la Fig. 2.3

Otras comparaciones (e.g. producciones) llevaban a las mismas conclusiones. A priori, de ese resultado y asumiendo que todos los modelos tienen un buen

comportamiento numérico, no es posible decir cuál es la solución correcta. Entre los modelos hay diferencias sutiles en la descripción física que dan lugar a comportamientos diferentes. Como mencionamos en la introducción de este capítulo y repetimos aquí, los resultados de los modelos son simplemente la aplicación práctica de teorías o hipótesis con intenciones predictivas y como tales deben ser contrastados con observaciones y experimentos. Entendemos por tanto que será la habilidad de los distintos modelos de reproducir el comportamiento observado y de predecirlo el factor a tener en cuenta para definir la calidad del modelo.

Desafortunadamente no hemos podido acceder a los datos que permiten reconstruir la figura 2.3 (o cualquier otra del experimento llevado a cabo en Huebner et al. 2006) para incluir en ella nuestros propios resultados. En cualquier caso, hemos realizado simulaciones, adaptando nuestro modelo y código numérico lo más posible a las circunstancias modelizadas por Huebner et al. (2006), obteniendo resultados satisfactorios. Como se puede ver en la figura 2.4, que se muestra como ejemplo para comparar con la figura 2.3, la temperatura superficial máxima obtenida con nuestro código en esas circunstancias físicas concretas es prácticamente idéntica a la obtenida por la mayoría de los modelos de Huebner et al. (2006) en el perihelio. En el afelio, la temperatura superficial obtenida por nuestro código estaría en la zona más baja de las obtenidas por los modelos comparados en Huebner et al. (2006), similar a la producida por los algoritmos C1 y C2. Los resultados de nuestro modelo resultan, pues, perfectamente compatibles con los estudiados en Huebner et al. (2006). Las pruebas adicionales realizadas, incluyendo las distintas circunstancias físicas simuladas por Huebner et al. (2006), confirman el buen comportamiento de nuestro código.

## Capítulo 3

# Aplicación: Estudio sistemático de la cristalización

Como primera aplicación del modelo descrito en las secciones anteriores haremos un estudio sistemático del proceso de cristalización, que trataremos a lo largo de este capítulo. En primer lugar describiremos la motivación y la metodología con la que lo hemos realizado, para continuar con los resultados y conclusiones.

### 3.1. Objetivos y metodología

Como hemos visto en capítulos anteriores, el hielo amorfo todavía presenta incógnitas en lo que a su comportamiento termofísico se refiere. Es particularmente controvertida la energía liberada por el hielo amorfo en la cristalización cuando éste contiene sustancias dopantes. Por otro lado, la presencia de hielo amorfo en los núcleos cometarios ha sido invocada como posible solución a dos de los problemas que todavía están abiertos acerca de actividad cometaria, a saber, la sublimación simultánea y las explosiones o rachas de actividad.

Es por ello que este trabajo está orientado principalmente a cuantificar el impacto que la suposición de una composición inicial de hielo amorfo, así como la contribución energética del proceso de cristalización pueden tener en la evolución termofísica de un núcleo cometario. De este modo, sabremos hasta qué punto y bajo qué circunstancias se hace necesario tenerlos en cuenta a la hora de estudiar la evolución termofísica de núcleos cometarios. En particular, evaluaremos la evolución del frente de cristalización, entendiendo como tal la región en la que la cristalización está ocurriendo activamente. En cada momento será, pues, la zona en la que coexisten hielo amorfo y cristalino. Estudiaremos, pues, el efecto que tiene en la evolución del frente la energía liberada en la cristalización cuando parte de ella es invertida en la desorción de gases ocluidos y en qué condiciones su efecto es significativo. Obtendremos así una primera aproximación a la sensibilidad del sistema a las variaciones en esa magnitud.

Con este objetivo en mente, trataremos de aislar lo más posible el proceso de



cristalización, de modo que sea el principal en el sistema que vamos a simular. Esto es importante, ya que la falta de linealidad del sistema y la complejidad del acoplamiento entre los distintos procesos hacen muy difícil el estudio de las consecuencias de los cambios en cada parámetro. De este modo, al comenzar con un sistema sencillo podremos sacar unas primeras conclusiones que nos ayudarán con los trabajos en sistemas más completos. Las simplificaciones que hemos hecho para conseguirlo serán descritas en mayor detalle en la sección siguiente.

Hecho esto, simularemos la evolución de la cristalización suponiendo que diferentes energías son liberadas durante la misma. Los resultados de las simulaciones serán analizados centrándonos principalmente en la evolución de la cristalización y su velocidad. La sensibilidad de estos resultados ante la influencia de magnitudes pobremente acotadas en el contexto cometario (como la densidad total del sistema, la razón entre polvo y hielo o la inercia térmica) también será analizada.

Finalmente, como primera aproximación al problema cometario, exploraremos las consecuencias de los resultados obtenidos en dicho contexto. Evaluaremos así en qué condiciones éstos serían compatibles con las observaciones y las posibilidades de encontrar hielo amorfo cerca de la superficie.

## 3.2. Suposiciones adicionales al modelo general

Dado nuestro interés en evaluar la evolución de la cristalización, ésta y la conducción del calor a través de la matriz helada serán los procesos dominantes desde un punto de vista energético en estas simulaciones. Para ello, haremos una serie de suposiciones simplificadoras que nos garantizarán la menor interferencia posible de otros procesos en nuestro estudio sobre la cristalización. Dichas suposiciones no siempre serán las más apropiadas en un contexto cometario. Sin embargo, sí resultan aceptables bajo ciertas condiciones, como veremos a continuación.

La primera de las suposiciones adicionales que utilizaremos será una temperatura constante en la superficie. De este modo, obtendremos un aporte de energía suficiente para desencadenar la cristalización pero controlado para que la sublimación no sea significativa desde un punto de vista energético. Aunque esta condición evidentemente no reproduce las de iluminación de los núcleos cometarios, una temperatura constante puede representar una primera aproximación a la temperatura del interior del núcleo a una cierta profundidad bajo la superficie, donde las variaciones rotacionales día-noche ya no son significativas.

En segundo lugar, con el propósito también de minimizar la interferencia de los procesos de sublimación y recondensación en el interior del núcleo, utilizaremos la suposición ya mencionada en el capítulo anterior de que, en presencia de hielo, la presión de vapor será igual a la de saturación. De este modo, la única sublimación que sucederá será la necesaria para que la densidad de vapor se ajuste a la de saturación asociada a la temperatura en cada punto. Como hemos visto, esta suposición se ha utilizado y se puede considerar razonable en zonas del interior del núcleo. Dada la discusión del párrafo anterior, y recordando lo discutido en el

segundo capítulo, estaremos en las condiciones en las que esta suposición es más válida, ya que el aporte energético está controlado. De este modo, no se llegará a formar un frente de sublimación con el consiguiente flujo tanto hacia el exterior como hacia el interior, donde el gas podría recondensar en zonas más frías. En estas condiciones no consideraremos la producción, y trataremos el polvo como un componente estático del modelo. Así, tendremos una fracción de polvo constante en el núcleo y evitaremos un cálculo explícito de su densidad, garantizando así una proporción constante de hielo en la matriz, que siempre estará disponible para alcanzar el equilibrio de saturación.

Además de esto, aunque supondremos que el hielo amorfo es el componente volátil principal de los núcleo y que contiene otros elementos volátiles atrapados en su interior, estos últimos no se tratarán de manera explícita. Consideraremos que, al ser su masa una fracción pequeña de todo el material volátil, los procesos de sublimación-recondensación y transporte del material volátil secundario son de segundo orden energéticamente. Además, trataremos algunas condiciones iniciales en las que el volátil secundario no podría condensar, no teniendo por tanto ningún impacto energético salvo por la energía transportada por el flujo, cantidad ciertamente muy pequeña frente a la difusión de estado sólido. En cualquier caso, la aportación energética de los componentes volátiles minoritarios a la energía neta liberada en la cristalización será tenida en cuenta implícitamente al considerar los distintos valores de la misma para estudiar su influencia en los resultados.

### 3.3. Parámetros y condiciones iniciales

Dada la incertidumbre en todas las magnitudes cometarias que mencionamos en capítulos anteriores, hemos hecho simulaciones que cubren un rango razonable de valores para ellos, resumidos en la Tabla 3.1. Es necesario recordar que la mayoría están acoplados (e.g. porosidad, densidad, inercia térmica, etc.) y que un cambio en uno de ellos implica generalmente un cambio en los otros. Así, no todas las combinaciones reflejan valores físicamente plausibles, de modo que los hemos variado coherentemente, cuidando de que en todas las simulaciones realizadas, todos los parámetros se mantengan dentro de los límites especificados.

Con el sistema simplificado que acabamos de describir hemos hecho simulaciones para temperaturas superficiales de 140, 150 y 160 K. El límite superior para la temperatura de 160 K ha sido escogido por ser lo suficientemente alto para que el comienzo de la cristalización en la parte más externa sea casi instantáneo, pero suficientemente bajo como para que la sublimación de agua sea poco significativa. En el peor de los casos para nuestras simulaciones (para las mayores energías liberadas) la contribución energética de la sublimación en la superficie es menos de un 2.5% el calor conducido hacia el interior. Si utilizásemos la condición de contorno que hemos visto en el capítulo anterior (2.37), no podríamos garantizar que la sublimación superficial de agua sea despreciable desde un punto de vista energético, ya que la temperatura superficial puede hacerse demasiado elevada, al

**Cuadro 3.1:** Valores de parámetros y condiciones iniciales usados en nuestras simulaciones. El efecto de algunas de estas magnitudes en los resultados se ha estudiado variándolos en el rango que aparece, que es el aceptado como plausible en cometas.

Parámetro	Valores	Unidades
Temperatura superficial	140, 150, 160	K
$R_g$	8.314	$\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$
$\mu\text{m}$	18.	$\text{g mol}^{-1}$
$\rho^{\text{H}_2\text{O},c}$	920.	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{polv},c}$	2500.	$\text{kg m}^{-3}$
$K_{\text{am}}$	$7.1 \times 10^{-5} T$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$K_{\text{cr}}$	$567./T$	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$K_{\text{polv}}$	2.	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
$c_{\text{H}_2\text{O},\text{vap}}$	1528	$\frac{\text{J}}{\text{kgK}}$
$c_{\text{H}_2\text{O},\text{ice}}$	$7,49 \cdot T + 90$	$\frac{\text{J}}{\text{kgK}}$
$c_{\text{polv}}$	$770 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}$	
T (inicial)	30, 70	K
$\rho^{\text{am}}$ (inicial)	19-636	$\text{kg m}^{-3}$
$\rho^{\text{polv}}$	36-667	$\text{kg m}^{-3}$
$p$ (porosidad inicial)	0.28-0.82	
densidad $\rho$	250,400,700	$\text{kg m}^{-3}$
Inercia Térmica $I$	20, 100, 400	$\text{W K}^{-1} \text{m}^{-2} \text{s}^{-1/2}$
Razón polvo-hielo	0.1,0.45,1, 20	
Radio total	1000	m
Profundidad de Resolución	5	m

menos para valores altos de la energía liberada en la cristalización. Como ya se ha comentado, en un contexto cometario, esta condición de contorno constante puede ser representativa de las circunstancias en una zona interna del núcleo, a profundidad suficiente como para que la temperatura no se vea afectada por los cambios en la iluminación de la superficie.

También se espera que la evolución del frente de cristalización sea sensible a la temperatura interna. Un valor típico para la temperatura interna inicial en los modelos cometarios es 30 K, coherente con los valores aceptados para cometas que hemos visto en capítulos anteriores, puede tener una gran influencia en el avance hacia el interior del frente de cristalización. En el caso que acabamos de mencionar gran parte de la energía sería invertida en elevar la temperatura del núcleo hasta el nivel en el que empieza la cristalización. En las simulaciones realizadas para este estudio, para medir la sensibilidad de los resultados, se han usado temperaturas iniciales de 30 y 70 K (esta última escogida arbitrariamente). Temperaturas iniciales de más de 70 K (e.g. del orden de 100 K) producirían una cristalización casi

simultánea del volumen completo. En este caso, se hace prácticamente imposible definir el frente de cristalización y medir su evolución.

Con respecto a la densidad, ya hemos visto en la introducción que, aunque hay un cierto acuerdo entre las diferentes estimaciones en torno a los  $500 \text{ kg m}^{-3}$ , la incertidumbre en esta magnitud es muy elevada. Por esta razón, las simulaciones usadas para este estudio cubren densidades en un rango entre  $250$  y  $700 \text{ kg m}^{-3}$ . Respecto a la porosidad, hay acuerdo en el hecho de que los cometas son conglomerados porosos, aunque no hay estimaciones precisas para la porosidad de un cometa. En nuestras simulaciones, consideraremos porosidades entre  $0.3$  y  $0.8$ .

La inercia térmica es una magnitud clave y a la vez pobremente acotada en nuestro sistema. Ya hemos visto al definirla en los capítulos anteriores que está fuertemente acoplada a las características internas del núcleo, de modo que evoluciona con su composición y temperatura. Por ello, para estudiar su influencia, consideraremos la inercia térmica asociada a la composición inicial, supuesto que el hielo de agua se encuentra en estado cristalino y a una temperatura de  $140 \text{ K}$ . A la hora de realizar simulaciones con diferentes valores, su magnitud será controlada a través del parámetro de Hertz de la conductividad. De este modo, trataremos una aproximación del orden promedio de la inercia térmica real en nuestro sistema. En nuestras simulaciones utilizaremos valores que son considerados como aceptables en la comunidad científica,  $20$  y  $100 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  (ver e.g. Groussin et al. 2007), máxime teniendo en cuenta los recientes resultados (descritos ampliamente en la introducción) de Davidsson et al. (2012). Como todos esos resultados se han obtenido asumiendo una emisividad de la superficie de  $0.9$  y entendemos que la determinación de la inercia térmica es dependiente del modelo utilizado (Davidsson et al., 2009), consideraremos adicionalmente el caso de una inercia térmica significativamente mayor,  $400 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , para estudiar sus consecuencias.

Como también hemos visto en capítulos anteriores, la proporción entre hielo y polvo (que de ahora en adelante representaremos a través de la razón polvo-hielo, el cociente entre las densidades de polvo y hielo) es una de las características de los núcleos cometarios que peor acotada está. Es por ello que en nuestras simulaciones consideraremos razones polvo-hielo entre  $0.1$  y  $20$ , que representan los casos límite de un núcleo rico en hielo y otro rico en polvo. En cuanto a la distribución de polvo, en esta ocasión no es necesario tenerla en cuenta, ya que el polvo será un componente estático.

A continuación describiremos el resto de los parámetros (los que hemos definido como parámetros materiales) relevantes para este estudio. Para la conductividad térmica del hielo cristalino puro,  $K_{\text{cr}}$ , utilizaremos la expresión dependiente de la temperatura propuesta por Klinger (1980), basada en medidas de laboratorio y de uso generalizado en el modelizado cometario. Con respecto a la conductividad del polvo,  $K_{\text{polv}}$ , utilizaremos  $2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , que representaría un valor dentro del intervalo generalmente utilizado en las simulaciones termofísicas cometarias (ver la sección de parámetros en el capítulo de la descripción del modelo). En todo caso, el valor adoptado para esta magnitud no resultará crítico pues como está pensado estudiar el efecto global de la inercia térmica, modulada por el parámetro de

Hertz, será posible inferir, de las simulaciones realizadas, cuál sería el impacto de considerar otro valor para  $K_{\text{polv}}$ . Con respecto a la conductividad del hielo amorfo, distintos autores utilizan diferentes magnitudes. Algunos modelos (e.g. Enzian et al. 1997) utilizan la expresión  $2,34 \cdot 10^{-3}T + 2,8 \cdot 10^{-2} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , sugerido por Klinger (1980) y Smoluchowski (1981) a partir de cálculos teóricos. Sin embargo, Kouchi et al. (1992) estimaron, a partir de medidas de laboratorio, que la conductividad del hielo amorfo es mucho menor, aproximadamente 4 órdenes de magnitud inferior,  $7,1 \cdot 10^{-7}T \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Nosotros, como hizo Tancredi et al. (1994), y entendiendo que las características del hielo amorfo dependen de sus condiciones de formación, utilizaremos un valor intermedio entre las estimaciones teóricas de Klinger (1980) y las determinaciones experimentales de Kouchi et al. (1992),  $K_{\text{am}} = 7,1 \cdot 10^{-5}T \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ .

Para el calor específico del gas, al igual que en muchos trabajos que simulan el comportamiento de cometas, hemos tomado valores que se deducen de la expresión de los gases ideales, al ser ésta una de las suposiciones de nuestro modelo, en este caso,  $c_{\text{H}_2\text{O,vap}} = 1528 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  (ver e.g. Tancredi et al., 1994). Tomaremos para el calor específico del hielo de agua el valor dado por Klinger (1980), también el asumido generalmente en los modelos de cometas,  $c_{\text{H}_2\text{O,ice}} = 7,49 \cdot T + 90 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , tanto para el hielo amorfo como para el hielo cristalino. El calor específico del polvo es una magnitud más controvertida, y diferentes autores dan diferentes parametrizaciones para el mismo. Como ejemplo, Tancredi et al. (1994) utiliza la expresión  $c_{\text{polv}} = 5T \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  (obtenida como media aritmética de los calores específicos de silicatos y orgánicos refractarios a bajas temperaturas) mientras que Huebner et al. (2006) utilizan  $c_{\text{polv}} = 1300 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Nosotros tomaremos el calor específico dado por Prialnik et al. (2004),  $c_{\text{polv}} = 770 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , que está en el medio del propuesto por Tancredi et al. (1994) entre los 140 y 160 K, que es el intervalo de temperaturas más interesante en nuestro sistema al ser en el que domina la cristalización.

Finalmente, y con respecto a los parámetros numéricos, resolveremos las ecuaciones hasta una profundidad de 5 m discretizando el espacio con 200 nodos, con un  $\beta$  igual a la unidad. Como tomamos un radio supuesto de 1000 metros esto nos da una separación entre los nodos prácticamente constante, del orden de los 2.5 cm que sería la que tendrían si estuviesen exactamente equiespaciados. Lo hemos implementado así porque este estudio, orientado al tratamiento de la cristalización con gran detalle, requiere un buen muestreado espacial de todo el dominio para comprobar el funcionamiento de la cristalización como fuente de calor interna. Al tratarse de un caso ideal, en el que terminaremos la simulación cuando la cristalización alcance un metro de profundidad (cosa que ocurre en relativamente poco tiempo, comparado con las escalas de tiempo cometarias) podemos permitirnos una gran resolución espacial en todo el dominio que no es viable para estudios más realistas de núcleos cometarios en los que otros procesos sean también relevantes.

## 3.4. Resultados y discusión

En esta sección discutiremos los resultados obtenidos en las distintas simulaciones realizadas en este estudio. En primer lugar presentaremos la velocidad local de cristalización y comentaremos los resultados obtenidos en relación con ella. Después haremos lo propio con la velocidad media de cristalización y finalmente compararemos estos últimos valores con estimaciones dadas para la erosión de los cometas.

### 3.4.1. Velocidad local de cristalización

#### 3.4.1.1. Descripción

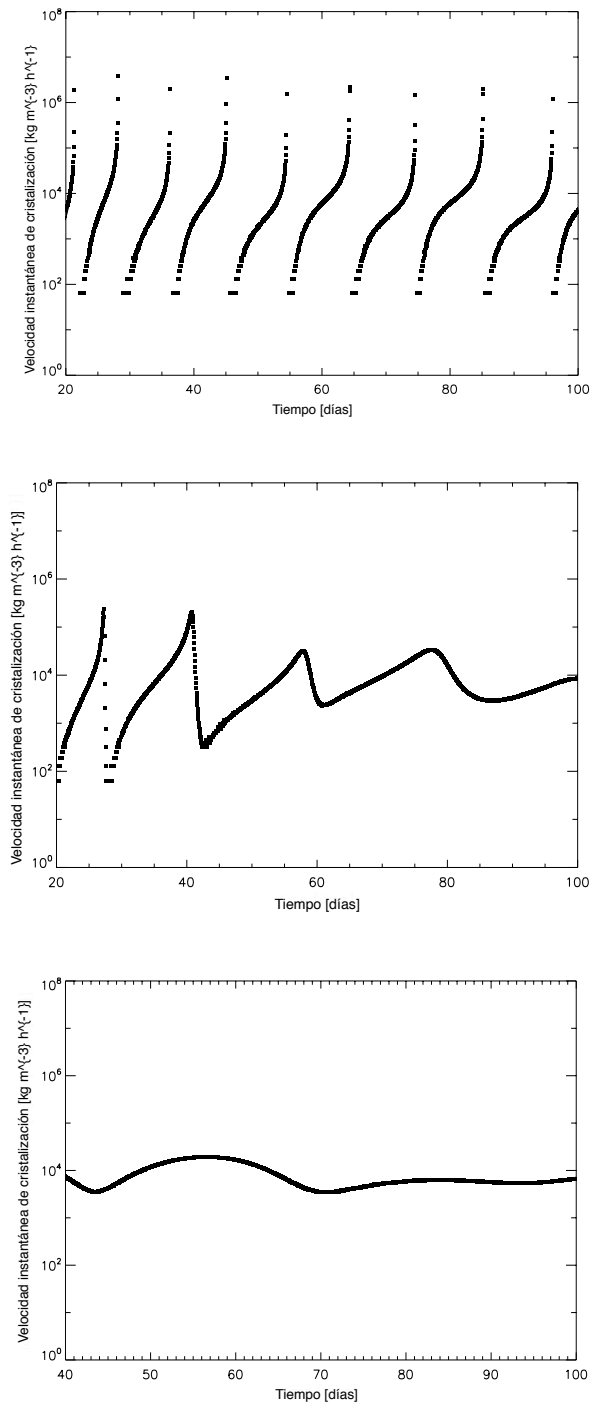
En primer lugar estudiaremos la velocidad local o instantánea de cristalización,  $r_c$ , y el efecto que la energía neta liberada tiene en ella. Definimos esta velocidad local como

$$r_c = \frac{|\Delta\rho^{am}|}{\Delta t} \quad (3.1)$$

que estima la cantidad de hielo amorfo cristalizado en cada instante, y nos da una visión general del desarrollo del proceso. Por ejemplo, la Fig 3.1 muestra la velocidad local  $r_c$  en función del tiempo para tres casos de la energía neta liberada en la cristalización: el caso puramente exotérmico ( $H_{net} = 9 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ ), un caso en el que la mitad de la energía liberada se invierte en la desorción de volátiles dopantes ( $H_{net} = 4,5 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ ), y por último el resultado de un sistema en el que la cristalización es neutra desde un punto de vista energético ( $H_{net} = 0 \text{ J kg}^{-1}$ ). Respecto al resto de los parámetros, estas simulaciones han sido realizadas para una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , una razón polvo-hielo de 1, una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y una temperatura interna inicial de  $70 \text{ K}$ . Este conjunto de parámetros, que puede ser considerado como el caso nominal, nos servirá para comparar con otros casos e ilustrar los distintos comportamientos de  $r_c$  en nuestras simulaciones.

#### 3.4.1.2. Discusión

De la Fig. 3.1 es clara la dependencia cuantitativa y cualitativa de la velocidad instantánea de cristalización con la energía neta liberada. Cuando la energía liberada en la cristalización es la del hielo amorfo puro de agua (panel superior de 3.1), la velocidad de cristalización puede evolucionar de manera discontinua, con rachas fuertes y repetitivas que están acompañadas por respectivos aumentos en la temperatura. Si estas rachas son analizadas detalladamente se puede ver que la cristalización avanza relativamente despacio hasta alcanzar una velocidad de aproximadamente  $10^5 \text{ kg m}^{-3} \text{ h}^{-1}$ . Entonces crece por encima de los  $10^5 \text{ kg m}^{-3} \text{ h}^{-1}$  muy rápidamente, con estallidos de duración del orden de los minutos. Estas rachas son cuasi periódicas, con un periodo que aumenta ligeramente a medida que



**Figura 3.1:** Evolución de la velocidad instantánea de cristalización para tres casos de energía neta liberada en la cristalización. Los parámetros comunes a las tres gráficas son una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y razón polvo-hielo de 1. Se observa cómo las rachas en la velocidad de cristalización desaparecen gradualmente al disminuir la energía neta liberada en la cristalización. El panel superior presenta el caso exotérmico puro, en el que  $H_{net} = 9 \times 10^4 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$ , el panel central presenta el caso energéticamente intermedio  $H_{net} = 4,5 \times 10^4 \frac{\text{J}}{\text{kg}}$  y el inferior el caso energéticamente neutro  $H_{net} = 0$

el frente de cristalización avanza hacia el interior. Esto es esperable en este tipo de modelos estáticos en los que la energía procedente de la frontera superior en general disminuye con la profundidad. Las rachas en la velocidad de cristalización se pueden explicar fácilmente. Cuando la temperatura superficial es lo suficientemente alta, la cristalización comienza y se libera una gran cantidad de energía que en su mayoría es invertida en aumentar la temperatura (recordemos que la conductividad del hielo amorfo es extremadamente baja) y por lo tanto la velocidad de cristalización. Este aumento se prolonga hasta que todo el hielo amorfo del frente de cristalización se convierte en cristalino. En ese momento, la energía liberada se difunde principalmente hacia la superficie (al estar la zona bajo el frente compuesta de hielo amorfo), lo que ralentiza la cristalización. Simulaciones adicionales elevando artificialmente la conductividad térmica del hielo amorfo muestran que si la conductividad de la región amorfa es similar a la de la cristalina, las rachas en la cristalización no aparecen aún para energías liberadas altas.

En la Fig. 3.1 se puede ver que las rachas en la cristalización pueden aparecer sólo cuando la energía neta liberada es alta. Para el conjunto de parámetros correspondientes a las simulaciones mostradas en la Fig. 3.1, las rachas en la velocidad local no aparecen, o aparecen sólo al principio de la cristalización del núcleo para energías inferiores al 50 % de la energía liberada por el hielo amorfo puro de agua (i.e. para energías menores que  $4.5 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ ). Por debajo de este umbral la energía liberada no es suficiente para crear las rachas y, en estos casos, la cristalización evoluciona de manera continua. Este comportamiento aparece reflejado en, por ejemplo, las graficas central e inferior de la Fig. 3.1. En el panel central de la Fig. 3.1, que corresponde a una energía liberada de  $4.5 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ , se puede ver que algunas rachas aparecen al principio de la simulación pero desaparecen a medida que la temperatura interior aumenta y por lo tanto disminuye el aporte energético procedente de la superficie.

En general, la aparición o no de rachas en la velocidad instantánea de cristalización, su separación en el tiempo y el umbral de energía neta liberada bajo el cual desaparecen, dependen del equilibrio entre las escalas de tiempo de la difusión del calor y de la cristalización para la temperatura local en la región del frente de cristalización. Las rachas aparecen cuando la escala de tiempo de la difusión del calor es mayor que la de cristalización. En estas circunstancias, el calor liberado en la cristalización no difunde con la suficiente rapidez y se acumula en el elemento de volumen elevando su temperatura y, por lo tanto, elevando la velocidad de cristalización. En este problema, el hecho de que la inercia térmica del hielo amorfo es muy pequeña (varios órdenes de magnitud menor que las del polvo y el hielo cristalino) juega, como ya hemos dicho, un papel esencial. Ya hemos visto en el capítulo anterior que la escala de tiempo característica es una herramienta muy valiosa para estimar lo significativo de cada uno de los procesos en juego. Como también hemos mencionado, la escala de tiempo de la cristalización es la inversa de la ec. 2.4, que depende de la temperatura y, por lo tanto, de la energía neta liberada y del contenido de hielo amorfo. Respecto a la escala de tiempo de la difusión 2.5, depende de la densidad, calor específico, conductividad térmica efec-



tiva, y por lo tanto de la temperatura y las densidades de todos los componentes del núcleo (y, en consecuencia de la razón polvo-hielo). Se trata entonces de una cuestión en la que está involucrada prácticamente la totalidad de las magnitudes que consideramos en nuestro sistema.

Dado el fuerte acoplamiento entre las diferentes magnitudes implicadas no es posible establecer definitivamente el efecto de una magnitud en particular sin considerar el efecto de las otras. En general, lo único seguro es que toda magnitud que aumente la escala de tiempo de la difusión del calor provocará un aumento en el periodo de las rachas de cristalización. Del mismo modo, toda magnitud que disminuya netamente la escala de tiempo de difusión comparada con la de cristalización provocará un aumento en la frecuencia de las rachas de cristalización o, finalmente, una velocidad de cristalización regular y elevada. Análogamente, si la energía liberada en la cristalización es relativamente pequeña (por ejemplo, cuando el contenido en hielo es pequeño comparado con el de polvo, o cuando los volátiles dopantes consuman en la desorción una parte significativa de la energía liberada), la escala de tiempo de la cristalización se mantiene relativamente alta y las rachas no aparecen. En estos casos, la cristalización evoluciona con una velocidad regular y baja.

En cualquier caso, las simulaciones realizadas nos permiten ilustrar el efecto de algunas de las magnitudes implicadas, como la densidad y la inercia térmica. Considerando las expresiones vistas en el capítulo anterior, la escala de tiempo de la difusión del calor se puede escribir como

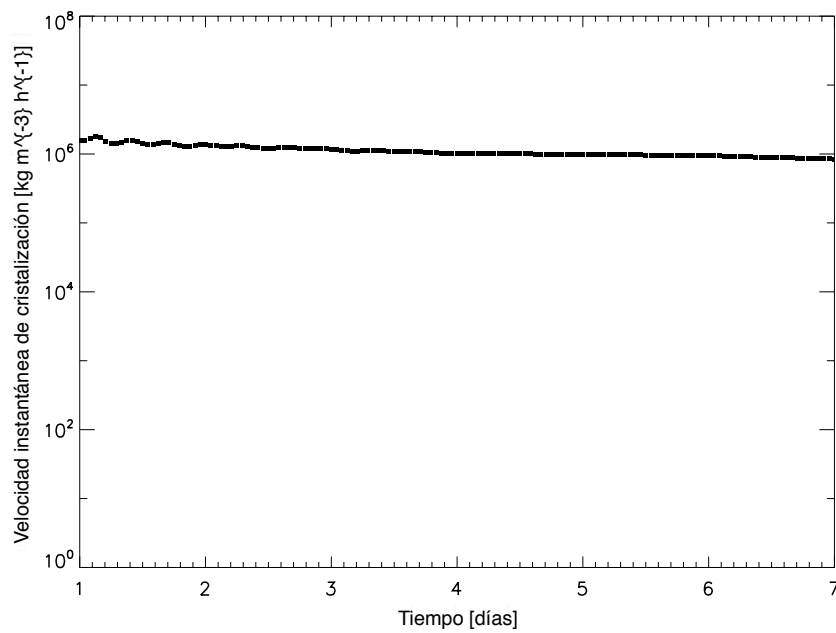
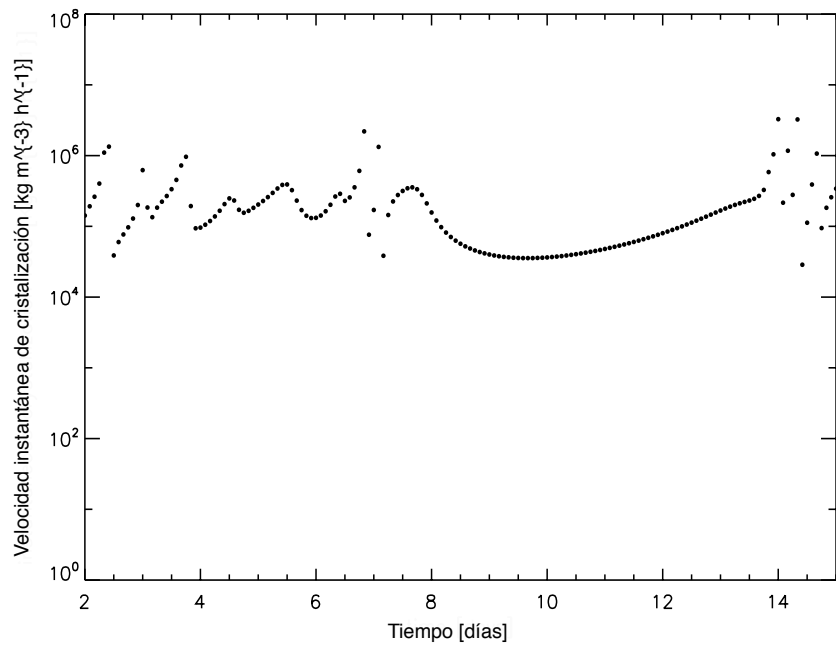
$$\tau_{dif} \propto \frac{\rho^2 C^2}{I} \quad (3.2)$$

donde  $\rho$  es la densidad de volumen,  $c$  es la capacidad calorífica efectiva del material e  $I$  es la inercia térmica del frente de cristalización. Con esta expresión, el efecto de las magnitudes principales se puede ver claramente. Por ejemplo, tanto un aumento de la inercia térmica como una disminución de la densidad implicarían una reducción de la escala de tiempo de la difusión del calor. A continuación describiremos estos resultados más pormenorizadamente.

### ***Efecto de la inercia térmica***

Para ilustrar el efecto de la inercia térmica en nuestro sistema, hemos realizado una serie de simulaciones aumentando artificialmente la inercia térmica a través del parámetro de Hertz de la conductividad y manteniendo el resto de las magnitudes constantes.

Así, teniendo en mente la discusión anterior y la ecuación 3.2, un aumento de la inercia térmica resulta en un aumento de la frecuencia (y disminución de la altura) de las rachas de cristalización que, cuando  $I$  es lo suficientemente grande, dejan de ser cuasi-periódicas y finalmente desaparecen. En la Fig. 3.2 se muestran las velocidades instantáneas de cristalización de núcleos similares al del panel superior de la gráfica 3.1, pero con inercias térmicas más elevadas:  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$



**Figura 3.2:** Evolución de la velocidad instantánea de cristalización para dos casos de inercia térmica. El resto de parámetros comunes son los del panel superior de la Fig. 3.1 densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , razón polvo-hielo de 1. Las rachas en la velocidad de cristalización, que en la fig 3.1 eran cuasi periódicas se irregularizan y finalmente desaparecen al aumentar la inercia térmica. El panel superior presenta un caso con inercia térmica media-alta,  $I = 100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y el inferior con inercia térmica alta  $I = 400 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$

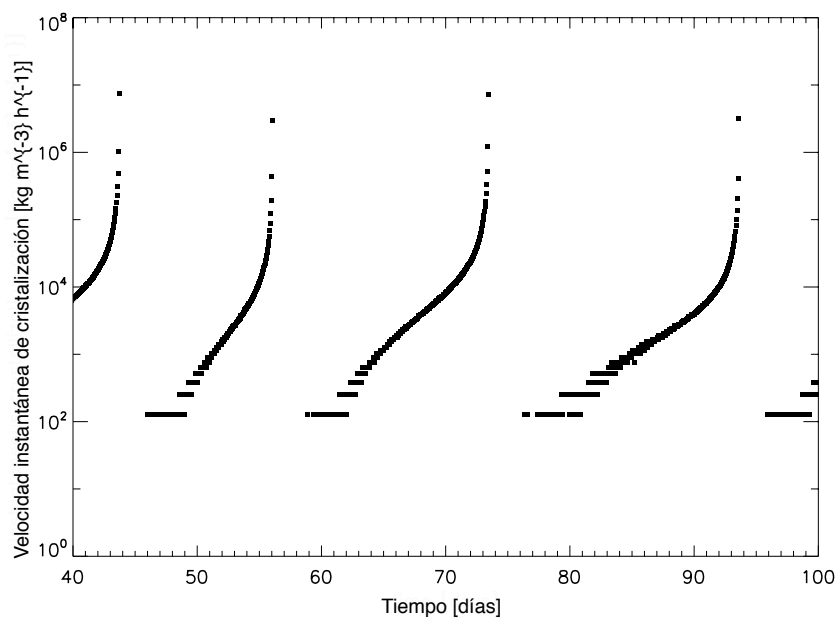
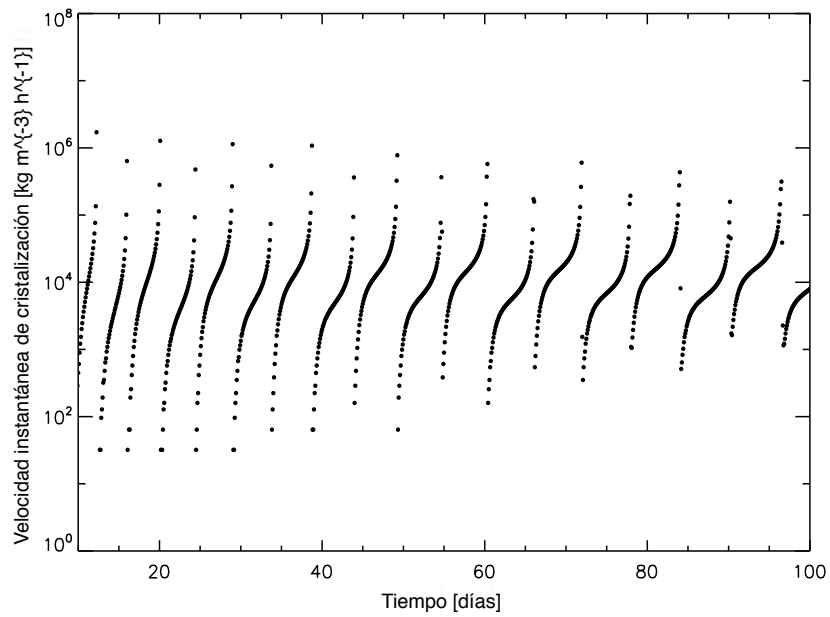
en el panel superior y 400 en el inferior. Se puede ver que al aumentar la inercia térmica, y por lo tanto al disminuir la escala de tiempo de la difusión, las rachas en la velocidad de cristalización no aparecen ni siquiera cuando la energía liberada es la del hielo puro de agua. Para las densidades y razón polvo-hielo correspondientes a estas simulaciones, las rachas de cristalización propiamente dichas no aparecen ni siquiera para una inercia térmica moderada, de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ . Para que aparezcan es necesario reducir la razón polvo-hielo (y por lo tanto, aumentar la energía neta liberada en el frente de cristalización). Por ejemplo, para una razón polvo-hielo de 0.45 y una inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  aparecen varias rachas diarias en la cristalización.

### ***Efecto de la densidad***

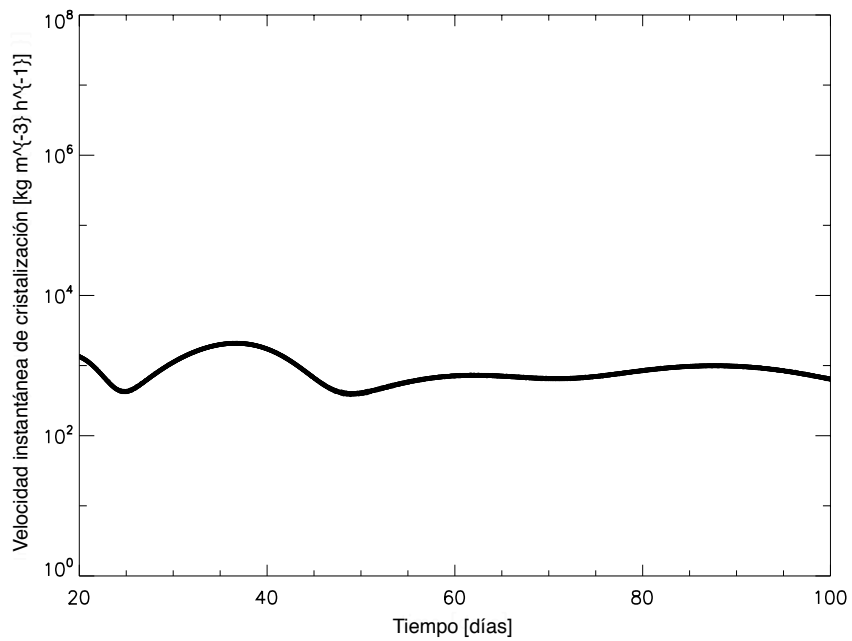
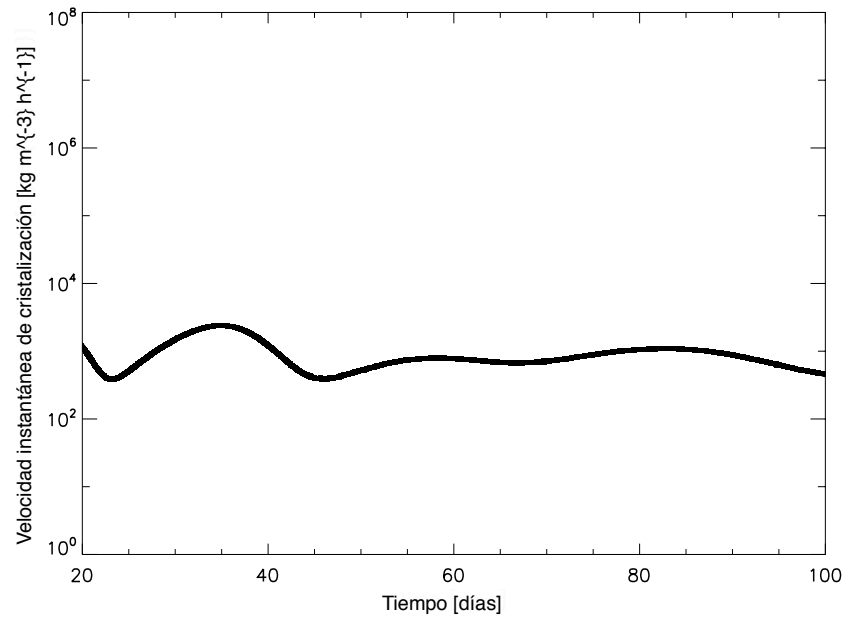
Ahora pasamos a revisar la influencia de la densidad total del núcleo en la velocidad local de cristalización. En la Fig. 3.3 se muestra el comportamiento de la velocidad local de cristalización al variar la densidad total del núcleo. Se observa el comportamiento inverso al comentado en la sección anterior. Estas simulaciones corresponden al mismo núcleo simulado del panel superior de la Fig. 3.1 pero con densidad de  $250 \text{ m}^{-3}$  en el panel superior de la Fig. 3.3 y  $700 \text{ kg m}^{-3}$  en el inferior. Se puede ver que un aumento en la densidad se traduce en un aumento del periodo de las rachas de cristalización, que pasa de ser de aproximadamente 4 días para  $250 \text{ kg m}^{-3}$  a unos 15-20 días para  $700 \text{ kg m}^{-3}$ .

### ***Efecto de otras magnitudes***

Otras magnitudes como la razón polvo-hielo y la temperatura interna tienen también un impacto importante en los resultados. Respecto a la razón polvo-hielo, tiene dos efectos sobre nuestro sistema. Cuando la aumentamos, por un lado aumenta la conductividad de la matriz (y por tanto la inercia térmica, disminuyendo así la escala de tiempo de la difusión), que pasa a estar dominada por la del polvo. Por otro lado, disminuye la cantidad neta de energía liberada en el frente de cristalización al pasar éste a tener menor cantidad de hielo. La combinación de estos efectos hace que para razones polvo-hielo grandes las rachas de la velocidad de cristalización desaparezcan. En nuestras simulaciones, los núcleos con razones polvo-hielo de 20 no muestran rachas en la velocidad de cristalización ni siquiera cuando la energía neta liberada en el cambio de fase es la del hielo puro de agua. En este caso, el perfil de la velocidad de cristalización es muy similar para todos los casos de energía liberada, como se puede ver en la Fig. 3.4. El panel superior de la figura 3.4 muestra un caso similar al del panel superior de la Fig. 3.1 pero con una razón polvo hielo de 20, y el panel inferior de 3.4 muestra el mismo caso pero cuando la cristalización es energéticamente neutra. Se puede ver que cuando los núcleos son ricos en polvo el avance de la cristalización en el caso exotérmico es regular y muy parecido al de una cristalización energéticamente neutra, salvo que en el caso neutro la cristalización es ligeramente más lenta. Para estos núcleos,



**Figura 3.3:** Evolución de la velocidad instantánea de cristalización para dos casos de densidad. El resto de parámetros comunes son los del panel superior de la Fig. 3.1, a saber, inercia térmica  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y razón polvo-hielo de 1. El periodo pasa de ser de aproximadamente 4 días cuando la densidad es  $250 \text{ kg m}^{-3}$  (panel superior) a ser del orden de 20 días para densidades de  $700 \text{ kg m}^{-3}$  (panel inferior).



**Figura 3.4:** Evolución de la velocidad instantánea de cristalización para un núcleo como el del panel superior de 3.1, con razón polvo-hielo de 20 cuando la cristalización es puramente exotérmica (panel superior) y cuando es energéticamente neutra (panel inferior)

ricos en polvo, la energía liberada en la cristalización no tiene efecto significativo. Simulaciones adicionales variando la razón polvo-hielo y manteniendo el resto de los parámetros dentro del rango de la Tabla 3.1 muestran que las rachas en la velocidad de cristalización desaparecen para razones polvo-hielo mayores que 5.

La temperatura interna inicial del núcleo también influye significativamente en el sistema. Para temperaturas iniciales bajas, una parte significativa del tiempo se emplea en aumentar la temperatura del núcleo hasta aquellas en las que empieza la cristalización. El efecto global de una temperatura interna baja es complicado, porque por un lado, se invierte mayor cantidad de energía en elevar la temperatura, lo que dejaría menos para la conducción. Por otro lado, la conducción de estado sólido es proporcional al gradiente de temperatura, que será mayor en zonas como el frente de cristalización cuanto menor sea la temperatura interna inicial. Aunque, por supuesto, los efectos de la temperatura interna dependerán de las otras condiciones del núcleo, en el caso de un núcleo con una razón polvo hielo de 1 e inercia térmica baja reducir la temperatura interna del núcleo aumentará el tiempo entre explosiones (de aproximadamente una semana para 70 K a dos cuando la temperatura inicial es de 30K). Dejando el resto de parámetros fijos, la disminución de la temperatura interna y el aumento del gradiente en el frente de cristalización hacen que una mayor cantidad de energía sea conducida a través del mismo, quedando una menor cantidad acumulada.

### ***Resumen de los resultados***

La energía neta liberada en la cristalización puede afectar significativamente a la evolución de la velocidad local de cristalización. La cristalización puede avanzar de manera discontinua, con aumentos fuertes y repetitivos de la velocidad instantánea, si la energía liberada es relativamente alta. Considerando el conjunto completo de simulaciones, las rachas de la cristalización pueden aparecer con periodos que van desde el orden de un día (cuando la razón polvo-hielo es pequeño,  $\sim 0.1$ , la densidad es baja,  $\sim 250 \text{ kg m}^{-3}$ , y la inercia térmica es moderada,  $\sim 100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ) hasta el orden de meses (cuando la densidad es grande,  $\sim 700 \text{ kg m}^{-3}$ , y la inercia térmica es pequeña,  $\sim 20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ). De nuestras simulaciones, e independientemente de las características del núcleo (siempre dentro de los rangos dados en la tabla 3.1), se sigue que las rachas en la velocidad de cristalización no aparecen cuando la energía neta liberada en el cambio de fase es menos de la mitad la del hielo amorfo puro de agua (i.e.  $4.5 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ ). Para la energía dada por Sandford y Allamandola (1990) (que hemos visto en el capítulo de descripción del modelo) para la energía de enlace de volumen en muestras no calentadas esto implicaría que un 2.5 % de impurezas atrapadas en el hielo amorfo sería suficiente para producir una evolución regular del frente de cristalización. Esta última frase requiere análisis adicional. Por un lado, es necesario tener en cuenta que este umbral de energía para una cristalización regular puede reducirse para características físicas concretas del núcleo. Por ejemplo, para una inercia térmica relativamente alta (mayor que  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ) o una

razón polvo-hielo elevada (mayor que 5), el frente de cristalización evolucionaría de manera regular incluso cuando la energía liberada es la del hielo amorfo puro. Por otro, también hay que considerar que el umbral de energía para la evolución discontinua del frente de cristalización está muy cerca del límite inferior para la energía liberada por el hielo amorfo puro de agua (ver sección del hielo amorfo en el capítulo de descripción del modelo). Si este valor es válido para la energía liberada en la cristalización del hielo amorfo cometario, entonces la cristalización evolucionaría de manera regular y continua incluso sin estar afectada por impurezas.

### *Relación con observaciones*

Situándonos en un contexto cometario, merece la pena mencionar que llama nuestra atención la aparición de rachas repetitivas (o cuasi-periódicas) de la velocidad instantánea de cristalización cuando la energía liberada en la cristalización del hielo amorfo es elevada.

En principio, estas rachas de cristalización, acompañadas del aumento significativo de la temperatura, podrían producir un aumento en la presión de gases en el interior del cometa (tanto por la rápida liberación de los materiales volátiles atrapados en el hielo amorfo, como por lo elevado de la temperatura local). Sería interesante, y se hará en estudios posteriores, comparar la presión de estos gases con tensiones internas plausibles para el material cometario, para estudiar si posibles rachas en la velocidad de cristalización podrían llegar a fracturar el núcleo.

En cualquier caso, estos fuertes aumentos en la velocidad de cristalización podrían producir explosiones de actividad. Estas serían diferentes de las que se describen generalmente en la literatura (ver e.g. Gronkowski 2005), que aparecerían cuando la ola de calor penetra en el interior del núcleo, aumentando su temperatura interior y desencadenando la cristalización. Estas grandes explosiones, a veces repetitivas, tienen una escala de tiempo comparable al periodo orbital. Las posibles explosiones que aparecen en este estudio aparecerían una vez empezada la cristalización, con una cadencia mucho más alta y con una duración muy corta en tiempo. Las que aparecen en la Fig. 3.1 tienen una duración del orden de minutos. Hasta donde sabemos, este tipo de incrementos rápidos y repetitivos de la velocidad de cristalización no fueron mencionados en la literatura hasta nuestro trabajo (González et al., 2008).

Teniendo en cuenta la simplicidad de nuestro modelo, es difícil y algo especulativo extrapolar estos resultados al posible comportamiento de los cometas. Sin embargo, los aumentos en la velocidad de cristalización que aquí describimos podrían ser la causa de las mini explosiones de actividad observadas en el cometa Tempel 1 durante la campaña de observación intensiva de 2005. Como se mencionó en la introducción, este cometa mostró 10 mini explosiones de actividad en siete semanas, de duración muy corta (menos de 10 minutos en su mayoría, ver e.g. A'Hearn et al. 2005). Es interesante notar que, en condiciones físicamen-

te plausibles (densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , razón polvo-hielo de 1 e inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ), las simulaciones realizadas en nuestro estudio indican incrementos rápidos y repetitivos en la velocidad de cristalización con un periodo aproximado de una semana si la temperatura interna del núcleo es de 70K, y aproximadamente de dos semanas si la temperatura interna es de 30K. Estos resultados están dentro del rango compatible con el periodo de las explosiones de actividad observadas en el cometa Tempel 1 (una cada semana). Si estas explosiones tienen su origen en la cristalización del hielo amorfo, nuestras simulaciones indicarían que el papel de los dopantes volátiles atrapados en el hielo amorfo en la energía liberada en la cristalización es pequeño, siendo la energía neta liberada en la cristalización bastante elevada. Además, en caso de producirse, el conjunto de simulaciones sugiere dos escenarios posibles:

- El núcleo tiene una inercia térmica muy pequeña (del orden de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ), una razón polvo-hielo moderada (menor o similar a 1), y una temperatura interna relativamente alta ( $\sim 70 \text{ K}$ )

o bien

- el núcleo tiene una inercia térmica moderada (sobre  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ), un interior rico en hielo (con una razón polvo-hielo  $\sim 0.1$ ) y un interior muy frío (sobre  $30 \text{ K}$ ).

En nuestra opinión, los datos observacionales sobre la posible formación de los núcleos cometarios (o al menos de los hielos que los integran) y las recientes estimaciones de la inercia térmica en Tempel 1 utilizando los datos recalibrados de la misión Deep Impact (Davidsson et al., 2012) favorecen este segundo escenario. Sin embargo, el primer escenario no puede ser descartado al ser el Tempel 1 un cometa térmicamente muy evolucionado.

### 3.4.2. Velocidad media de cristalización

Una serie de modelos predice que el hielo amorfo desaparecería relativamente rápido de los núcleos cometarios, como por ejemplo en el trabajo de Prialnik et al. (2009), donde concluyen que de quedar hielo amorfo debe ser a distancia considerable de la superficie y del centro del núcleo. En este caso, independientemente de si originalmente había o no, no tendría que ser considerado en modelos termofísicos de núcleos relativamente evolucionados.

En esta sección nosotros reevaluaremos esta cuestión explorando el espacio de parámetros y comparando la velocidad de cristalización con velocidades de erosión estimadas para cometas. De este modo, averiguaremos si hay circunstancias físicas en las que la erosión y la cristalización podrían tener velocidades similares, siendo así probable la presencia de hielo amorfo cerca de la superficie.

#### 3.4.2.1. Descripción

En esta sección discutiremos los resultados de nuestro modelo en base a la velocidad media de cristalización. Esta velocidad se calcula estimando el tiempo



empleado en la cristalización del volumen desde una profundidad de 0.5 m hasta 1.5 m y mide el avance de la zona cristalina hacia el interior del núcleo (por lo tanto viene dada en  $\text{m día}^{-1}$ ). El punto inicial de control se escoge a profundidad suficiente para evitar cualquier posible efecto de borde debido al escalón inicial del perfil de temperaturas. Hemos verificado que la velocidad media de cristalización estimada a partir del primer medio metro del volumen seleccionado es prácticamente la misma que la estimada del segundo medio metro del volumen de control.

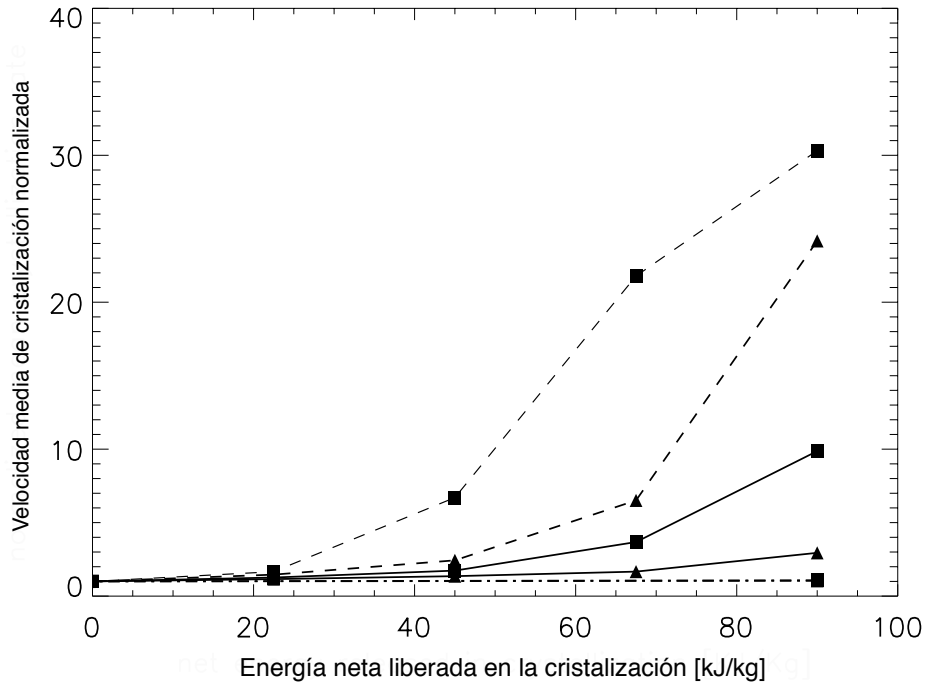
La Fig. 3.5 ilustra la dependencia de la velocidad media de cristalización con la energía neta liberada. En general, y en primera aproximación, se puede decir que la velocidad media depende exponencialmente de la energía neta liberada en la cristalización. Sin embargo, considerando la línea de rayas superior, parece existir un límite superior para la velocidad media definido por la capacidad del medio para transportar el calor hacia el interior. Esto resultaría en un aplanamiento del perfil en la zona de altas energías liberadas. En principio, todos los parámetros físicos que describen el núcleo afectarán a la dependencia de la velocidad de cristalización media con la energía neta liberada, pero todas las simulaciones muestran perfiles similares a los de la Fig. 3.5. Aquí se muestra la influencia de la temperatura inicial (triángulos para 30 K y cuadrados para 70 K) y de la razón polvo-hielo (1 línea sólida, 0.1 línea de rayas y 20 la línea de puntos y rayas) para un núcleo con una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$  y una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ , a saber, desde un efecto prácticamente nulo (para ambas temperaturas) para razones polvo-hielo altas hasta un incremento de hasta un factor 30 para núcleos ricos en hielo.

#### 3.4.2.2. Discusión

En esta sección discutiremos los resultados obtenidos, tratando en primer lugar el efecto de las magnitudes que hemos explorado y posteriormente las consecuencias que podrían tener en un contexto cometario.

##### *Efecto de las magnitudes exploradas*

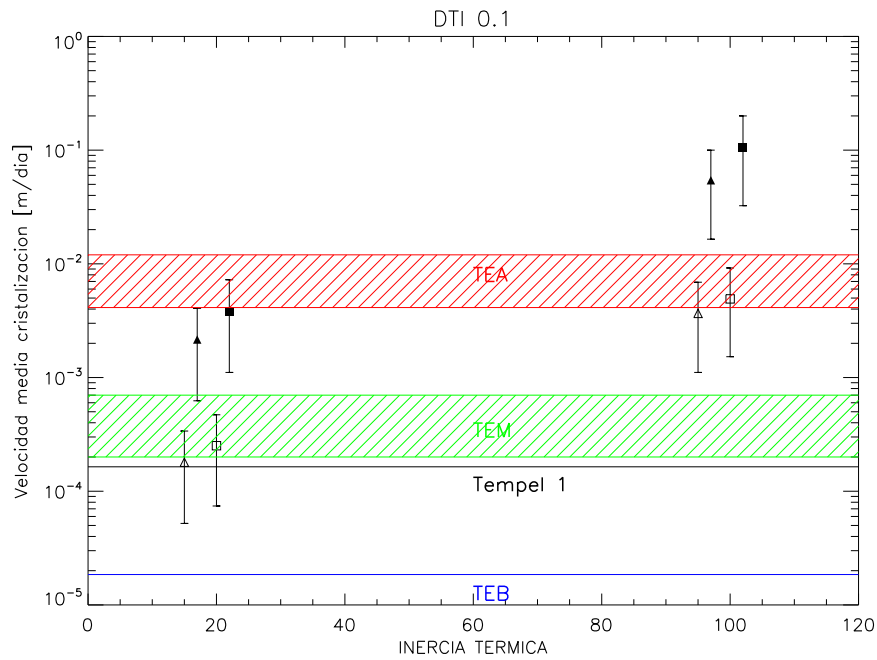
El impacto de los parámetros más importantes en la velocidad media de cristalización se puede ver claramente en las Figs. 3.6 y 3.7. Cada una de estas tres gráficas corresponde a una razón polvo-hielo distinta (que representa a su vez un contenido diferente en hielo y por lo tanto diferentes cantidades netas de hielo amorfo a cristalizar) y muestra la velocidad media de cristalización cuando la energía neta liberada en la cristalización es la del hielo amorfo puro y cuando la cristalización es energéticamente neutra. Se presentan los resultados para diferentes inercias térmicas (20 y  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ) y diferentes temperaturas internas (30 K y 70 K). Los valores representados en cada una de estas figuras son las medias obtenidas a partir de los resultados para diferentes densidades (y por lo tanto porosidades) pero con el resto de características iguales (i.e. la misma



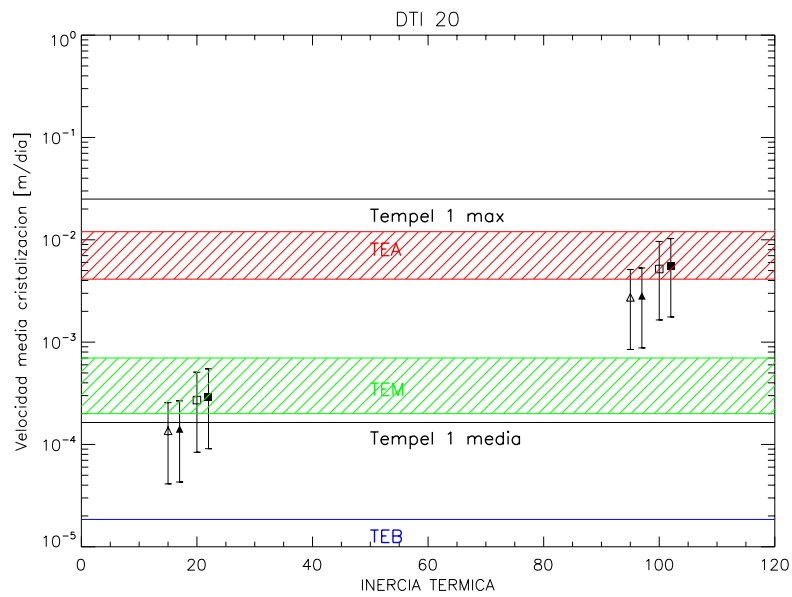
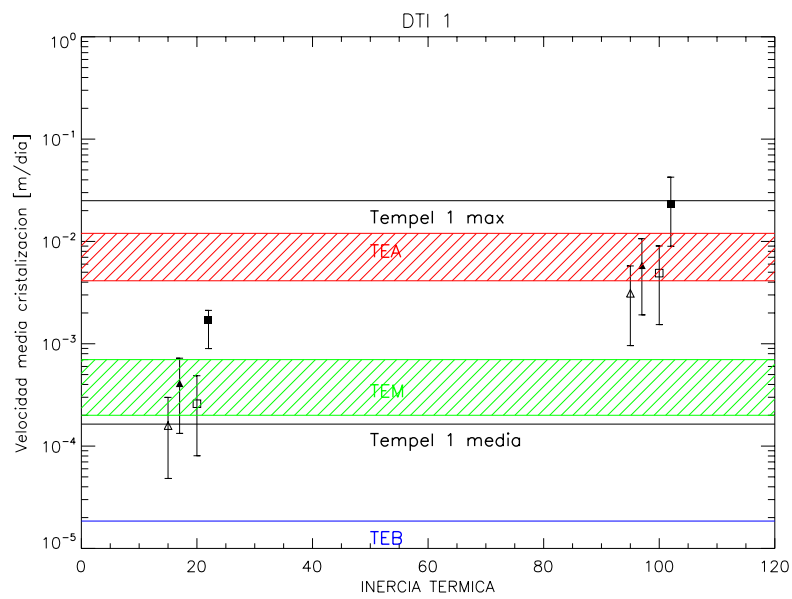
**Figura 3.5:** Velocidad media de cristalización normalizada como función de la energía neta liberada en la cristalización. Todos los valores están normalizados al mínimo para mostrar la tendencia general. La línea sólida representa un núcleo con una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , una razón polvo-hielo de 1 y una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  (triángulos cuando la temperatura interna inicial es de 30 K y cuadrados cuando es de 70 K). La línea de rayas corresponde a un núcleo con una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ , una razón polvo-hielo de 0.1, y al igual que antes, triángulos para temperatura interna inicial de 30K y cuadrados para 70 K. Este es el caso con mayor variación de la velocidad al cambiar la energía neta liberada en la cristalización. Finalmente, la línea de puntos y rayas, que es casi plana, corresponde a un núcleo con densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y una razón polvo-hielo de 20. En este caso, además de no influir la energía liberada, las simulaciones con temperatura interna de 30 y 70 K se superponen.

razón polvo-hielo, inercia térmica y temperatura). Las barras de error representan la dispersión debida al rango de densidades simulado. Además, aparecen también representadas como regiones o líneas horizontales diferentes velocidades de erosión estimadas para núcleos cometarios, que describiremos en secciones posteriores.

En la descripción siguiente, al hablar de factores nos referiremos al cociente entre la velocidad media de cristalización cuando la cristalización libera la energía



**Figura 3.6:** Velocidad media de cristalización estimada considerando todas las simulaciones de núcleos ricos en hielo (razón polvo-hielo=0.1) cuando la energía neta liberada en la cristalización es la del hielo de agua puro (símbolos rellenos) y cuando la cristalización es neutra desde un punto de vista energético (símbolos huecos), lo que significaría que toda la energía liberada en la cristalización se invertiría en la desorción de elementos dopantes. Los símbolos de la izquierda se corresponden a una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y los de la derecha a  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ . Los símbolos han sido ligeramente desplazados horizontalmente por claridad. Además los triángulos corresponden a simulaciones con temperatura interna inicial de 30 K y cuadrados a 70 K. Las barras de error representan la dispersión debida al rango de densidades y porosidades simuladas (ver Tabla 3.1), y los símbolos son el valor medio. Finalmente, las líneas y zonas rayadas horizontales representan tres rangos de velocidades de erosión que aparecen en la literatura cometaria tal y como son descritos en el texto (a saber, TEA, TEM, TEB y la tasa de erosión promedio del cometa Tempel 1)



**Figura 3.7:** Velocidad media de cristalización, figuras análogas a la Fig. 3.6 para núcleos con mayores proporciones de polvo, a saber, con una razón polvo-hielo de 1 (panel superior) y con una razón polvo-hielo de 20 (panel inferior)

de hielo amorfo puro y cuando es energéticamente neutra. En las Figs. 3.6 y 3.7 se puede ver que, lógicamente, cuanto mayor es la razón polvo-hielo menor es el efecto de la energía neta liberada en la cristalización. En nuestras simulaciones, los mayores efectos se obtienen para razones polvo-hielo pequeñas. Esta composición podría ser representativa de al menos parte del interior cometario, atendiendo a los resultados de Sunshine et al. (2007) según los cuales el núcleo estaría estratificado, presentando zonas muy ricas en hielo. Cuando la razón polvo-hielo es 0.1 (Fig. 3.6), la velocidad media de cristalización de un núcleo que libera en la cristalización la energía utilizada habitualmente en los modelos termofísicos para cometas es un factor entre 20 y 30 (dependiendo de la temperatura interna inicial del núcleo) mayor que la de un núcleo en el que toda la energía liberada en la cristalización se invierte en la desorción de dopantes volátiles. Si la razón polvo-hielo es 1 (panel superior de la Fig. 3.7), la energía liberada en la cristalización produce un incremento menor que un orden de magnitud respecto a la simulación de una cristalización energéticamente neutra. Finalmente, cuando el núcleo está dominado por polvo (panel inferior de 3.7), la energía neta liberada en la cristalización apenas afecta a la velocidad media de cristalización. Este comportamiento, como ya explicamos previamente, se debe no sólo al hecho de que el contenido en hielo (y por lo tanto la energía total liberada) disminuya, sino también a que las propiedades térmicas, incluida la difusión del calor pasan a estar controladas por el polvo. Estas circunstancias favorecen la difusión de calor hacia el interior, mientras que en un núcleo inicialmente compuesto en su mayoría de hielo amorfo, la baja conductividad de éste inhibe prácticamente la totalidad de la difusión de calor hacia el interior por debajo del frente de cristalización.

Es interesante resaltar que el efecto de la energía neta liberada en la cristalización es prácticamente independiente de la inercia térmica, para el rango de valores probados. Con esto queremos decir que el aumento en la velocidad de cristalización media cuando la energía liberada es la del hielo amorfo puro comparada con la de una transición energéticamente neutra es aproximadamente el mismo independientemente de la inercia térmica de nuestras simulaciones. Sólo se observa una pequeña reducción del factor para inercia térmica más alta, debida al aumento de la difusión del calor hacia el interior. En cambio, como es evidente de las figuras 3.6 y 3.7, para todas las razones polvo-hielo la velocidad media de cristalización disminuye más de un orden de magnitud cuando consideramos las inercias térmicas más bajas.

La temperatura interna inicial tiene un cierto impacto, pero relativamente pequeño. Como era de esperar, cuanto más frío esté el interior, menor es el efecto de la energía liberada en la cristalización. Esto es debido al hecho de que gran parte de la energía liberada se invierte en aumentar la temperatura, casi sin efectos prácticos en la cristalización. El efecto de la temperatura interna en la cristalización cuando ésta es totalmente exotérmica (para el caso del hielo amorfo puro) es más evidente para una razón polvo hielo de 1. En estas circunstancias, cuando la temperatura interior es baja, una cristalización totalmente exotérmica solo aumentaría la velocidad media de cristalización en un factor 2 o inferior, comparada

con la velocidad media de una transición energéticamente neutra. Sin embargo, para temperaturas internas de 70 K, la energía neta liberada puede aumentar la velocidad media de cristalización en un factor aproximadamente 10. Los núcleos con razones polvo-hielo pequeñas no están tan afectados por la temperatura interna ya que, generalmente, la energía liberada es grande y la temperatura necesaria para el comienzo de la cristalización se alcanza fácilmente.

### ***Comparación con la velocidad de erosión para cometas***

Las velocidades de cristalización representadas en las Figs. 3.6 y 3.7 pueden compararse cuantitativamente con las velocidades medias de erosión superficial en cometas.

Hasta ahora hay varias estimaciones para velocidades medias de erosión cometaria derivadas tanto de observaciones como de modelos teóricos. Por lo que sabemos, la mayor velocidad de erosión estimada hasta ahora para un cometa es la de C/1994 S4 (LINEAR). Tanto Mäkinen et al. (2001) como Altenhoff et al. (2002) estimaron la velocidad de erosión de este cometa, aunque obtuvieron resultados muy distintos. Mientras los primeros obtuvieron una erosión media de 3.3 m día<sup>-1</sup>, sugiriendo que el material de este cometa abandonaba el núcleo por fragmentación, los últimos estimaron un valor de 0.01 m día<sup>-1</sup>. Dada la singularidad del cometa C/1994 S4 (LINEAR), que se fracturó, es probable que su velocidad de erosión no se pueda considerar normal. Por esta razón, no vamos a incluir estas estimaciones en la discusión siguiente.

A partir de modelos teóricos, Cohen et al. (2003) estimaron la velocidad de erosión de un cometa en la órbita del cometa 46P/Wirtanen. Estos autores obtuvieron que para una razón polvo-hielo de 1, y una densidad de aproximadamente 700 kg m<sup>-3</sup>, las regiones ecuatoriales (suponiendo que el eje de rotación del cometa es normal al plano orbital) se erosionarían con una velocidad de  $5.7\text{-}7 \times 10^{-3}$  m día<sup>-1</sup>. Normalizando estos valores para nuestra densidad media de 400 kg m<sup>-3</sup>, la velocidad sería de  $7\text{-}12 \times 10^{-3}$  m día<sup>-1</sup>. Estos valores son sólo ligeramente mayores que los obtenidos por Banaszekiewicz y Rickman (1996), que obtuvieron una velocidad de erosión media de  $5.5 \times 10^{-3}$  m día<sup>-1</sup>. El rango cubierto por estas estimaciones está representado en las Figs. 3.6 y 3.7, y de ahora en adelante nos referiremos a él como *Tasa de Erosión Alta* (que notaremos como TEA por sus siglas).

Por debajo de este rango, Groussin y Lamy (2003) estimaron la velocidad de erosión para un cometa en la órbita del 46P/Wirtanen. Para una razón polvo-hielo en el rango 0.5-2 y una densidad de 1000 kg m<sup>-3</sup>, estos autores estimaron que el cometa se erosionaría a  $2.7 \times 10^{-4}$  m día<sup>-1</sup>, lo que nos llevaría a una velocidad media de  $7 \times 10^{-4}$  m día<sup>-1</sup> al normalizarla para nuestra densidad media de 400 kg m<sup>-3</sup>. El valor obtenido por Groussin y Lamy (2003) es sólo un poco mayor que los estimados por Keller et al. (2004) para el cometa Borrelly que son  $2\text{-}4 \times 10^{-4}$  m día<sup>-1</sup>, si la densidad del núcleo es menor que 1000 kg m<sup>-3</sup>. Prialnik et al. (2004) proporcionan una expresión teórica para estimar la erosión media por

órbita de un cometa (ver tabla en el artículo citado). Utilizando esa fórmula, la velocidad de erosión media para un cometa típico de la familia de Júpiter con una densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$  sería aproximadamente  $2.3 \times 10^{-4} \text{ m día}^{-1}$ , que es del mismo orden que los dos últimos valores mencionados. A este conjunto de tres valores lo denominaremos *Tasa de Erosión Media* (TEM), y también aparece representado en las Figs. 3.6 y 3.7.

Por debajo de este rango, McDonnell et al. (1987) realizaron una estimación de la erosión para el cometa Halley a partir de las observaciones de Giotto. Estos autores estimaron que la superficie del Halley se erosionaba a una velocidad de  $1.85 \times 10^{-5} \text{ m día}^{-1}$ . Este valor, al que llamaremos *Tasa de Erosión Baja* (TEB) también está representado en las Figs. 3.6 y 3.7.

Merece ser mencionada aparte (tanto por la calidad de los datos en los que está basada como por el papel que jugará en las discusiones posteriores) las estimaciones de la erosión (Thomas et al., 2012), realizadas basándose en los resultados de las visitas de las misiones Deep Impact y Stardust-NEXT al núcleo del cometa Tempel 1. Estos autores obtuvieron una erosión de  $1.64 \times 10^{-4} \text{ m día}^{-1}$ , como valor promedio a lo largo de toda la órbita y la superficie. En particular, la recesión calculada en ciertos escarpes (observados en 2005 por Deep Impact y en 2011 por Stardust-NEXT) sería aproximadamente dos órdenes de magnitud mayor, alcanzando un máximo de unos  $2.5 \times 10^{-2} \text{ m día}^{-1}$  y un promedio de  $1.25 \times 10^{-2} \text{ m día}^{-1}$ . Dado que la densidad del cometa se sitúa en torno a los  $450 \text{ kg m}^{-3}$ , podemos considerar dichos valores directamente para compararlos con nuestras estimaciones. Es importante también notar que los valores para la erosión medidos para el Tempel 1 cubrirían un rango en el que quedarían incluidas la TEM y la TEA.

Entendemos que dada la incertidumbre en las magnitudes implicadas y el hecho de que los datos acerca de la erosión son escasos y dispersos, una comparación directa entre la cristalización y las velocidades de erosión es muy especulativa. A pesar de ello, y pensando en la posible detección de granos helados en la coma de varios cometas presumiblemente en estado amorfo (que hemos tratado en la introducción), tiene interés describir las distintas posibilidades. Lo haremos a continuación, partiendo siempre de la base de que el hielo amorfo estaba presente en los núcleos cometarios, comparando las tasas de cristalización obtenidas por nuestro modelo con las velocidades de erosión que acabamos de describir. En las Figs. 3.6 y 3.7 aparecen representadas las tasas medias de cristalización frente a la inercia térmica agrupadas por energías liberadas y temperaturas iniciales, así como las tasas de erosión TEA, TEM, TEB y la promedio del Tempel 1.

En primer lugar, vamos a comparar todas nuestras tasas de cristalización con las de erosión en el caso del cometa Tempel 1. Como hemos visto, la velocidad máxima es del orden de 50 metros por órbita, bastante por encima de las que hemos clasificado como TEA. En este caso, únicamente tendríamos una cristalización más veloz que la erosión para un núcleo rico en hielo, con una inercia térmica alta y una cristalización puramente exotérmica cuando la temperatura interior es elevada. En esta situación, la tasa de cristalización sería más del doble que la de

erosión, de modo que si el período orbital fuese el del Tempel 1, tras una sola órbita tendríamos el frente de cristalización a unos 80 metros de profundidad. Si consideramos la erosión promedio de Tempel 1, la cristalización únicamente es comparable a la erosión para inercias térmicas bajas, siendo considerablemente más veloz que la erosión en los demás casos. En el caso de núcleos ricos en hielo, además, debería tratarse de una cristalización energéticamente neutra para que tras una órbita el frente esté a unos decímetros de la superficie, ya que cuando la energía liberada es alta el frente de cristalización pasaría a alejarse de la superficie a unos 5 metros por órbita. Para núcleos con una cantidad moderada o elevada de polvo, en los casos en los que la inercia térmica es baja, el frente de cristalización se mantendría a profundidad menor de medio metro después de una órbita. Tras estas consideraciones, queda claro que el rango de posibilidades para encontrar o no hielo amorfo a poca profundidad en los núcleos cometarios es amplio, de modo que tener en cuenta la velocidad local de erosión así como sus variaciones temporales puede tener gran impacto en los resultados obtenidos. Sin embargo, los datos en cuanto a ablación de superficies nucleares debido a la actividad son tremendamente escasos, de modo que un análisis de las propiedades medias es lo mejor que se puede hacer con la información disponible. A continuación, pasaremos a analizar las diferentes posibilidades de localización del frente de cristalización según la erosión siga la TEA, TEM o TEB para cada una de las diferentes razones polvo hielo, centrándonos por lo tanto en las Figs. 3.6 y 3.7. En la discusión siguiente, al igual que en la que acabamos de terminar, consideraremos la profundidad a la que quedaría el frente de cristalización tras una órbita, que será también equivalente a la del Tempel 1.

En la figura 3.6 se pueden ver las tasas medias de cristalización frente a la inercia térmica para el caso de un núcleo rico en hielo, esto es, con una razón polvo-hielo de 0.1. En el caso de una erosión con TEA, únicamente los núcleos con inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  cuya cristalización fuese puramente exotérmica tendrían tasas de cristalización mucho mayores que las de la erosión, a la que sacaría más de 50 metros por órbita. Así, en el resto de los casos habría posibilidades de encontrar hielo amorfo relativamente cerca de la superficie. En el caso de que la erosión siguiese la TEM, los núcleos con inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  sufrirían una cristalización más rápida que la erosión, de modo que incluso en el caso de que la cristalización fuese energéticamente neutra el frente le sacaría un promedio de unos 10 metros por órbita a la superficie. Para una inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  los núcleos con una cristalización exotérmica tendrían el frente de cristalización a una media de aproximadamente 3 metros de profundidad tras una órbita, y en el caso de una cristalización energéticamente neutra ambas velocidades serían aproximadamente del mismo orden, de modo que sería probable encontrar hielo amorfo cerca de la superficie. En el caso de la TEB, en todos los casos la tasa de cristalización es más elevada que la de erosión, aunque en el caso de inercia térmica baja y de cristalización neutra el frente de cristalización estaría únicamente a medio metro de profundidad en una órbita.

El panel superior de la fig. 3.7 nos presenta un caso análogo al de la Fig. 3.6



pero para una razón polvo-hielo de 1, que representa un núcleo con una cantidad moderada de polvo. En caso de que un núcleo tal erosionase a una velocidad dada por la TEA, el único caso en el que el frente de cristalización avanzaría más rápido que la erosión de la superficie sería el de inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  y cristalización exotérmica. En esta situación el frente de cristalización quedaría a una profundidad aproximada de 15 metros tras una órbita. En el resto de los casos, la erosión dada por la TEA avanza lo suficientemente rápido como para que el frente de cristalización se mantenga cerca de la superficie. De un modo parecido, el único grupo de simulaciones con inercia térmica de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  cuya cristalización es más rápida que la erosión TEM es el de temperatura interna de 70 K y energía liberada en la cristalización elevada, y en ese caso el frente de cristalización se alejaría de la superficie a una tasa de aproximadamente 3 m/órbita. En los casos de inercia térmica  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  el frente de cristalización se alejaría de la superficie a más de 5 m/órbita de media. Comparando ahora la cristalización de un núcleo con una razón polvo hielo moderada con la erosión TEB, también la velocidad de cristalización sería mayor que la de erosión en todos los casos y sólo para cristalizaciones energéticamente neutras e inercias térmicas de  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  el frente de cristalización avanzaría a una velocidad aproximada de medio metro por órbita respecto a la superficie del cometa.

Finalmente, en el panel inferior de la Fig. 3.7 podemos ver el caso de un núcleo rico en polvo, con una razón polvo-hielo de 20. Si la erosión superficial ocurriese dentro del rango de la TEA, su velocidad sería en todos los casos superior a la de la de cristalización, de modo que habría grandes posibilidades de encontrar hielo amorfo cerca de la superficie. Para las inercias térmicas altas, la cristalización procedería más rápido que la TEM, aunque tras una órbita el frente se encontraría a menos de 10 m de profundidad. Para inercias térmicas bajas, la erosión TEM permitiría que hubiese hielo de la superficie. Finalmente, sólo los casos con inercia térmica y temperaturas internas más bajas tendrían una cristalización más lenta que la TEB, aunque aquellos con temperatura interna más elevada pero inercia térmica baja tendrían el frente de cristalización a aproximadamente medio metro de profundidad. En esta figura, se observa claramente que las magnitudes que influyen en la velocidad media del frente de cristalización en los núcleos ricos en polvo son aquellas que modifican las características térmicas globales del sistema, a saber: la inercia térmica y la temperatura interna inicial del núcleo.

### 3.5. Conclusiones

Con este trabajo perseguíamos, principalmente, estudiar la evolución del frente de cristalización en un cometa simulando unas circunstancias en las que los principales procesos energéticos involucrados serían la difusión del calor y la cristalización. Motivados inicialmente por el hecho de que se sospecha la detección de hielo amorfo en la coma de algunos cometas (por ejemplo Hale-Bopp, como describimos en la introducción) y ante la incertidumbre que afecta tanto a las principales

magnitudes describiendo la naturaleza cometaria (e.g. razón polvo-hielo, inercia térmica) como al propio proceso de cristalización (energía liberada en la cristalización), el objetivo último de este estudio era comprobar la influencia de dichas magnitudes en el sistema y determinar qué circunstancias físicas (de haberlas) permitirían la subsistencia de hielo amorfo relativamente cerca de la superficie.

Antes de describir los resultados del estudio en relación al objetivo principal habría que mencionar lo que sería un resultado inesperado del trabajo realizado: la observación, imprevista hasta ahora, de la existencia de rachas de cristalización cuasiperiódicas. La evolución del frente de cristalización en rachas cuasiperiódicas podría ser la explicación a pequeñas explosiones de actividad periódicas observadas en cometas como el Tempel 1. Como se ha descrito a lo largo del capítulo, estas rachas de actividad se deben a la acumulación de energía en el frente de cristalización dada la capacidad aislante del hielo amorfo, que impide la difusión de energía hacia el interior del núcleo. Si las explosiones de actividad detectadas en cometas como el Tempel 1 se deben a la presencia de hielo amorfo en el interior del núcleo y a que el frente de cristalización evoluciona en rachas cuasiperiódicas, las simulaciones realizadas constriñen bastante el espacio de parámetros que describiría la naturaleza cometaria. Para que esas rachas de cristalización sean las responsables de las explosiones de actividad, los núcleos cometarios deben ser ricos en hielo (tener una razón polvo-hielo del orden de 1 o inferior), una inercia térmica relativamente pequeña (del orden de  $100 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  o menor) y la energía neta liberada en la cristalización debe ser superior a  $4.5 \times 10^{-4} \text{ J kg}^{-1}$ . Dentro de estos intervalos, las características concretas del núcleo afectan al período de las rachas de actividad, que puede variar desde el orden de 1 día a varios meses. Simplemente como ejemplo, y siembre bajo la suposición de que la cristalización del hielo amorfo es la responsable de las miniexplosiones de actividad periódicas observadas en el cometa Tempel 1, si la razón polvo-hielo de ese cometa fuese 1 y su inercia térmica baja (en torno a  $20 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ ), la densidad necesaria para que las rachas ocurran con un período del orden de las semanas (que es el de las detectadas en A'Hearn et al. 2005) estaría en torno a los  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , valor que sería compatible con la densidad determinada por Thomas et al. (2007) y Davidsson et al. (2007). Otras circunstancias también serían posibles. Considerando la densidad de  $400 \text{ kg m}^{-3}$ , inercias térmicas mayores de  $20 \text{ W K}^{-1}\text{m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  son posibles siempre que la razón polvo hielo sea inferior a 1.

Respecto a los objetivos planteados al inicio del estudio, es conveniente distinguir entre lo que son resultados que afectan a la simple simulación de la evolución termofísica de núcleos cometarios de los que estarían relacionados con su naturaleza.

En relación a la modelización, los principales resultados obtenidos de las simulaciones realizadas teniendo en cuenta la incertidumbre asociada a las magnitudes que definen la naturaleza de los núcleos cometarios son:

1. El efecto de la energía liberada en la cristalización en la evolución neta del frente de cristalización (cuantificada como el factor entre la tasa media de una cristalización exotérmica y una energéticamente neutra) es independiente de la

inercia térmica para las razones polvo-hielo consideradas en este estudio. La consecuencia inmediata de esto es la posible generalización de medidas obtenidas en laboratorio así como la simplificación de la parametrización de la energía liberada en la cristalización en la modelización de la evolución termofísica cometaria.

2. Si la razón polvo-hielo es alta, superior a 5, la energía liberada en la cristalización no juega ningún papel relevante en la evolución neta del frente de cristalización. De nuevo, este resultado simplificaría la modelización de la evolución termofísica si, finalmente, se confirmase que los núcleos cometarios están compuestos mayoritariamente por polvo.

3. Si la razón polvo-hielo es baja, la evolución del frente de cristalización depende fuertemente de las suposiciones realizadas en la energía liberada en la cristalización. El frente de cristalización de un núcleo muy rico en hielo cuando la energía liberada en la cristalización considerada es la del hielo amorfo puro podría evolucionar hasta 30 veces más rápido que el mismo núcleo si se asume que la energía liberada en la cristalización se invierte en la desorción de volátiles atrapados. Este resultado sugiere cautela en la comparación e interpretación de resultados obtenidos con modelos utilizando diferentes energías liberadas en la cristalización.

Para establecer las posibilidades que este estudio nos ofrece para reducir la incertidumbre asociada a las magnitudes que definen la naturaleza de los cometas se hace necesario comparar las velocidades netas de cristalización con las velocidades de erosión. Si se considera que la emisión de granos helados en estado amorfo, como se ha observado en algunos cometas, se debe a la existencia de hielo amorfo en el interior del núcleo y que éste reside relativamente cerca de la superficie, sería necesario que la velocidad media de evolución del frente de cristalización fuese similar o inferior a la velocidad de erosión. Desafortunadamente, la velocidad de erosión también está afectada por una gran incertidumbre, lo que hace que cualquier discusión o conclusión sea, en principio, especulativa.

Empezando por lo que hemos denominado TEB,  $1.85 \times 10^{-5}$  m día<sup>-1</sup>, si la tasa de erosión cometaria real es de ese orden, no habría posibilidad de encontrar hielo amorfo cerca de la superficie de ningún cometa salvo al principio de su actividad. Los sucesivos pasos orbitales eliminarían todo trazo de hielo amorfo presente en los núcleos.

Si la tasa de erosión es la calificada como TEM, en torno a  $3 \times 10^{-5}$  m día<sup>-1</sup>, las posibilidades de encontrar hielo amorfo relativamente cerca de la superficie exigen una inercia térmica muy baja, en torno a los  $20 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ , no pudiendo establecerse límites a magnitudes como la razón polvo-hielo, densidad, etc.

Dentro de la incertidumbre en la tasa de erosión creemos que es posible conferir una mayor confianza a la determinación más reciente, la estimada observacionalmente en zonas de actividad de la superficie de Tempel 1,  $2.5 \times 10^{-2}$  m día<sup>-1</sup>, valor que estaría ligeramente por encima del rango de valores definidos como TEA. Esa confianza se basaría en que, por un lado, esa tasa se ha determinado a partir de las imágenes de alta resolución de la superficie tomadas por los instrumentos de las misiones espaciales Deep Impact y Stardust NeXT, es decir, no se involucran modelos sobre la producción en los cálculos. Por otro lado, esa tasa no sería un

promedio superficial (que estaría por debajo de la TEM), sino que correspondería a la que se obtendría en regiones de alta actividad y, en principio, relacionadas con la producción. Considerando ese valor como tasa de erosión, existe un gran número de circunstancias físicas que permitirían encontrar hielo amorfo cerca de la superficie. Prácticamente, las únicas circunstancias que quedarían excluidas serían que la inercia térmica sea superior a  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  si la razón polvo hielo es muy baja (en torno a 0.1), la cristalización es puramente exotérmica y el interior es relativamente caliente. Si la razón polvo-hielo es mayor o la cristalización invierte energía en la desorción de volátiles sería posible aumentar el límite a la inercia térmica.

Es importante hacer notar que la erosión determinada en Tempel 1 nos deja un espacio de parámetros en el que la presencia de hielo amorfo cerca de la superficie sería compatible con la suposición de que las explosiones de actividad deben estar generadas por las rachas de actividad observadas en la evolución del frente de cristalización. Este espacio de parámetros, que nos ofrecería la posibilidad de explicar los hechos observacionales como debidos a la presencia del hielo amorfo, sería que la inercia térmica debe ser del orden de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  o inferior y la razón polvo hielo del orden de 1 o menor, siempre que la energía liberada en la cristalización sea superior a  $45 \text{ KJ kg}^{-1}$ . Este resultado, junto con la observación de la existencia de rachas cuasiperiódicas en la evolución del frente de cristalización, entendemos que son los principales resultados de este estudio.

Habiendo obtenido que existe un espacio de parámetros, dentro de la incertidumbre asociada a las magnitudes que caracterizan la naturaleza de los núcleos cometarios, que nos garantizarían la supervivencia del hielo amorfo en los núcleos cometarios si éste estuviese presente durante su formación y que, además, ese espacio de parámetros nos podría proporcionar una explicación razonable para dos hechos observacionales (explosiones de actividad y emisión de granos de hielo amorfos) entendemos que:

1. Es necesario reevaluar la evolución del frente de cristalización en núcleos cometarios. Esto constituye la base de los siguientes capítulos donde aumentaremos el grado de realismo en la simulación de la evolución termofísica intentando explicar los comportamientos de dos cometas, el 29P y el Hale-Bopp, cuyas observaciones podrían mostrar indicios de la presencia de hielo amorfo, según lo obtenido en este estudio.

2. Es necesaria la realización de experimentos de laboratorio con muestras grandes de hielo amorfo co-depositado con distintos dopantes para confirmar, establecer o constreñir en circunstancias realistas la energía liberada en la cristalización.

## Capítulo 4

# Aplicación del modelo al cometa 29P/Schwassman-Wachmann 1

### 4.1. Introducción

El objeto 29P/Schwassmann-Wachmann 1 (en adelante 29P/SW 1 o simplemente 29P) fue descubierto en 1927 (ver, e.g. Hughes 1990). 29P/SW1 es, en cierto modo, singular incluso en su clasificación. Así, el parámetro de Tisserand de 29P/SW1 ( $T_j=2.983$ ) lo definiría como cometa eclíptico mientras que sus parámetros orbitales permiten clasificarlo como Centauro según la definición dada por Jewitt y Kalas (1998). Aunque esta doble clasificación se debe en realidad a la inconsistencia de los criterios elegidos para definir distintas familias de cuerpos menores, una interpretación en positivo sugeriría que efectivamente los Centauros son cometas en transición desde el Cinturón de Kuiper a la parte interna del Sistema Solar, al ser capturados por Júpiter. Esa es una de las razones principales del interés en el estudio de este objeto.

29P/SW1 se mueve en una órbita de baja excentricidad, casi circular, con un período orbital de aproximadamente 15 años y un semieje mayor de aproximadamente 6 UA (ver parámetros orbitales en la Tabla 4.1). Esta órbita presenta un perihelio que está sólo a 0.3 UA del afelio de Júpiter y, por tanto, es bastante probable que en el futuro sea perturbada, convirtiéndose en una órbita mucho más excéntrica que recorra la parte interna del Sistema Solar, como la de los cometas.

Además de por sus características orbitales, este cometa es singular por su actividad. A pesar de que orbita a una distancia del Sol relativamente alta, 29P muestra coma de forma permanente y una actividad relativamente alta, con un gran número de explosiones que se superponen a un continuo de producción tanto de material volátil como refractario. De hecho, se piensa que su descubrimiento pudo tener lugar durante una explosión ( Hughes 1990). En la imagen 4.1 se puede observar la emisión térmica infrarroja del 29P/SW 1, procedente principalmente

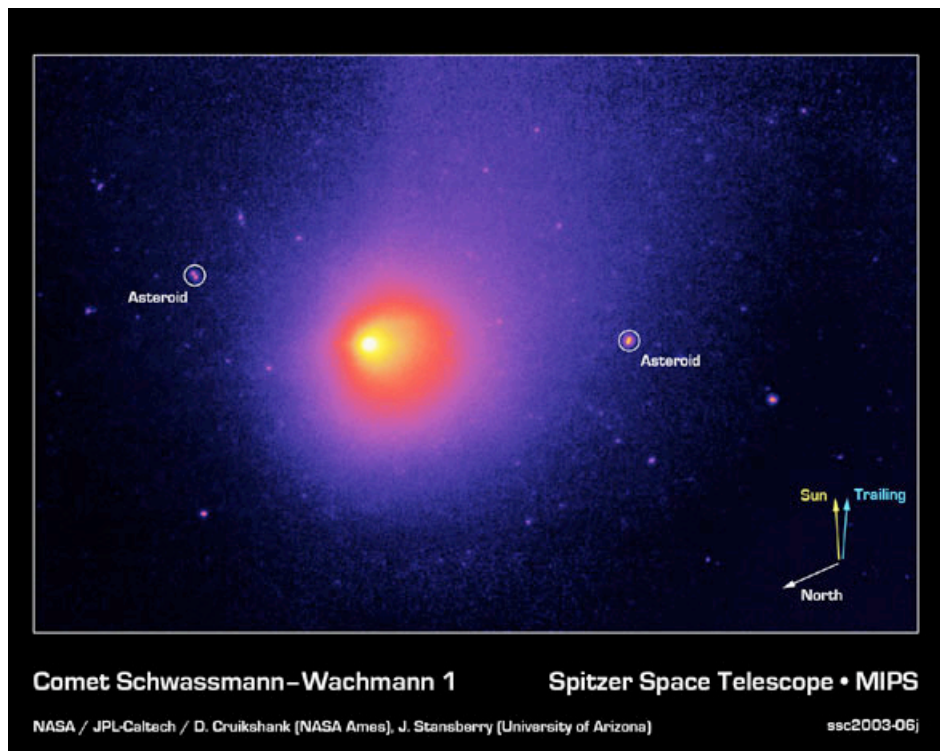
**Cuadro 4.1:** Parámetros orbitales del 29P, tomados de la solución más reciente proporcionada en su base de datos por el *Jet Propulsion Laboratory (NASA)* (Sistema *Horizons*)

Parámetro	Valor	Unidades
Semieje Mayor	6	UA
Excentricidad	0.044	–
Inclinación eclíptica	9.38	°
Longitud del nodo ascendente	312.57°	
Argumento del perihelio	50.50	°
Período	14.69	años
Distancia al Sol en el perihelio	5.73	UA

del polvo de la coma.

Esas características singulares son las que hacen de 29P un objeto de estudio no sólo interesante sino necesario. Este objeto puede permitirnos avanzar en la comprensión de los procesos físico-químicos que tienen lugar en los núcleos cometarios así como en el conocimiento de su composición y características estructurales. Ello es porque, por un lado, su carácter como Centauro nos sugiere que su evolución termofísica es todavía, presumiblemente, reducida (especialmente comparado con los cometas de la familia de Júpiter, más evolucionados). Por otro lado, su actividad constituye un laboratorio en el que verificar los modelos termofísicos propuestos. Se piensa esto porque, a priori, la actividad de este cometa no puede estar dominada por la sublimación de agua. Al estar relativamente alejado del Sol, la energía recibida no es suficiente para calentar el cuerpo hasta una temperatura donde la sublimación del agua permita una coma persistente. Esto se puede mostrar, de manera muy aproximada, a partir de una simple estimación de la temperatura superficial. Considerando nuestro conocimiento actual de los cometas, uno constituido sólo por material refractario en equilibrio térmico que se moviese en la órbita del 29P/SW 1 tendría una temperatura superficial que oscilaría, aproximadamente, entre los 157 K cuando está en el afelio y los 165 K en el perihelio, temperaturas que en realidad serían inferiores si parte de la energía absorbida se invirtiese en la sublimación de hielos superficiales.

Estimando la producción de agua mediante la expresión de Hertz-Knudsen (ver eq. 2.13) se obtendría que 29P/SW 1 liberaría aproximadamente una cantidad de agua del orden de  $10^{25}$  molec s<sup>-1</sup>. Suponiendo que se produjese tanto polvo (material refractario) como agua, se liberaría menos de 0,5 kg s<sup>-1</sup> de polvo, cantidad muy por debajo del límite inferior que se estima a partir de modelos montecarlo de la coma del 29P, el cual es, aproximadamente, tres órdenes de magnitud superior al valor mencionado (ver e.g. Moreno 2009 y descripciones más adelante). En conclusión, no es plausible que la actividad del 29P esté controlada por el agua.



**Figura 4.1:** Imagen obtenida por el telescopio espacial Spitzer, que es un telescopio infrarrojo lanzado en agosto de 2003. La imagen corresponde a la emisión en  $24 \mu\text{m}$  obtenido con el fotómetro de imagen multibanda y muestra emisión térmica infrarroja de la coma polvorienta y la cola del cometa. Créditos: Dale Cruikshank, I. P. (NASA Ames Research Center), John Stansberry, I. P. (Universidad de Arizona), William Reach (SSC/Caltech), Yanga Fernández (Universidad de Hawaii), Michael Werner (JPL/Caltech), George Rieke (Universidad de Arizona), Vikki Meadows (JPL & SSC/Caltech).

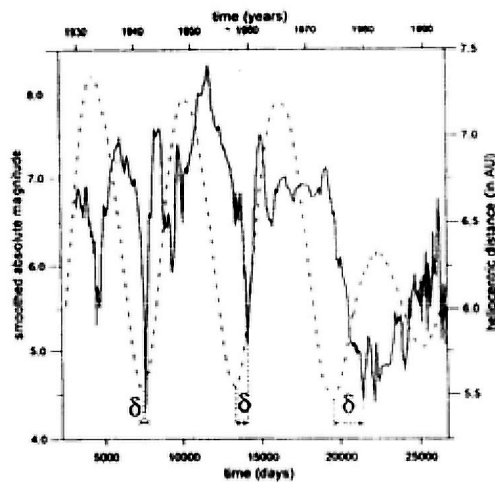
## 4.2. Motivación para realizar este estudio

El hecho del que la actividad de 29P esté dominada por un componente más volátil que el agua y que, por tanto, su frente de sublimación retroceda con respecto al del agua, nos ofrece la posibilidad de investigar los efectos del transporte de energía y masa en el interior del núcleo. Como se ha mostrado anteriormente, la temperatura superficial estimada para 29P/SW 1 nos indica, por un lado, que el impacto energético de la sublimación de hielo cristalino es mínimo. Por otro, la temperatura, conforme la onda térmica penetra en el interior del núcleo, es suficientemente alta para producir tanto la sublimación de elementos volátiles del interior como la cristalización del hielo amorfo si estuviera presente (como es nuestra hipótesis) en escalas de tiempo relativamente cortas. Si a la circunstancia descrita se le añade el hecho de que, como ha sido mencionado anteriormente, la actividad del 29P está caracterizada por la ocurrencia de frecuentes explosiones de actividad, el cometa 29P/SW 1 es, por tanto, ideal desde el punto de vista térmico para la aplicación del modelo propuesto al estudio de los posibles efectos derivados de la presencia de hielo amorfo en el interior del núcleo. Este estudio se puede considerar, por tanto, una ampliación del estudio descrito en el capítulo anterior aplicando el modelo a un caso real que nos impone restricciones derivadas de las observaciones. Contrastar los resultados del modelo con las observaciones relacionadas con el 29P nos permitirá, por un lado, verificar si las hipótesis contenidas en el modelo son razonables o, dicho de otra manera, si representan una descripción, al menos de primer orden, de los principales procesos físicos que afectan a la naturaleza cometaria. Por otro, la utilización del modelo, si es capaz de reproducir el comportamiento básico del 29P, nos puede proporcionar límites a algunas de las principales magnitudes características de los cometas que actualmente presentan una gran incertidumbre, según se describió en el capítulo 1.

## 4.3. Actividad de 29P

Uno de los primeros estudios más o menos completos sobre la caracterización de la actividad de 29P fue realizado por Cabot et al. (1996). Estos autores compilaron aproximadamente 1300 magnitudes de 29P obtenidas desde su descubrimiento, cubriendo así un período de unos 70 años, tal y como se muestra en la figura 4.2. Esa compilación nos da una idea del carácter aparentemente errático de la actividad de 29P. Cabot et al. (1996) realizaron un análisis de armónicos de los datos a partir de 1986, unas 650 observaciones incluyendo varios períodos de meses con una resolución temporal relativamente alta (2 días). El análisis de la serie temporal no mostraba ninguna periodicidad significativa. Del análisis de los datos, los autores también concluyeron que existía cierta correlación con la distancia heliocéntrica, indicando que el máximo de la actividad se obtenía un tiempo después del perihelio. Este retraso iría aumentando con cada paso por el perihelio lo que es, en principio, causado por el tiempo de penetración de la onda térmica





**Figura 4.2:** Figura tomada de Cabot et al. (1996) en la que se muestra la evolución de la magnitud absoluta promediada utilizando una caja de 30 valores (línea continua) en función del tiempo. La figura nos da una idea del carácter aparentemente errático de la actividad de 29P. Según Cabot et al. (1996) en ella se puede ver cierta correlación entre la órbita (línea de rayas) y la actividad, mostrando el máximo de la última un cierto retraso tras el perihelio.

y, por tanto, una indicación de una inercia térmica no nula.

Con respecto a la producción de volátiles, los cálculos simples correspondientes a la producción de agua mostrados anteriormente encuentran respaldo en observaciones existentes. A partir de observaciones radioespectroscópicas se ha podido establecer un límite superior a la producción de agua, ya que ésta no ha podido ser detectada. La producción de agua debe ser inferior a, aproximadamente,  $10^{28}$  molec  $s^{-1}$  (ver, e. g. Enzian et al. 1997 y referencias ahí, Gunnarsson et al. 2002). Por el contrario sí se ha podido detectar la molécula de monóxido de carbono estimándose la producción media en  $2\text{-}5 \cdot 10^{28}$  molec  $s^{-1}$  (Senay y Jewitt 1994, Crovisier et al. 1995). Por ello se piensa que el monóxido de carbono es el principal conductor de la actividad del 29P.

Las observaciones radio del monóxido de carbono realizadas por Crovisier et al. (1995) mostraban un perfil de dos picos con intensidades y velocidades diferentes con respecto al núcleo. Esto se interpretó como emisión debida a la expansión del monóxido de carbono emitido desde el núcleo. Los perfiles así interpretados sugerían una mayor componente de emisión hacia el observador y el Sol pero también la presencia de una emisión de monóxido de carbono procedente del lado nocturno del cometa. Una característica importante es que esos perfiles mostraban cierta estabilidad durante todo el período de observaciones realizado por Crovisier et al. (1995) que cubría desde Mayo a Octubre de 1994, cuando el 29P estaba relativamente cerca de su afelio. A partir de las velocidades de expansión y suponiendo

que la coma de monóxido de carbono se comporta hidrodinámicamente como una coma de  $\text{H}_2\text{O}$ , Crovisier et al. (1995) estimaron que la temperatura de emisión del monóxido de carbono desde la superficie del núcleo debía ser, aproximadamente, 100 K para la componente procedente de la zona diurna del cometa y unos 40 K para la procedente de la zona nocturna. La emisión diurna muestra una temperatura superior a la de sublimación del monóxido de carbono por lo que eso fue interpretado como que la sublimación debe ocurrir debajo de la superficie, siendo el gas calentado (termalizado) mientras difunde hacia el exterior. Hay que decir que esta conclusión apoya la suposición de equilibrio térmico que hacemos en nuestro modelo.

Las líneas de emisión del monóxido de carbono detectadas en observaciones de radio realizadas en distintas épocas por Festou et al. (2001), Gunnarsson et al. (2002) y Gunnarsson et al. (2008) también presentan una forma asimétrica, indicativa, como en el caso de Crovisier et al. (1995), de que la mayoría de las moléculas son liberadas hacia el Sol pero con una componente antisolar no despreciable. Inicialmente, las observaciones realizadas en 1996 (Festou et al. 2001), se explicaron de la misma forma que Crovisier et al. (1995), es decir, que la emisión del monóxido de carbono procedía principalmente del lado iluminado pero con una componente significativa emitida desde el lado nocturno del cometa. Se estimó que esta última componente era, aproximadamente, 1/4 la de la zona iluminada. Posteriormente, considerando también observaciones de 1998, se interpretó que la emisión de monóxido de carbono podría ser debida a su producción desde fuentes extendidas en la coma (Gunnarsson et al. 2002, Gunnarsson 2003). Sin embargo, las circunstancias físicas requeridas para esa producción desde fuentes distribuidas resultaron ser muy exigentes. En primer lugar, a las fuentes distribuidas correspondería una producción de monóxido de carbono mayor que la nuclear. Además, se requería que el monóxido de carbono fuese liberado a una distancia cometocéntrica concreta (aproximadamente  $10^5$  km) para lo que se propuso que el monóxido de carbono era liberado desde granos de hielo de agua cristalino. Esos granos de hielo, para que la liberación del monóxido de carbono tuviese lugar a la distancia requerida, debían ser prácticamente monodispersos, relativamente densos y tener una cantidad concreta de material absorbente para reducir la temperatura de sublimación del agua (Gunnarsson, 2003). Estos requerimientos tan concretos hacen que el escenario de la producción extendida de monóxido de carbono sea improbable y, en el mejor de los casos, dejaría abiertas algunas cuestiones difíciles de explicar. Entre ellas, por ejemplo, justificar la producción de monóxido de carbono a partir de la sublimación del agua cristalina sin que ésta haya sido detectada o el hecho de que la cantidad de polvo determinada observacionalmente (ver más adelante) sea insuficiente para justificar la producción extendida de monóxido de carbono. Observaciones posteriores, realizadas en 2003 y 2004 (Gunnarsson et al. 2008) no eran compatibles con la producción desde fuentes extendidas. Esto llevó a los mismos autores a concluir que las fuentes extendidas que explicarían las observaciones de 1996 y 1998 podrían, en realidad, corresponder a una circunstancia extraordinaria. En ese último trabajo se retomó la posibilidad de que parte del monóxido

de carbono procediese de la zona nocturna, estimándose que esta producción debía ser entre 1/4 y 1/5 la de la zona iluminada (valores que eran compatibles con las estimaciones realizadas a partir de las observaciones de 1996).

Respecto a la producción de otros volátiles, Gunnarsson et al. (2002) intentaron detectar HCN y CH<sub>3</sub>OH, infructuosamente. Korsun et al. (2008) publicaron la detección de N<sub>2</sub><sup>+</sup> con una razón de 0.011 frente al monóxido de carbono.

La producción de polvo ha sido estimada tanto por Jewitt (1990) como por Stansberry et al. (2004) utilizando descripciones analíticas simples de la coma. Ambas estimaciones sugieren una producción de polvo por debajo de los 50 kgs<sup>-1</sup>. Modelos más sofisticados, basados en técnicas montecarlo para la inversión de imágenes ópticas de la coma del 29P/SW 1 (Fulle 1992, Moreno 2009), nos proporcionan valores de la producción de polvo posiblemente más realistas. Estos dos últimos estudios estiman que la producción de polvo de 29P/SW 1 está entre 300 y 900 kgs<sup>-1</sup>, aunque esos valores podrían, en realidad, ser límites inferiores ya que los rangos espectroscópicos de las observaciones favorecen la detección de intervalos de tamaños de partículas concretos y finitos.

#### 4.3.1. Explosiones de actividad

Como ya se ha mencionado, una de las características de la actividad del 29P es la ocurrencia de explosiones de actividad, aumentos repentinos de su brillo, frecuentemente calificadas como impredecibles. Una de las primeras compilaciones sobre las explosiones que sufría 29P fue realizada por Richter (1941). Considerando observaciones que cubrían un período de unos 12 años, Richter (1941) pudo detectar unas 11 explosiones de actividad, es decir, una tasa de una por año. Cook et al. (2005) también sugiere una tasa de explosiones de una o dos por año, pero no proporciona referencia a datos concretos por lo que es posible que se base en las estimaciones de Richter (1941). Con respecto a su magnitud, Cook et al. (2005) refiere a Roemer (1958) para indicar que, al principio de su descubrimiento, cambios de brillo entre 5 y 8 magnitudes eran probables. Actualmente esos cambios tan grandes no parecen probables y Trigo-Rodríguez et al. (2008), quienes han realizado un estudio sistemático y prolongado de la actividad del 29P no han detectado aumentos de actividad mayores de 4 magnitudes. El estudio de Trigo-Rodríguez et al. (2008) ha permitido caracterizar y cuantificar de forma más completa las explosiones. Así, en una primera fase pudieron detectar 28 explosiones en 1400 días de observaciones realizadas durante un período de 6 años. Esto llevó a Trigo-Rodríguez et al. (2008) a estimar que durante el período 2002-2007, 29P sufría unas 7.3 explosiones por año con un incremento de brillo superior a 1 magnitud. Esto equivaldría a unas 110 explosiones por órbita, cantidad significativamente mayor que las detectadas anteriormente, lo que se podría explicar por el seguimiento casi continuo durante un largo período de tiempo. Estos resultados fueron confirmados en una segunda fase (Trigo-Rodríguez et al. 2010), donde se detectaron 11 explosiones en 217 noches en el período 2008-2010. La figura 4.3 es una reproducción de la Figura 1 de Trigo-Rodríguez et al. (2010), en la que se

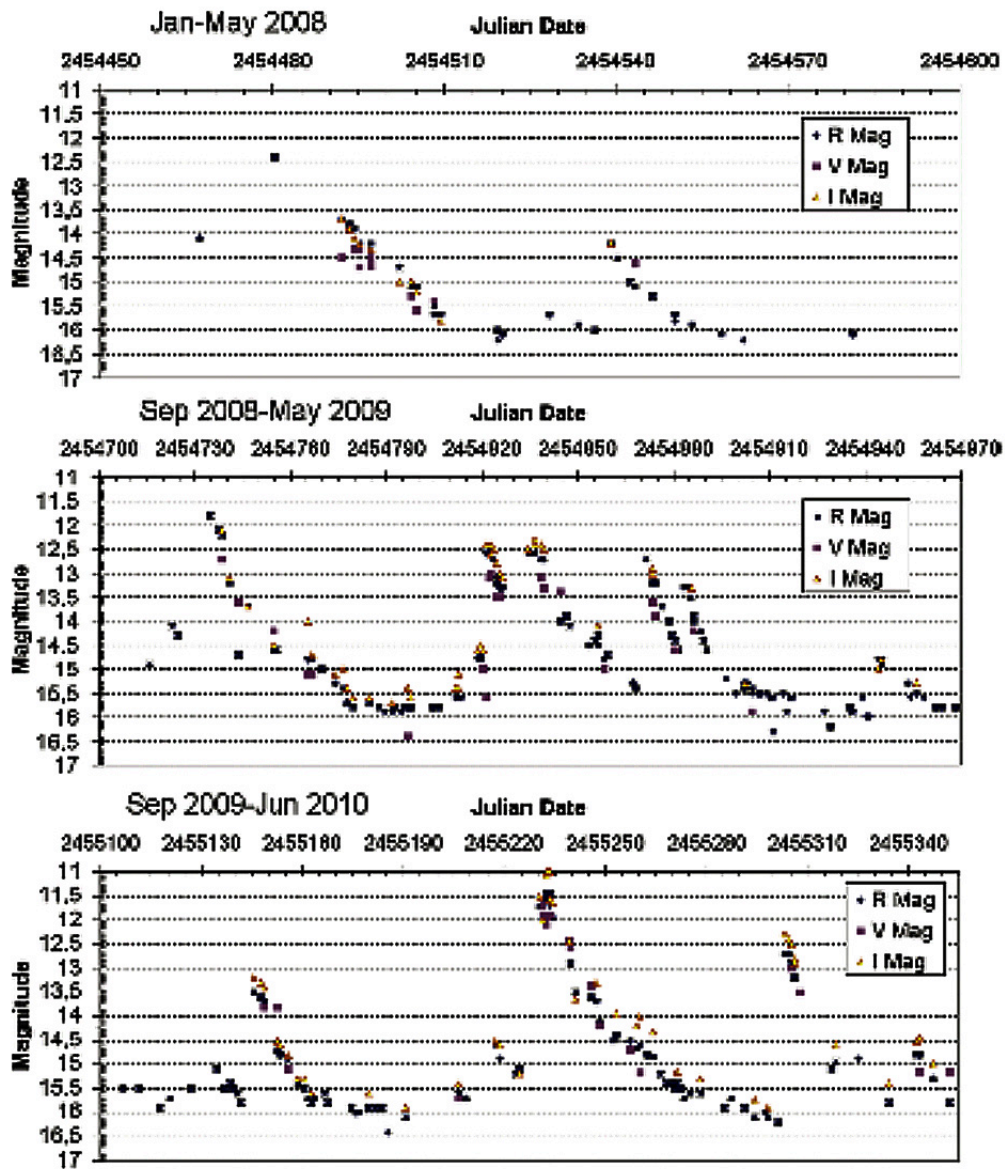
pueden ver las características de las explosiones de actividad detectadas.

Trigo-Rodríguez et al. (2010) también analizaron la serie fotométrica con la técnica de minimización de la dispersión de fase. Estos autores encontraron, en sus palabras, una clara periodicidad de 50 días la cual, de nuevo según los autores, resulta totalmente consistente con el número de 7.3 explosiones por año. Esta periodicidad fue, por tanto, interpretada como el período de rotación del cometa, con la puntualización de que en realidad el período de rotación podría ser un múltiplo de esa cantidad. Con esta idea en mente, Trigo-Rodríguez et al. (2010) propusieron, como única posibilidad, que las explosiones de actividad observadas en el 29P se deben, simplemente, a la iluminación periódica de una zona activa cuando el núcleo rota. Para explicar la forma que se observaba para la evolución del brillo, estos autores propusieron que tras la inyección masiva de partículas de polvo cuando la zona activa era iluminada se producía la sublimación de dichas partículas, que debían ser ricas en hielo y, posteriormente, se producía una progresiva fragmentación aumentando la densidad numérica de partículas de polvo submicrométricas.

La explicación proporcionada por Trigo-Rodríguez et al. (2008) no está exenta de problemas. Por un lado, la detección de una periodicidad de 50 días refleja probablemente justo el valor medio de ocurrencia de las explosiones, pero no se puede considerar justificación del período de rotación. No se puede hablar entonces de coincidencia y, por tanto, de justificación. Hay que decir, por un lado, que la interpretación de que la periodicidad detectada corresponde al período de rotación no encuentra apoyo directo en los estudios dedicados específicamente a la búsqueda de variabilidad rotacional en el 29P (ver secciones posteriores) y tampoco en el análisis masivo de datos que realizaron Cabot et al. (1996), que utilizaron conjuntos de observaciones que permitían detectar esa periodicidad. Por otro lado, en el capítulo anterior, nosotros mostramos que aumentos periódicos (o cuasi periódicos) de la velocidad de cristalización (que, en principio podrían relacionarse con la existencia de explosiones) pueden ser una consecuencia natural del propio proceso de cristalización. Es por ello que, en principio, sería posible que esa periodicidad estuviese relacionada con las características del núcleo y no necesariamente con su rotación (en nuestras simulaciones mostradas en el capítulo anterior, el sistema no rota y mostramos que la frecuencia de las rachas en la velocidad de cristalización dependía claramente de magnitudes como densidad, inercia térmica, etc.).

Otra posible crítica al modelo propuesto por Trigo-Rodríguez et al. (2008) vendría del trabajo de Gunnarsson et al. (2008), quienes mostraron la incompatibilidad de la emisión de monóxido de carbono con su producción desde fuentes distribuidas. Eso haría necesaria otra explicación para la evolución del brillo de las explosiones. Igualmente, la fragmentación de las partículas, necesaria para justificar un posible aumento del brillo mediante un aumento de la densidad numérica de partículas presentes en la coma, debería ir acompañada, posiblemente, de un cambio de color con la distancia al núcleo, cambio que, según nuestro conocimiento no ha sido detectado o, al menos, comunicado.

Respecto a las causas posibles de las explosiones de actividad, como hemos visto



**Figura 4.3:** Figura 1 de Trigo-Rodríguez et al. (2010) mostrando la evolución de la magnitud de 29P en función del tiempo

en la introducción, se han propuesto multitud de causas que se pueden consultar por ejemplo en el trabajo de Hughes (1990). El trabajo de Gronkowski (2005), analiza las posibles causas de las explosiones de actividad del 29P en concreto. En este trabajo el autor compara las hipótesis de polimerización del HCN, la influencia del viento solar, colisiones con meteoroides o asteroides y la cristalización del hielo amorfo. Gronkowski (2005) encuentra que la más probable de todas ellas es la transformación del hielo amorfo. Esto es coherente con el trabajo de Cabot et al. (1996), que concluye que en el caso de este cometa es improbable que las explosiones de actividad sean producto de colisiones con otros cuerpos.

#### 4.4. Modelos relacionados

La actividad del 29P fue simulada por Enzian et al. (1997), estudio que tomaremos como referencia básica en este capítulo. En este trabajo, el 29P fue simulado como un cuerpo esférico constituido por una matriz de polvo y hielo porosa a través de la cual puede difundir, utilizando una aproximación bidimensional, tanto el calor como el gas. Las principales innovaciones del modelo de Enzian et al. (1997) con respecto a modelos anteriores fueron dos. Por un lado consideraron los efectos de la rotación del núcleo, lo que constituía un gran paso respecto a modelos anteriores que podemos llamar “geométricos” al basarse en las aproximaciones del punto subsolar o del rotador rápido. Por otro, para la descripción de la difusión del gas a través de la matriz porosa utilizaron el método de Chapman-Enskog, lo que les permitía obtener coeficientes de transporte válidos para todos los posibles regímenes de difusión (ver capítulo 2). También consideraron, de manera aproximada, que la superficie del núcleo se erosionaba debido a la producción de gas y polvo, aunque no proporcionan detalles de cómo se lleva a cabo desde un punto de vista numérico y la descripción física resulta algo confusa. Intentaremos resumir su aproximación para la producción de polvo en secciones posteriores.

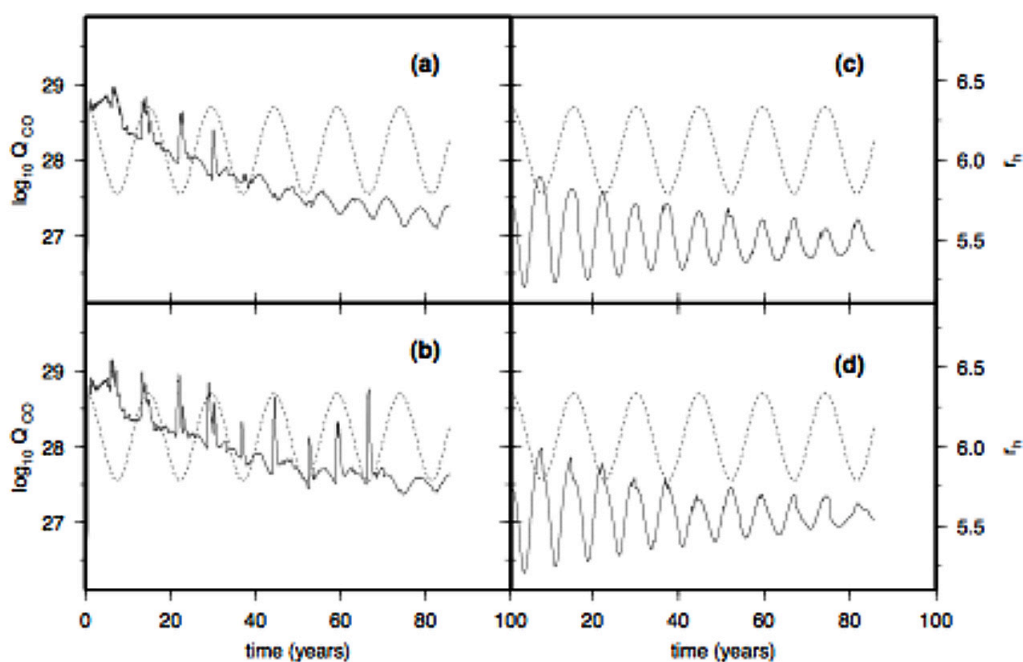
Con respecto a la estructura y composición del núcleo, Enzian et al. (1997) supusieron que éste era una mezcla íntima de polvo y hielo de agua amorfo enriquecido con monóxido de carbono, con una razón polvo-hielo inicial de 1. El hielo contenía un 10% (en fracción molar) de monóxido de carbono atrapado en la estructura del hielo amorfo y que, por tanto, se liberaba cuando se producía la cristalización. La cristalización seguía la ley de activación dada en Schmitt et al. (1989) (habitual de todos los modelos de núcleos cometarios y que presentamos en el capítulo dedicado a la descripción del modelo) y se consideró una reacción exotérmica en la que el cambio de entalpía neto asociado se reducía con la energía necesaria para la evaporación del volátil atrapado, considerado igual al calor latente de sublimación. Otros parámetros y circunstancias simuladas por Enzian et al. (1997) se describirán más adelante, al abordar la elección de los parámetros de nuestra simulación y se encuentran resumidos en la tabla 4.2 para una fácil comparación.

Enzian et al. (1997) consideraron como modelo nominal el de un núcleo com-

**Cuadro 4.2:** Tabla con los parámetros y características del modelo para nuestras simulaciones de 29P, comparando con los de Enzian et al. (1997). En negrita, los parámetros definiendo el modelo nominal

	Enzian et al. (1997)	Este trabajo
<b>General Modelo</b>		
Difusión calor	2D	1D
Medio poroso	Sí	Sí
Erosión	Sí	Sí
<b>General Núcleo</b>		
Forma	Esférica	Esférica
Radio (km)	10	<b>27</b>
Período de rotación (días)	10	<b>10</b>
Inclinación eje de rotación (°)	0,90	<b>90</b>
Argumento (°)	90	<b>90</b>
<b>Estructura y composición</b>		
$\frac{Q_d}{Q_{CO}}$	0.5	<b>0.5, 1, 0.25</b>
$\frac{Q_{icygrains}}{Q_{CO}}$	ver texto	<b>0.0</b>
Razón polvo-hielo	1	<b>1, 0.25, 5</b>
CO libre (% en masa)	17 % (10 % molar)	<b>10 %</b> , 5 %, 0 %
CO atrapado (% en masa)	17 % (10 % molar)	<b>10 %</b> , 5 %, 0 %
Porosidad inicial	0.68	<b>0.5, 0.68, 0.79</b>
Radio poro $\mu\text{m}$	1	<b>1</b>
Distribución de polvo	constante	constante
<b>Térmico</b>		
Albedo	0.05	<b>0.05</b>
Emisividad	0.9	<b>0.95</b> (1-albedo)
Energía neta de cristalización ( $\text{Jkg}^{-1}$ )	40000	<b>90000, 45000</b>
Calor específico hielo cristalino ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$7,49 \cdot T + 90$	<b>800</b>
Calor específico hielo amorfo ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$7,49 \cdot T + 90$	<b>800</b>
Calor específico hielo CO ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	2010	<b>2010</b>
Calor específico polvo ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$3 \cdot T$	<b>300</b>
Calor específico vapor $\text{H}_2\text{O}$ ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$\frac{3k_B}{m_{\text{H}_2\text{O}}}$	1610
Calor específico vapor CO ( $\text{Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	2010	
Calor latente de sublimación $\text{H}_2\text{O}$ ( $\text{Jkg}^{-1}$ )	$567/T$	$567/T$
Calor latente de sublimación CO ( $\text{Jkg}^{-1}$ )	$2,93 \cdot 10^5$	$2,93 \cdot 10^5$
Conductividad hielo cristalino ( $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$2,34 \cdot 10^{-3}T + 2,8 \cdot 10^{-2}$	$7,1 \cdot 10^{-5}T$
Conductividad hielo amorfo ( $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$2,34 \cdot 10^{-3}T + 2,8 \cdot 10^{-2}$	$7,1 \cdot 10^{-5}T$
Conductividad hielo CO ( $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	$2,34 \cdot 10^{-3}T + 2,8 \cdot 10^{-2}$	$7,1 \cdot 10^{-5}T$
Conductividad polvo ( $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	2	<b>2</b>
Factor Hertz	0.1	<b>0.01, 0.1</b>
Coefficiente condensación	$-2,1 \cdot 10^{-3}T + 1,042$ ( $T > 20$ K)	<b>0</b>
<b>Densidades (<math>\text{kgm}^{-3}</math>)</b>		
Núcleo	450	<b>450, 300, 700</b>
Polvo compacto	3000	<b>3000</b>
Hielo $\text{H}_2\text{O}$ compacto	920	<b>920</b>
Hielo CO compacto	920	<b>920</b>

puesto inicialmente por hielo amorfo, pero realizaron también simulaciones para estimar la producción de monóxido de carbono de un núcleo cristalino. Igualmente, también hicieron pruebas para comprobar el efecto de la erosión, eliminando esta capacidad en algunas de sus simulaciones. Finalmente, también estudiaron el efecto de la inclinación en el eje de rotación, eligiendo dos situaciones extremas: la de un cuerpo que rota con su eje perpendicular al plano orbital y la de otro que lo hace con el eje contenido en dicho plano. En ambos casos, se eligió un argumento del perihelio de  $90^\circ$ , lo que maximiza los efectos estacionales.



**Figura 4.4:** Figura tomada de Enzian et al. (1997) donde se muestran los resultados para una simulación de su modelo nominal (b) comparando con los resultados del mismo caso sin erosión (a) y con los de un núcleo constituido por hielo cristalino sin erosión (c) y con erosión (d). Estos resultados corresponden a simulaciones con el eje de rotación contenido en el plano orbital (oblicuidad  $90^\circ$ ). En el panel (b) pueden apreciarse lo que Enzian et al. (1997) identifican como explosiones de actividad, que ocurren esencialmente tanto en el afelio como en el perihelio. Ello se explica, de manera sencilla, por el argumento del perihelio elegido ( $90^\circ$ ), que maximiza los efectos estacionales. Los resultados para una oblicuidad de  $0^\circ$  (Figura 3 de Enzian et al. 1997) son prácticamente idénticos salvo por el comportamiento más suave que presentan las curvas de producción, desapareciendo lo que ellos denominan explosiones.

A partir de las simulaciones realizadas, Enzian et al. (1997) concluyen que los



resultados de su modelo nominal estaban en buen acuerdo con las tasas observacionales de monóxido de carbono y polvo, mencionando que se obtenían explosiones de actividad como era lo observado en este cometa. La mayor compatibilidad con las observaciones (ver figura 4.4) se obtenía para un núcleo constituido por hielo amorfo con un eje de rotación contenido en el plano orbital. Con respecto a las explosiones obtuvieron que incluso si la erosión era pequeña, era necesaria para que se produjese un régimen de explosiones debido a la cristalización.

En contra del optimismo manifestado por Enzian et al. (1997) con respecto a sus resultados hay que decir que, en nuestra opinión, las observaciones no quedan explicadas o, mejor dicho, el modelo no proporciona una posible interpretación para las observaciones del momento. Es cierto que las simulaciones de Enzian et al. (1997) sugieren, bajo las hipótesis asumidas, la imposibilidad de que el núcleo del 29P esté constituido por hielo cristalino. Efectivamente, aún suponiendo un alto contenido de hielo de monóxido de carbono, el caso de hielo cristalino no alcanza, en ningún momento, la tasa de producción de monóxido de carbono que se determina observacionalmente. Ello, en un principio, se debe a la relativamente alta conductividad del hielo cristalino comparada con la del hielo amorfo. En el primer caso, según discutieron Enzian et al. (1997), la relativamente alta difusión del calor hacia el interior hace que no se alcance temperatura relativamente alta en ningún sitio, lo que no favorece la sublimación del monóxido de carbono. Sin embargo, hay que tener en cuenta que, por un lado, eso no sería una prueba de la existencia de hielo amorfo y, por otro, que el tamaño real del 29P, como veremos a continuación, puede ser mucho mayor que el supuesto por Enzian et al. (1997) lo que aumentaría la producción total de monóxido de carbono.

Con respecto a las explosiones de actividad, las que se obtienen en este trabajo no deberían considerarse como tales. De hecho, en la escala de tiempo puede verse que la duración de estas supuestas explosiones es del orden del año, cuando la duración de las explosiones típicas es del orden de las decenas de días. En realidad, en nuestra opinión, lo que Enzian et al. (1997) obtuvieron son puros y simples efectos estacionales de la producción de monóxido de carbono (asociados a la activación de la cristalización) que se deben a la iluminación permanente de los polos cuando el cometa se acerca tanto al perihelio como al afelio debido a la orientación concreta elegida para el eje de rotación. El aumento significativo de la producción de monóxido de carbono se explicaría porque, una vez que el frente de cristalización se encuentra en el interior del núcleo, el calor necesita un tiempo para alcanzar el frente. Ello sólo se obtiene cuando el punto subsolar permanece suficientemente estable durante un tiempo relativamente grande y ello sólo ocurre en los polos, cuando el objeto está cerca del afelio y del perihelio, cuando la oblicuidad y el argumento del perihelio son  $90^\circ$ . En el resto de las situaciones, lo más probable es que los períodos de calentamiento debidos a la rotación (aún en el caso forzosamente lento de Enzian et al. 1997) como a la variación estacional, no son suficientes para alcanzar la profundidad del frente de cristalización y producir una transformación masiva de hielo amorfo. En el mejor de los casos se obtendrían dos “explosiones” (que, insistimos, no deberían considerarse como tales) por órbita, es

decir, 0.1 explosiones por año, muy lejos de las 7.3 obtenidas por Trigo-Rodríguez et al. (2010). Finalmente mencionar que la producción media de polvo que Enzian et al. (1997) obtuvieron para su caso nominal era de  $20 \text{ kg s}^{-1}$ , también muy por debajo de las estimaciones observacionales.

Otro aspecto observacional que es conveniente destacar es el de la temperatura superficial. Como ya se ha mencionado, Crovisier et al. (1995) infirieron temperaturas superficiales aproximadas de 100 K para el lado iluminado y 40 K para el lado nocturno. La principal hipótesis de su planteamiento es que la coma de monóxido de carbono debe comportarse hidrodinámicamente como una de  $\text{H}_2\text{O}$ , sin considerar calentamiento fotolítico que, a esas distancias y para el monóxido de carbono, es despreciable. Enzian et al. (1997) reevaluaron la estimación de la temperatura superficial a partir de las velocidades de expansión obteniendo que las temperaturas del núcleo debían ser 156 K y 61 K para las zonas iluminada y nocturna respectivamente. La temperatura superficial de la zona obtenida con el modelo numérico en la solución favorecida por Enzian et al. (1997), con el eje incluido en el plano orbital, explicaría razonablemente la temperatura del lado iluminado. Sin embargo no existiría acuerdo en la temperatura del lado nocturno, según la propia discusión de Enzian et al. (1997), aunque no mencionaron el resultado obtenido.

De alguna manera, se puede decir que nuestro estudio viene a completar el comenzado por Enzian et al. (1997) para determinar si es posible proporcionar una explicación satisfactoria de los datos observacionales actuales que nos permita constreñir las características físicas del 29P/SW1.

## 4.5. Parámetros termofísicos y características específicas del modelo utilizado

Teniendo en cuenta la información observacional y de laboratorio disponibles, definimos a continuación el conjunto e intervalos de parámetros que definen nuestro sistema.

### 4.5.1. Tamaño y albedo de 29P/SW 1

Debido a la presencia de la coma de manera persistente es difícil estimar el tamaño y el albedo de este cometa. Existe consenso en que se trata de un objeto relativamente grande comparado con los cometas típicos de la familia de Júpiter, pero las distintas estimaciones realizadas hasta la fecha proporcionan valores muy diferentes. Cronológicamente, Cruikshank y Brown (1983), combinando observaciones térmicas con fotometría en el visible, estimaron que el radio del núcleo de 29P/SW 1 era de  $20 \pm 2.5 \text{ Km}$ , mientras que su albedo geométrico era de  $0.13 \pm 0.04$ . Este valor del albedo, como menciona Lamy et al. (2003) es muy alto comparado con los valores típicos cometarios (aproximadamente 0.04) pero es común entre los Centauros. Posteriormente, Meech et al. (1993), intentando sustraer la

coma presente para aislar la contribución fotométrica del núcleo, estimaron que el radio era de sólo  $15.4 \pm 0.2$  km suponiendo que el albedo geométrico fuese el típico de los cometas. Si el albedo fuese el estimado por Cruikshank y Brown (1983), el radio bajaría hasta  $8.6 \pm 0.1$  Km. La estimación más reciente ha sido realizada por Stansberry et al. (2004) utilizando observaciones en el infrarrojo térmico con el telescopio espacial Spitzer. Mediante el ajuste de los datos observacionales con modelos térmicos, estos autores estimaron que el radio de 29P es en realidad  $27 \pm 5$  km mientras que su albedo geométrico es, tan solo,  $0.025 \pm 0.01$ . Confiriéndole una mayor confianza a la determinación más reciente realizada con la instrumentación más avanzada, en estas simulaciones consideraremos nominalmente que el cometa 29P tiene el radio estimado por Stansberry et al. (2004) y tomaremos como albedo Bond el utilizado por Enzian et al. (1997) que resultaría, en principio, compatible con la estimación del albedo geométrico de Stansberry et al. (2004). En nuestras simulaciones, de acuerdo con la ley de Kirchoff, la emisividad será la unidad menos el albedo considerado. En realidad, se espera que, dentro de los valores mencionados para el albedo, los resultados no dependan del valor concreto utilizado. Ello es porque, si se exige la ley de Kirchoff, un aumento de la absorción de energía (i.e. una disminución del albedo), se emplea básicamente en aumentar la energía rerradiada. Dada la alta no-linealidad de ésta con la temperatura superficial, un cambio en el albedo entre los valores mencionados, produce cambios prácticamente insignificantes en la temperatura superficial y en el correspondiente gradiente.

#### 4.5.2. Parámetros rotacionales

Los parámetros rotacionales determinados por diferentes autores también muestran discrepancias importantes. Whipple (1980), utilizando su conocido método del halo (en este caso, utilizando un modelo para ajustar la expansión de la coma) con 433 observaciones correspondientes a un intervalo temporal de 50 años, determinó que el período de rotación era, aproximadamente, 5 días. Con respecto a la orientación del eje de rotación, Whipple obtuvo que las observaciones se ajustaban a una inclinación de  $65^\circ$ . Algo más recientemente, Sekanina (1990), a partir de la expansión de la coma, determinó que el eje de rotación tenía una orientación definida por una oblicuidad de  $100^\circ$  y un argumento del perihelio de  $279^\circ$ , considerando el período de rotación determinado por Whipple (1980). Jewitt (1990) detectó una periodicidad en imágenes CCD del orden de los 6 días, la cual fue atribuida, con algunas reservas, a la rotación del núcleo. Meech et al. (1993) obtuvieron una curva de luz y, según los autores, la serie temporal mostraba evidencias de que el núcleo podía estar rotando en modo complejo caracterizado por dos períodos: 14 y 32.3 horas. Esos datos fotométricos no permitían estimar la orientación del eje de rotación. Más recientemente, las observaciones relizadas por Stansberry et al. (2004) sugieren un período de rotación que excede los 60 días. Finalmente, la investigación realizada por Moreno (2009) utilizando un modelo montecarlo para invertir imágenes ópticas suponiendo expulsión anisótropa desde un área activa, indica que el mejor ajuste se obtiene para un período de 15

días para una orientación del eje de rotación compatible con la determinada por Sekanina (1990) ( $\phi=279^\circ, I=100^\circ$ ). Aparte de estas estimaciones, como ya se ha mencionado, Trigo-Rodríguez et al. (2010) sugieren una posible periodicidad de 50 días, la cual hay que tomar con cautela, como ya se ha descrito.

En resumen, basándonos en los resultados de Sekanina (1990) confirmados por Moreno (2009), parece que la orientación del eje de rotación de 29P sería  $I=100^\circ$ ,  $\Phi=280^\circ$ . Con respecto al período, las determinaciones realizadas por diversos autores muestran una gran disparidad. Ello es debido principalmente a la presencia de la coma que amortigua toda variabilidad rotacional del núcleo. También podría deberse, si la orientación del eje de rotación se confirma definitivamente, a que como el eje está prácticamente contenido en el plano orbital, la actividad sería relativamente poco sensible a la variabilidad rotacional, lo que dificultaría su detección. Con respecto a nuestras simulaciones, donde tomamos el trabajo de Enzian et al. (1997) como referencia, consideraremos sus mismos parámetros rotacionales nominales, es decir una orientación del eje de rotación definida por ( $I=90^\circ$ ,  $\phi=90^\circ$ ) y un período de rotación de 10 días. La orientación elegida es prácticamente similar a la determinada por Sekanina (1990) y Moreno (2009) (las que, según lo descrito, serían las más probables) excepto que en vez de tener el hemisferio sur iluminado en el perihelio es el hemisferio norte el que recibe la luz en ese momento. Esa circunstancia carece de importancia práctica cuando el núcleo es considerado un cuerpo simétrico como en nuestro caso. Con respecto al período de rotación, cercano al propuesto por Moreno (2009), en realidad constituye un parámetro secundario para la orientación contenida en el plano orbital, pues las conclusiones deberían resultar prácticamente independientes del período elegido.

### 4.5.3. Composición

Aparte de la información proporcionada en el apartado 3 sobre las producciones determinadas en 29P poco más se puede decir sobre su composición, siendo por tanto especulativa e información que, en principio, se podría constreñir.

La no detección de agua en 29P hace imposible determinar la abundancia relativa de monóxido de carbono en la coma de este cometa. Así, se hace necesario recurrir a información general sobre la naturaleza de los cometas (ya dada en la sección sobre diversidad composicional de la Introducción). Si recordamos, a partir de las determinaciones de las tasas de producción de monóxido de carbono y agua en la coma de distintos cometas se ha estimado que la abundancia molecular  $\frac{[\text{CO}]}{[\text{H}_2\text{O}]} * 100$ , estaría en el intervalo 0.2-24 (con la salvedad de algunas estimaciones mayores, aunque algo más controvertidas, que hemos mencionado en la introducción), pero sólo el 20 % de los cometas estudiados muestra abundancias superiores al 10 % (i.e. 16 % en masa), ver e.g. Mumma y Charnley (2011), Ootsubo et al. (2012) o Paganini et al. (2012). Por otro lado también sabemos que las abundancias en las comas no son, necesariamente, buenos indicadores de las abundancias en el interior del núcleo. Por ejemplo, como ya hemos visto, los experimentos de Bar-Nun et al. (2008) muestran que las abundancias en las comas pueden, fácilmente,

sobreestimar hasta por un factor 10 las abundancias nucleares. Esto sugeriría que si la mayoría de los cometas muestran una abundancia en la coma del 10 %, la abundancia nuclear podría estar en torno al 1 % (que sería menos del 2 % en masa). Llegados a este punto, es importante mencionar también que estudios que siguen las producciones de los distintos volátiles frente al tiempo muestran que la razón de abundancias en las producciones de los distintos componentes varía con el tiempo, lo que se ilustrará en el capítulo siguiente de esta memoria.

La cantidad de monóxido de carbono nuclear utilizada por Enzian et al. (1997) era de un 10 % molar libre y un 10 % molar adicional atrapado en la estructura del hielo amorfo. Esas cantidades de monóxido de carbono, que representan una abundancia molecular del 23 % (i.e. un 35 % en masa) frente al total, según acabamos de ver, estarían en el límite superior de las determinaciones de las abundancias en las comas cometarias. Esto definiría al 29P como un objeto ciertamente singular. Por el contrario, si se busca una interpretación dentro de las observaciones, la concentración elegida por Enzian et al. (1997) sería difícil de justificar. Si se consideran válidos los experimentos de Bar-Nun et al. (2008), una abundancia del 40 % en la coma podría corresponder a una abundancia de, aproximadamente, el 4 % en el núcleo. Pero además, por otro lado, sabemos que la capacidad de adsorción del monóxido de carbono sobre el agua es limitada. Actualmente no existe una determinación que podamos extrapolar a condiciones de formación en la nebulosa solar (principalmente por las dificultades de generar grandes muestras de hielo amorfo a bajas temperaturas), pero los experimentos de Notesco et al. (2003) apuntan a que un 10 % molar (15 % en masa) sería un límite para la abundancia de monóxido de carbono en agua, incluyendo las fases sólida y atrapada. Ese límite estaría muy por debajo de la abundancia utilizada por Enzian et al. (1997), pero hay que decir que la capacidad del hielo amorfo para atrapar monóxido de carbono es dependiente de las condiciones de formación del hielo, aumentando cuanto menor es la temperatura de deposición.

En nuestras simulaciones exploraremos la posibilidad de que el 29P se encuentre más cerca de lo que sabemos a partir de las observaciones y los experimentos de laboratorio. Consideraremos nuestro caso nominal con un 20 % de monóxido de carbono en masa (un 10 % atrapado y un 10 % libre). Este modelo nominal tendría una abundancia ligeramente superior a la sugerida por los experimentos de laboratorio que acabamos de mencionar. Por ello, también estudiaremos los casos con un 5 % de monóxido de carbono (tanto atrapado como libre) como los casos de hielo amorfo con un 10 % de monóxido de carbono atrapado (sin monóxido de carbono libre) y el del hielo cristalino con un 10 % de monóxido de carbono libre (y por tanto sin monóxido de carbono atrapado). Todas las cantidades están expresadas en % de monóxido de carbono en masa con respecto a la masa total de hielo de agua.

#### 4.5.4. Parámetros térmicos

##### 4.5.4.1. Conductividad térmica

Anteriormente, en el capítulo 2, la ecuación 2.34 mostraba la expresión de la conductividad efectiva que caracteriza nuestro medio. Para realizar estas simulaciones hemos eliminado de dicha expresión el factor de la porosidad, de modo que la reducción de la conductividad debida a la porosidad quedaría incluida en el factor de Hertz, que consideraremos constante. Esta aproximación es ampliamente utilizada en el contexto cometario y nos permite acelerar un poco el tiempo de computación requerido para realizar las simulaciones.

La conductividad del material conjunto depende de las conductividades térmicas de los compuestos puros (y, por tanto, de la composición del núcleo, lo que en nuestro caso significa que la conductividad efectiva dependerá de la simulación concreta) y del parámetro de Hertz seleccionado. Con respecto a las conductividades de los constituyentes puros, utilizaremos el mismo valor de Enzian et al. (1997) para el agua cristalina, dado su consenso en la comunidad. Para el polvo, igual que en el capítulo anterior, también utilizaremos el mismo valor que Enzian et al. (1997) aunque otros autores utilizan valores mucho más altos (e.g. Huebner et al., 2006). Con respecto al hielo amorfo, puesto que en el capítulo anterior mostramos su papel clave en la acumulación de energía en el frente de cristalización y, por tanto, su posible relación con las explosiones de actividad, es necesario justificar detalladamente su elección. Enzian et al. (1997) utilizaron el valor sugerido por Klinger (1980),  $2,34 \cdot 10^{-3}T + 2,8 \cdot 10^{-2} \text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ , a partir de cálculos teóricos, aunque notaron que Kouchi et al. (1992) habían medido en el laboratorio valores varios órdenes de magnitud inferiores. Atribuyeron estas diferencias a las características estructurales de las muestras de hielo amorfo de Kouchi et al. (1992) argumentando que elegían el valor de Klinger (1980) porque siendo ya tan pequeño, la principal contribución al transporte de calor correspondería al gas, no a la fase condensada. Esta última afirmación de Enzian et al. (1997) puede ser cierta para temperaturas elevadas (alrededor de 200 K) pero no lo es para las temperaturas que se esperan por debajo del frente de cristalización, como demostraron Keller y Spohn (2002). Así, se hace necesario elegir una conductividad del hielo amorfo realista porque la utilización de una conductividad térmica u otra podría constituir una fuente importante de diferencias, como hemos mostrado en el capítulo anterior. En nuestras simulaciones utilizamos el valor de  $7,1 \cdot 10^{-5}T \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  para la conductividad del hielo amorfo. Esa expresión, que fue la utilizada nominalmente en el capítulo anterior, fue la adoptada por Tancredi et al. (1994) teniendo en cuenta la estimación de Kouchi et al. (1992) para hielo amorfo puro en el laboratorio y, por tanto, consideramos que es más realista que la utilizada por Enzian et al. (1997).

Finalmente, con respecto al monóxido de carbono, procederemos como Enzian et al. (1997) y supondremos que su conductividad es igual a la del hielo amorfo. En realidad, existe consenso en que esta cantidad debe ser muy baja, del orden de

$10^{-4} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , pero no en su valor concreto y en los distintos modelos es posible encontrar cantidades que se diferencian en un orden de magnitud. En cualquier caso, dado que el monóxido de carbono se considera en nuestro modelo un componente minoritario (no ocurre así en el modelo de Enzian et al. 1997), la elección de su conductividad dentro del intervalo generalmente utilizado no producirá un impacto significativo. El efecto de las diferencias en los valores utilizados para describir las conductividades térmicas de los elementos puros puede, finalmente, aparecer difuminada entre los distintos modelos cuando la conductividad efectiva tiene en cuenta la composición simulada del núcleo o se corrige por cuestiones estructurales como la porosidad o la superficie de contacto de los granos que se supone que forman parte del núcleo, el conocido factor de Hertz. Así, para comparar los resultados de unos modelos con otros quizá sea más conveniente estar de acuerdo en el valor de la inercia térmica, aunque esto necesitaría matizaciones.

Enzian et al. (1997) utiliza unas densidades y unas características del núcleo que hacen que la conductividad térmica efectiva sea prácticamente igual al factor de Hertz elegido, 0.1, cuando además del polvo, el hielo presente es cristalino y la temperatura es 140 K. Para poder hacer comparaciones, a lo largo del texto llamaremos a esa superficie “superficie de referencia”. Consideramos hielo cristalino porque, dada la baja sublimación de agua, ese debe ser el volátil presente en la capa de material que recibirá luz solar y transmitirá el calor hacia el interior en el modelo de Enzian et al. (1997). La temperatura estaría cerca de las condiciones típicas superficiales medias en la órbita de 29P. En cualquier caso, esa superficie de referencia tendría otra característica que facilita la comparación. Dadas las conductividades utilizadas para los distintos componentes, la inercia térmica total de esa superficie será muy similar a la de una superficie con una razón polvo-hielo mayor, lo que permite comparar directamente el valor de la inercia térmica utilizado en las simulaciones con el determinado para Tempel 1, cuya superficie se supone constituida esencialmente por material refractario.

Para esa conductividad efectiva de la capa más superficial, la inercia térmica, calculando de igual manera la capacidad efectiva y suponiendo una densidad del núcleo en torno a  $500 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}$  sería de, aproximadamente,  $200 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$ . De acuerdo a lo mencionado en el capítulo 2, ese valor estaría en el intervalo superior de lo que se sospecha en cometas y daría un gran peso energético a la difusión del calor. En nuestras simulaciones, además de un parámetro de Hertz  $h = 0,1$  también consideraremos el caso  $h = 0,01$ , que daría una inercia térmica de aproximadamente  $50 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$  en las condiciones descritas anteriormente. Este valor se podría considerar el valor canónicamente aceptado, según lo descrito en el capítulo 2.

#### 4.5.4.2. Presiones de saturación, calores específicos y calores latentes.

En las simulaciones utilizaremos las expresiones dependientes de la temperatura para las presiones de saturación comúnmente utilizadas en la modelización cometaria (e.g. Fanale y Salvail, 1984,1990). Afectando directamente a la subli-

mación del agua superficial, y por tanto al balance energético en la superficie, estrictamente sería necesario tener en cuenta el retorno de moléculas que se produce dentro de la región de Knudsen circumnuclear. Sin embargo, en estas simulaciones, supondremos que todo el flujo escapa al vacío, i.e. que el flujo de retorno es nulo. Ello es porque se espera, como ya se ha comentado anteriormente, que el impacto energético de la sublimación libre de agua sea mínimo en el balance energético de la superficie.

Con respecto a los calores específicos, mientras que existe cierto consenso en los que caracterizan a los hielos presentes en los núcleos cometarios, no ocurre lo mismo con el del polvo. A pesar de que hay evidencias sobre su composición, esta cantidad no ha podido ser medida. Enzian et al. (1997) utilizó para el polvo  $C_d = 3T \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , un calor específico dependiente de la temperatura basado en medidas, a temperatura ambiente, que Drury (1984) realizó utilizando minerales terrestres. Sin embargo, en la modelización cometaria es posible encontrar valores muy dispares, incluso relativamente altos comparados con el valor utilizado por Enzian et al. (1997), como por ejemplo  $C_d = 5T \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  (Tancredi et al., 1994). En las simulaciones correspondientes al 29P utilizaremos un valor específico para el polvo independiente de la temperatura, que estaría alrededor del valor medio del utilizado por Enzian et al. (1997) para el rango de temperaturas esperadas, i.e.  $C_d = 300 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . Para los calores específicos de los hielos de agua procederemos de la misma manera y asumiremos un valor medio constante de  $C_{\text{H}_2\text{O,ice}} = 800 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . La utilización de valores medios, independientes de la temperatura, para los componentes mayoritarios nos permite acelerar la ejecución del código numérico sin pérdida de generalidad. Con respecto a los calores específicos de las fases de gas, utilizaremos los valores recomendados por Huebner et al. (2006), ligeramente superiores a los utilizados por Enzian et al. (1997) basados en la suposición de que el gas en el interior de los poros se comporta como un gas ideal (ver tabla 4.2).

En relación a los calores latentes de sublimación, para el monóxido de carbono utilizaremos el mismo valor que Enzian et al. (1997) estimado por Schmitt et al. (1991) a partir de su energía de adsorción. Para el agua utilizaremos el valor estándar de  $2,84 \cdot 10^6 \text{ J kg}^{-1}$  (Priainik 1992, Tancredi et al. 1994). Este valor, que al ser independiente de la temperatura permite aumentar un poco la velocidad de cálculo, es ligeramente superior al utilizado por Enzian et al. (1997) pero, como se ha comentado anteriormente, su impacto se presupone limitado al esperarse temperaturas en las que la sublimación del agua no es importante desde el punto de vista energético.

#### 4.5.4.3. Energía liberada en la cristalización

Sobre la energía liberada en la cristalización, Enzian et al. (1997) consideraron una reducción de la energía debida a los gases ocluidos en el hielo amorfo mayor que la que se venía utilizando hasta la fecha en modelos cometarios. Es decir, la energía neta liberada en la cristalización que utilizó Enzian et al. (1997) es mu-



cho menor que la considerada en modelos previos, lo que retarda la evolución del frente de cristalización. Así, por ejemplo, Prialnik (1992) y Tancredi et al. (1994) suponen que el volátil atrapado se comporta como un gas y por tanto la energía necesaria para “liberarlo” es mucho menor que la que supone Enzian et al. (1997), aproximada por el calor latente de sublimación de monóxido de carbono adsorbido en hielo de agua. Aún así, Enzian et al. (1997) consideró la cristalización como una reacción netamente exotérmica. Teniendo en cuenta la concentración de monóxido de carbono atrapado en hielo amorfo que utilizaron (10 % molar sobre la cantidad de amorfo), la energía neta liberada estaba en torno a los  $4 \cdot 10^4 \text{ J kg}^{-1}$  que, si recordamos, es cercano a lo que consideramos como valor medio en el estudio sobre los efectos de la energía neta de cristalización presentado en el capítulo 3. Para la misma concentración de monóxido de carbono la energía neta liberada que se consideraría en los modelos de Prialnik (1992) y Tancredi et al. (1994) sería, aproximadamente,  $6 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1}$  de modo que la reacción se podría considerar prácticamente pura si tenemos en cuenta que la concentración de monóxido de carbono atrapado utilizada por Enzian et al. (1997) es más elevada de lo que habitualmente se supone. Como vimos en el capítulo anterior, experimentos de laboratorio realizados con muestras de hielo amorfo impuro sugieren que, en realidad, la energía de liberación del monóxido de carbono atrapado en la estructura amorfa puede ser incluso mayor que la utilizada por Enzian et al. (1997), convirtiendo la reacción en endotérmica para cantidades relativamente pequeñas de monóxido de carbono (entre el 3 y el 6 % en masa). En nuestras simulaciones consideraremos dos energías netas de cristalización:  $9 \cdot 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ , que correspondería a una reacción puramente exotérmica (y es la aproximación utilizada comúnmente en el modelizado cometario), y  $4,5 \cdot 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ , que sería similar al valor considerado por Enzian et al. (1997).

#### 4.5.4.4. Densidades y porosidad

Para las densidades de los constituyentes compactos utilizaremos los mismos valores de partida que Enzian et al. (1997). Estos valores, procedentes de medidas de laboratorio, son típicamente utilizados en las simulaciones de evolución termofísica cometaria. La principal diferencia con Enzian et al. (1997) está entonces en que la composición global del núcleo será, en general, diferente dependiendo de la razón polvo-hielo, del contenido de monóxido de carbono y de la densidad del núcleo. Para esta última magnitud consideraremos como valor nominal  $450 \text{ kg m}^{-3}$ , que es el valor nominal que utilizaron Enzian et al. (1997), pero también estudiaremos los casos  $300 \text{ kg m}^{-3}$  y  $700 \text{ kg m}^{-3}$  para evaluar el impacto de esta magnitud en los resultados.

Con respecto a la porosidad, se trata de un parámetro que depende de las densidades, cantidades de los distintos constituyentes y de la densidad del núcleo. De acuerdo a los valores iniciales dados para las distintas densidades, la porosidad inicial variará entre 0.5 y 0.79, evolucionando con el tiempo conforme el núcleo simulado evoluciona termofísicamente. Con respecto al tamaño de los poros, uti-

lizaremos también el mismo radio que Enzian et al. (1997), a saber,  $10^{-4}\text{m}$ .

## 4.6. Principales diferencias con el modelo de Enzian et al. (1997)

Aparte de, lo que podríamos llamar, simples diferencias en la elección de parámetros o de las condiciones iniciales de nuestras simulaciones comparadas con las de Enzian et al. (1997), ambos modelos presentan diferencias significativas que pueden influir fuertemente en la evolución termofísica de los objetos simulados.

### 4.6.1. Producción de polvo y erosión

Una de las principales diferencias en la evolución termofísica simulada de nuestro modelo comparado con el de Enzian et al. (1997) es el tratamiento de la erosión y, por tanto, de la frontera superficial.

Como ya se ha comentado, Enzian et al. (1997) no realizan una descripción detallada de su tratamiento de la producción de polvo y, especialmente, de la erosión, por lo que es necesario interpretar y especular sobre dicho tratamiento. Por un lado, Enzian et al. (1997) estimaron la producción de material refractario a partir de una linealización de la eficiencia del gas para arrastrar granos de polvo. Suponiendo que la producción de polvo era de  $600 \pm 300 \text{ kg s}^{-1}$  (Fulle, 1992) y que la de monóxido de carbono estaba entre 1200 y 2000 (Senay y Jewitt 1994; Crovisier et al. 1995), Enzian et al. (1997) consideraron una eficiencia de 0.5, es decir  $\frac{Q_d}{Q_{CO}} = 0,5$ . Por otro lado, suponiendo que la producción de polvo debe ser nominalmente  $600 \text{ kg s}^{-1}$  asumen la misma masa erosionada de polvo. Además, argumentan que si la razón polvo-hielo es de 1, entonces la masa erosionada de agua debería ser igual a la de polvo. El problema es que la tasa de producción de agua libre desde la superficie es mucho menor que esa cantidad (del orden de  $10 \text{ kg s}^{-1}$ ). Así, sugieren la posibilidad de que se produzcan granos helados, mencionando que hay que tener en cuenta que, al no haber sido detectada el agua, el límite de producción sería  $10^{28} \text{ molec s}^{-1}$  (aprox.  $300 \text{ kg s}^{-1}$ ). A partir de estas ideas se entiende entonces que la masa erosionada en el trabajo de Enzian et al. (1997) sería:

$$m_{er} = Q_d + Q_w = 0,5Q_{CO} + Q_w, \quad \text{con} \quad Q_w = Q_{w\text{-libre}} + 0,5Q_{CO} \quad (4.1)$$

donde  $m_{er}$  representa la masa total erosionada,  $Q_d$  y  $Q_w$  son, respectivamente las producciones de polvo y agua y el último término en la producción de agua en forma de granos helados, para igualar la producción de polvo (al ser la razón polvo-hielo asumida la unidad), siempre que no supere en total  $300 \text{ kg s}^{-1}$ , que sería el valor adoptado si la producción estimada mediante la fórmula en 4.1 resultase mayor que ese valor límite determinado observacionalmente.

Esta forma de tratar la erosión tiene consecuencias importantes, pues Enzian et al. (1997) no implementan, ni en primera aproximación, lo que podríamos llamar formación del manto. Simplemente, eliminan una capa superficial con un espesor derivado de la erosión estimada. Así, la frontera superficial de Enzian et al. (1997) siempre tendrá hielo cristalino (excepto en los primeros instantes de las simulaciones con hielo amorfo) y polvo, aunque la falta de detalles dados en su trabajo nos impide saber si se mantienen sus características estructurales y las razones de mezcla.

En nuestro modelo, como está descrito en el capítulo 2, incluimos una aproximación, que podríamos llamar de orden cero, con la que se intenta simular la expulsión de material refractario cuando es arrastrado por el gas. Al incorporar esta aproximación, el núcleo simulado puede desarrollar un manto de material refractario, sin material volátil, si la producción de gas no es suficiente para levantar todo el polvo presente en capas superiores. Si el manto se desarrolla, la inercia térmica cambia sustancialmente y, por tanto, la evolución termofísica del núcleo simulado también. Recordamos además que, en nuestro modelo, la resolución espacial utilizada permite que el manto se pueda desarrollar sólo en zonas concretas de la superficie lo que, en principio, sería una simulación “natural” de la formación de zonas inactivas en el núcleo.

En nuestras simulaciones mantendremos igualmente la hipótesis de linealidad entre la producción de polvo y de monóxido de carbono pero considerando los intervalos de producciones, actualizados a nuevas determinaciones, una eficiencia entre 0.25 y 1 resultarían razonables. Considerando como valor nominal 0.5, realizaremos simulaciones adicionales para los valores 0.25 y 1.

En nuestro caso, a diferencia del de Enzian et al. (1997), es necesario especificar las características de la distribución de polvo. Como nuestra intención es realizar una descripción cualitativa de los observables de 29P, nos limitaremos a considerar un solo caso, una distribución homogénea y monodispersa formada por granos del tamaño de la micra.

La producción de granos de hielo se trataría de manera análoga a la del polvo. Sin embargo, dado que no existe evidencia observacional de su presencia, decidimos no simular esta posibilidad limitándonos a evaluar su posible impacto en los resultados.

#### 4.6.2. Efectos transitorios rápidos

Otra gran diferencia con respecto a las simulaciones realizadas por Enzian et al. (1997) es la resolución temporal. El paso temporal elegido por Enzian et al. (1997) era fijo, 27000 s. Si, por ejemplo, uno estima la velocidad de propagación de la onda térmica

$$v = 2\sqrt{\frac{K\pi}{\rho cP}} \quad (4.2)$$

se puede comprobar que, para los parámetros que Enzian et al. (1997) utilizó para caracterizar y simular el 29P, esa resolución temporal resulta insuficiente para muestrear correctamente la propagación del calor hacia el interior del núcleo. La situación empeora si, por ejemplo, comparamos con la escala de tiempo característica de la cristalización a temperaturas entre 130 y 150, justo donde se produce la liberación brusca del monóxido de carbono atrapado. En ese intervalo, la escala de tiempos de la cristalización variaría entre un día y 0.01 días. El paso temporal elegido demuestra ser aún más irregular si lo comparamos con la escala de tiempo de sublimación del monóxido de carbono libre, la cual es muy pequeña y para valores típicos de la temperatura en el interior del núcleo es menor que 0.001 días (ver, e.g. la Fig. 5.3 en Huebner et al. 2006).

La elección de ese paso temporal por parte de Enzian et al. (1997), para facilitar la velocidad computacional de las simulaciones, puede haber eliminado efectos transitorios que ocurren en escalas de tiempo más cortas. En nuestras simulaciones utilizamos una técnica de paso adaptativo que verifica, en cada paso temporal, la conservación de masa. Desde el punto de vista práctico esto hace que el paso temporal se vaya adaptando según la variabilidad de los procesos físicos involucrados. El límite inferior en la resolución es de 1 s (aproximadamente  $10^{-5}$  días).

Con respecto a la resolución espacial es necesario distinguir entre lo que sería la resolución en profundidad, que afecta a los procesos de difusión, y la resolución espacial de la superficie del cuerpo, que define la manera en la que el cuerpo capta energía. En relación a la resolución espacial de los procesos de difusión, Enzian et al. (1997) utilizó un espesor de capas variable resolviendo la difusión hasta el centro del núcleo. El espesor de la primera capa era de 0.1 m lo que, en principio, puede resultar apropiado para muestrear aproximadamente la onda de calor diaria. En nuestras simulaciones utilizaremos también un espesor de capa variable (como hemos descrito en el capítulo 2), localizando la frontera inferior a 100 m y considerando 150 nodos espaciales, lo que nos permite muestrear apropiadamente los ciclos térmicos diario y orbital resolviendo, sobradamente, las ecuaciones hasta una profundidad donde se puede suponer que los flujos son nulos. La capa superficial será también en nuestro caso del orden de los 10 cm. Hay que recordar que, como ya hemos descrito, nuestra frontera y los nodos retroceden con la erosión por lo que la frontera interior (y, de hecho el resto de nodos) permanece siempre a la misma profundidad medida desde la superficie.

En relación a la resolución superficial de Enzian et al. (1997), para aumentar la velocidad de los cálculos, aunque utilizó una forma tridimensional teniendo en cuenta el transporte de calor en la dirección meridional, simplificó la resolución en la dirección longitudinal, considerando comportamiento homogéneo en bandas por latitud. Esta aproximación sería, en principio, válida cuando el punto subsolar ilumina los polos pero no en cualquier otro punto de la órbita. Nuestra descripción geométrica será completa. Consideramos el núcleo como un cuerpo esférico dividido en celdas triangulares construidas con una resolución angular de  $20^\circ$ , esto es 288 celdas.

### 4.6.3. Difusión del gas

El modelo de Enzian et al. (1997) constituye una representación realista y completa del tratamiento de la difusión del gas al considerar que éste presenta un régimen u otro dependiendo de las características térmicas del sistema. Sin embargo, dado el tamaño de poro elegido se puede considerar una buena aproximación considerar que el gas estará, casi siempre, en régimen de Knudsen (i.e. las colisiones de las moléculas con las paredes de la matriz son más frecuentes que entre ellas). Esta aproximación, justificada a posteriori con las presiones alcanzadas, fue la utilizada por ejemplo por Prialnik (1992) y es la que utilizamos en nuestro modelo. Tener en cuenta flujos de tipo viscoso constituye una inconsistencia cuando (como sucede en el trabajo de Enzian et al. (1997) y en el nuestro) en el cálculo de parámetros se hace implícitamente la suposición de que los gases son ideales. Las altas densidades asociadas a flujos viscosos hacen que no se deban despreciar las interacciones entre moléculas, aún más a las bajas temperaturas características de los núcleos cometarios.

## 4.7. Estrategia y simulaciones realizadas

La resolución temporal que utilizamos hace muy costoso, computacionalmente hablando, realizar simulaciones que cubran un gran número de órbitas. Por ello, para completar un número relativamente grande de simulaciones, nos vemos obligados a cambiar la estrategia con respecto a la de Enzian et al. (1997). Estos autores estudiaron la evolución de un cometa simulando el 29P cubriendo un período de 85 años, es decir, prácticamente desde su descubrimiento hasta nuestros días. Esa sería la estrategia más razonable si se puede asumir el coste computacional. En nuestro caso, como primera aproximación, tenemos que optar por cubrir sólo un período de dos órbitas (i.e. 30 años de simulación). Esto, entre otras cosas, nos permite tener un muestreo espacial razonable pues de continuar la simulación, la localización de la frontera interior no garantizaría su cumplimiento. Para cubrir un mayor número de órbitas, sería necesario localizar la frontera a mayor profundidad, aumentando considerablemente el número de nodos necesario para asegurar un buen muestreo de las ondas térmicas. Ello haría que, con nuestro paso temporal adaptativo, el coste computacional no sería asumible sin técnicas de paralelización y supercomputación. En el análisis de los resultados de las simulaciones, prestaremos atención a los obtenidos en la segunda órbita, una vez que toda la superficie del núcleo ha sido iluminada cuando el punto subsolar se despalza sobre la superficie durante la primera órbita. Al analizar los resultados de esa segunda órbita es necesario hacer una consideración adicional sobre la tasa de producción. Según las simulaciones de Enzian et al. (1997), cuando el hielo de agua es amorfo, la tasa de producción de monóxido de carbono experimenta una caída desde, aproximadamente  $2 \cdot 10^{28}$  molec  $s^{-1}$  a los 25 años hasta  $5 \cdot 10^{27}$  molec  $s^{-1}$  a los 85, caída que se observa en todas las simulaciones realizadas siempre que haya hielo amorfo en el núcleo. Es decir, si nuestras simulaciones se comportan igual, la producción

obtenida en mitad de la segunda órbita sería aproximadamente un factor 4 mayor que la que obtendríamos si completásemos las simulaciones para un período de 85 años. Dicho de otra manera, si las observaciones del 29P (e.g. Crovisier et al. 1995) nos dicen que hoy la tasa de producción está entre  $2\text{-}5 \cdot 10^{28}$  moléc.  $\text{s}^{-1}$ , los valores que serían comparables a los obtenidos en nuestra simulación deberían ser un factor 4 mayores, i.e., entre  $8 \cdot 10^{28}$  y  $2 \cdot 10^{29}$  moléc.  $\text{s}^{-1}$ . En la discusión de los resultados compararemos, por tanto, los valores obtenidos en las simulaciones con esos límites observacionales corregidos por la caída esperada en la producción.

Como se comentó al principio del capítulo, nuestro objetivo principal con este estudio es contrastar los resultados del modelo con las observaciones relacionadas con el cometa 29P/SW 1. Con ello pretendemos, por un lado, verificar si las hipótesis contenidas en el modelo representan una descripción, al menos de primer orden, de los principales procesos físicos que afectan a la naturaleza de este objeto. Por otro lado también queremos, si el modelo es capaz de reproducir el comportamiento básico de 29P, estimar límites a algunas de las principales magnitudes características de los cometas que actualmente presentan una gran incertidumbre, según se describió en la introducción. No se pretende un ajuste perfecto de los datos observacionales, sino sólo una reproducción básica y razonable de las observaciones. Teniendo en cuenta todo lo descrito anteriormente, se considerará que el modelo reproduce razonablemente las observaciones si proporciona:

- Una tasa de producción de monóxido de carbono entre 2 y  $5 \cdot 10^{28}$  moléc.  $\text{s}^{-1}$  ( $1000\text{-}2300 \text{ kg s}^{-1}$ ) probablemente produciendo entre 1/4 y 1/5 desde el lado nocturno. Al simular sólo dos órbitas, los valores de la producción corregidos según la caída esperada a partir de las simulaciones Enzian et al. (1997) deberían estar entre 0.8 y  $2 \cdot 10^{29}$  moléc.  $\text{s}^{-1}$ .

- Una tasa de producción de agua máxima de  $1 \cdot 10^{28}$  moléc.  $\text{s}^{-1}$  ( $300 \text{ kg s}^{-1}$ ) porque de otro modo hubiese sido detectada.

- Una producción de polvo mínima en el intervalo entre 300 y  $900 \text{ kg s}^{-1}$ .

- Una tasa de explosiones de actividad del orden de 7.3 por año, con periodicidad de unos 50 días.

La tabla 4.2 recoge los principales parámetros utilizados en las simulaciones realizadas en este estudio y descritos, en su mayoría, anteriormente. En el conjunto de parámetros definiremos como modelo nominal (parámetros marcados en negrita) el que más se ajusta a nuestras ideas actuales: Un núcleo con una razón polvo-hielo de 1 caracterizado por una inercia térmica en torno a  $50 \text{ Jm}^{-2}\text{K}^{-1}\text{s}^{-1/2}$  para la superficie de referencia y una densidad de  $450 \text{ kg m}^{-3}$ . El contenido total de monóxido de carbono del modelo nominal es de un 20 % en masa, con un 10 % libre y un 10 % atrapado. La energía liberada en la cristalización del modelo nominal será la del hielo amorfo puro.

## 4.8. Resultados de las simulaciones

Las simulaciones realizadas nos permiten destacar algunos resultados que, siempre teniendo en cuenta que nuestra descripción se basa en las hipótesis contenidas en el modelo descrito en este trabajo, nos proporcionan indicios acerca de la naturaleza de 29P.

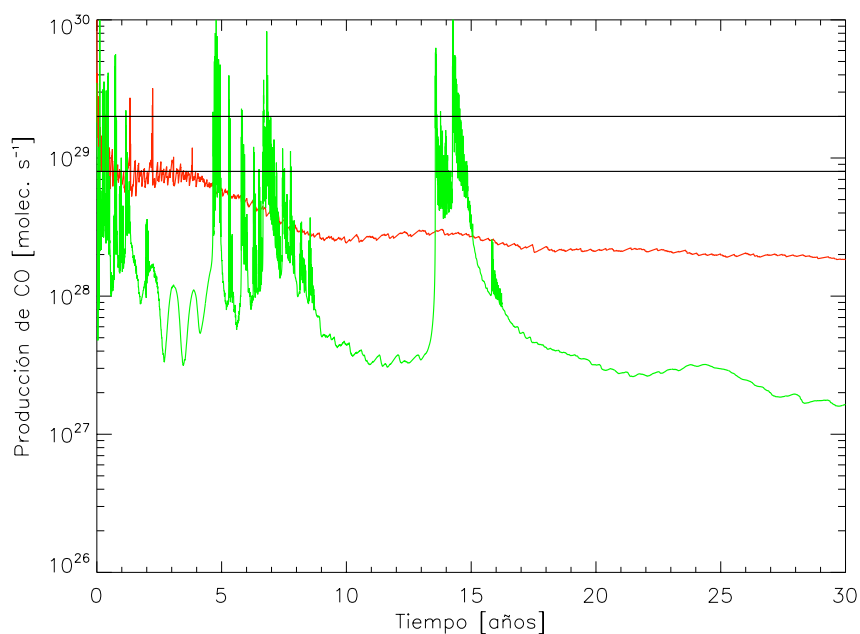
### 4.8.1. Primera aproximación: ¿Puede el hielo ser cristalino?

La figura 4.5 muestra la producción de monóxido de carbono y su evolución con el tiempo de dos núcleos, uno constituido por hielo cristalino con un 10 % de monóxido de carbono libre y otro constituido inicialmente por hielo amorfo con sólo un 10 % de monóxido de carbono atrapado y sin monóxido de carbono libre. El resto de los parámetros utilizados en las simulaciones corresponderían a lo que hemos llamado modelo nominal, descritos en la tabla 4.2.

Como se puede ver, la tasa de producción de monóxido de carbono del núcleo cristalino es significativamente inferior a la tasa determinada observacionalmente. Sin entrar en detalles, que abordaremos posteriormente, esto nos indica que los parámetros elegidos no constituyen una descripción compatible con las observaciones y, por lo tanto, sería necesario modificarlos (e. g. radio del núcleo, cantidad de monóxido de carbono, etc.). Sin embargo, y confirmando las conclusiones de Enzian et al. (1997), los resultados obtenidos con el modelo actual sugieren que, aún encontrando una descripción física que nos proporcionase una producción simulada de monóxido de carbono dentro de los límites observacionales, un núcleo cristalino no podría explicar el comportamiento de 29P. El perfil de la tasa de producción de monóxido de carbono de un núcleo cristalino evoluciona de forma suave, sin explosiones, incluso en este caso en el que se potencian los efectos estacionales al elegir una orientación del eje de rotación contenida en el plano orbital.

El caso del núcleo amorfo con sólo un 10 % de monóxido de carbono atrapado, sin monóxido de carbono libre, mostrado en la Fig. 4.5 nos proporciona una tasa de producción de monóxido de carbono muy inferior a la del caso cristalino, siendo casi dos órdenes de magnitud inferior a la determinada observacionalmente. De hecho, las combinaciones de radio o monóxido de carbono atrapado necesarias para que el modelo nos proporcionase una tasa de producción de monóxido de carbono entre los límites observacionales nos exigiría o bien un radio o bien una concentración de monóxido de carbono absolutamente improbables. Sin embargo, es interesante considerar la tasa de producción de monóxido de carbono en esta simulación entre 5 y 10 años de actividad. La Fig. 4.6 muestra la evolución de la magnitud del 29P estimada utilizando la relación de Biver (2001) durante un período de aproximadamente 300 días. Esto sería un intervalo similar al mostrado por Trigo-Rodríguez et al. (2010), por ejemplo en su Fig. 1, la cual se reprodujo aquí como Fig. 4.3 para facilitar la comparación.

Comparando la Fig. 4.6 con, por ejemplo, el último panel de la Fig. 4.3, se podría decir que existe un acuerdo cualitativo entre ambas figuras, e incluso un

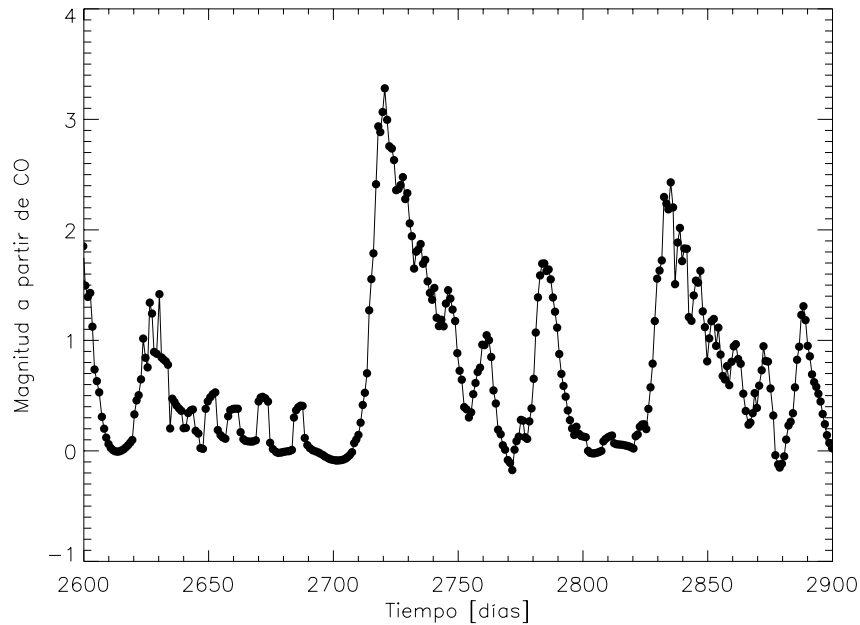


**Figura 4.5:** Tasa de producción del monóxido de carbono de dos núcleos. Rojo: Núcleo cristalino, con un 10 % en masa de monóxido de carbono libre y sin monóxido de carbono atrapado. Verde: Núcleo amorfo, con un 10 % en masa de monóxido de carbono atrapado sin hielo de monóxido de carbono libre. En negro los límites observacionales, corregidos como se indica en el texto según las simulaciones deENZIAN et al. (1997)

acuerdo cuantitativo en la caracterización de los aumentos de brillo. Nos centramos especialmente en su duración, ya que entendemos que la coincidencia en magnitud puede ser simple casualidad, al depender nuestra magnitud de la relación de BIVER (2001). En la Fig. 4.6 se puede ver que el brillo aumentaría de forma relativamente rápida, decayendo más despacio y siendo su forma debida únicamente al perfil de producción de monóxido de carbono desde el núcleo, sin necesidad de invocar procesos de la coma.

Considerando de nuevo la Fig. 4.5, resulta evidente que la presencia de estas explosiones, formalmente similares a las encontradas por TRIGO-RODRÍGUEZ et al. (2010) más de 80 años después del descubrimiento de 29P, no se mantiene en el tiempo, desapareciendo prácticamente en el segundo período orbital. Sin embargo, las simulaciones sugieren que, si es posible encontrar las circunstancias físicas que

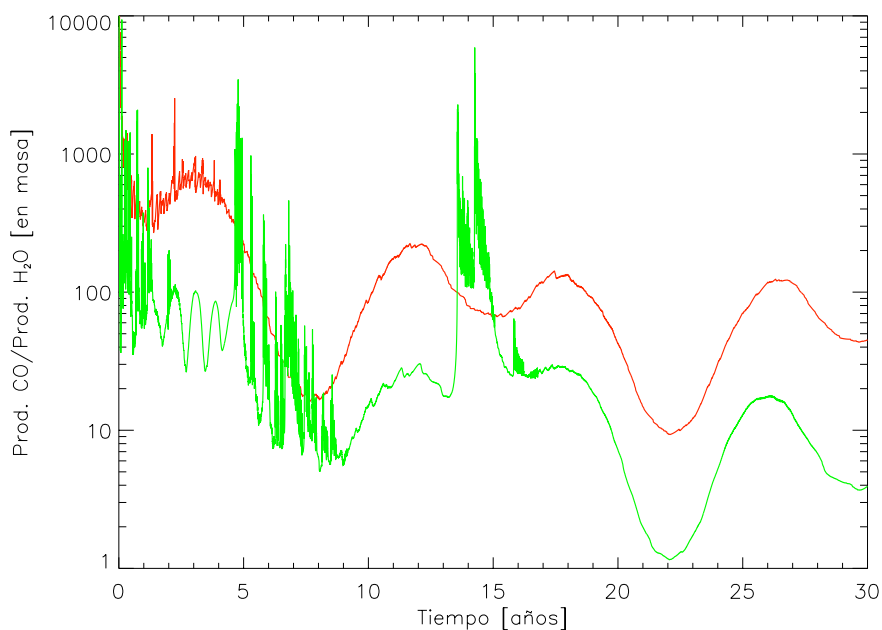




**Figura 4.6:** Magnitud del 29P estimada a partir de la producción de monóxido de carbono según la relación lineal de Biver (2001). Para mostrar la magnitud de los aumentos de actividad se ha sustraído la producción base, razón por la que el mínimo de magnitud está en torno a 0. La simulación corresponde a un núcleo de hielo amorfo con un 10 % de monóxido de carbono atrapado sin CO libre, manteniendo el resto de los parámetros en su valor nominal. El eje de abscisas indica el tiempo desde el comienzo de la simulación

mantengan el régimen de actividad presente en las primeras etapas de evolución del 29P, el hielo amorfo podría ser la causa de los aumentos de brillo sistemáticamente detectados en ese cometa.

De las dos simulaciones mostradas hasta ahora se puede concluir que un núcleo de hielo amorfo puede resultar compatible con las variaciones frecuentes de brillo observadas en el cometa 29P. Además, con las hipótesis del modelo, es necesaria la presencia de monóxido de carbono libre para elevar la producción de monóxido de carbono hasta los límites determinados observacionalmente. Otro resultado interesante que se hace necesario destacar ya en estas simulaciones, que podrían considerarse preliminares, es la ausencia de relación entre la razón  $\frac{Q_{CO}}{Q_{H_2O}}$  determinada en la coma y la existente en el núcleo. Dicho de otra manera, resulta



**Figura 4.7:** Razón entre las producciones de monóxido de carbono y agua frente al tiempo, determinada a partir de las producciones obtenidas con el modelo en los casos de un núcleo cristalino con un 10% de monóxido de carbono libre y de un núcleo amorfo con un 10% de monóxido de carbono atrapado.

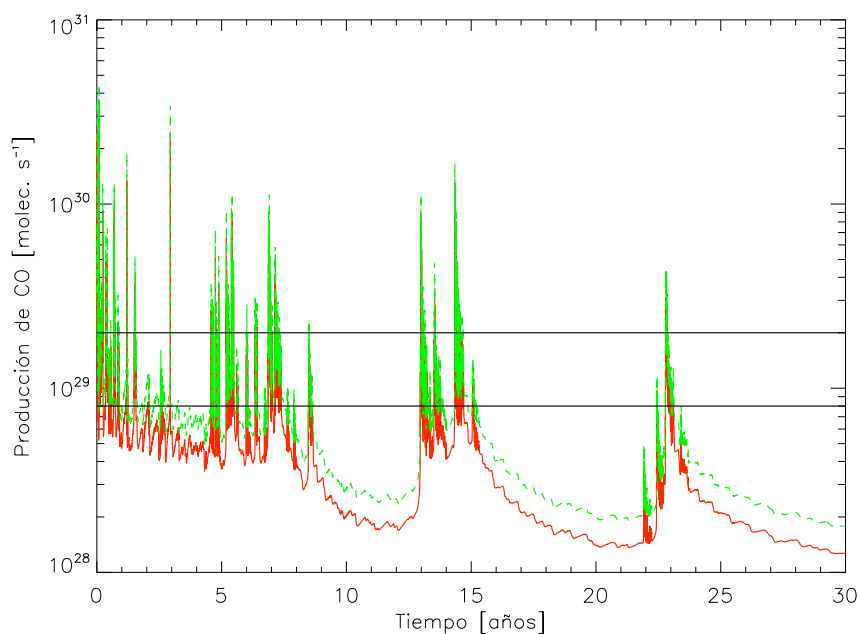
imposible estimar la proporción entre los hielos de monóxido de carbono y agua en el núcleo a partir de la razón de sus producciones en la coma. Esto se puede ver en la Fig. 4.7, donde se muestra la evolución temporal de la razón  $\frac{Q_{CO}}{Q_{H_2O}}$  para las dos simulaciones descritas en esta sección. El núcleo cristalino presenta fracciones de monóxido de carbono (respecto a la masa producida de agua) sistemáticamente muy superiores al 10% presente en el núcleo. Incluso en el caso del núcleo amorfo, sin hielo libre, el monóxido de carbono presenta fracciones sistemáticamente superiores al 10% atrapado en el núcleo. Estos resultados pueden resultar obvios y derivarían del simple hecho de que la temperatura del núcleo puede ser, al menos en ciertos momentos, suficiente para producir la sublimación del monóxido de carbono o la cristalización del hielo amorfo contenido en un elemento de volumen pero no alcanzar un valor lo suficientemente alto como para producir sublimación significativa de hielo de agua. Sin embargo, estas simples simulaciones muestran que la abundancia de monóxido de carbono determinada a partir de medias en la

coma puede llevar a importantes sobreestimaciones. A partir de observaciones en la coma, se podrían obtener abundancias superiores a las nucleares en un factor 10, 100 o incluso 1000. Este resultado adquiere relevancia tras las determinaciones realizadas por A'Hearn et al. (2011) sobre la abundancia  $\frac{\text{CO}_2}{\text{CO}}$  en la coma del cometa Hartley 2, lo que les ha llevado a sugerir un entorno muchísimo más oxidizado del que sería consistente con los modelos actuales de formación de discos protoplanetarios. Aunque en nuestras simulaciones no incluimos la presencia de distintos volátiles (algo que nos planteamos hacer en el futuro dada la trascendencia de una correcta interpretación de los datos observacionales), estas simples simulaciones sugieren mucha cautela a la hora de establecer conclusiones cosmogónicas a partir de las razones de las abundancias de los distintos volátiles detectados en las comas cometarias. Estos resultados, además, son coherentes con las observaciones de cometas como el Hale-Bopp (que trataremos para caso del monóxido de carbono en el capítulo siguiente) que muestran que la razón entre abundancias de diferentes volátiles en la coma presenta una variabilidad significativa con el tiempo.

#### 4.8.2. El caso nominal

Entre los parámetros que caracterizan el caso nominal destacamos una razón polvo-hielo de 1, una concentración de monóxido de carbono del 10 % libre con otro 10 % atrapado, una inercia térmica de  $50 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$  (cuando el hielo amorfo cristaliza) y una densidad de  $450 \text{ kg m}^{-3}$ . Esos parámetros se podrían considerar cantidades estándar o normales en la descripción cometaria, a excepción, quizás, de la cantidad de monóxido de carbono, que estaría en el límite superior de lo que se podría esperar teniendo en cuenta los experimentos y las observaciones. Con respecto a su estructura, el hielo de agua será inicialmente amorfo. En el caso nominal la distribución de polvo se considera uniforme, constituida por partículas de un tamaño del orden de la micra. Como ya se ha indicado, en el modelo nominal no se fuerza el desarrollo del manto: en principio todas las partículas pueden ser expulsadas si la producción lo permite. El resto de los parámetros que definen el modelo nominal se encuentran en la tabla 4.2.

La producción de monóxido de carbono para el caso nominal se muestra en la Fig. 4.8. En primer lugar se puede ver que, como se comentó anteriormente, la consideración simultánea de monóxido de carbono libre y monóxido de carbono atrapado eleva, lógicamente, la tasa de producción de monóxido de carbono con respecto al caso de hielo amorfo mostrado anteriormente en la Fig 4.5. Aún así, la producción simulada no alcanza los límites observacionales (corregidos), aunque está cerca durante los primeros 10 años. Marginalmente se podría decir que la producción de monóxido de carbono está en los límites observacionales si se supone que el radio del 29P es el límite superior determinado por Stansberry et al. (2004), de 32 km en lugar del valor nominal de 27 km. Lógicamente, igual ocurre con la tasa de polvo, por diseño del modelo, donde ésta es proporcional a la producción de monóxido de carbono a través de la eficiencia. Con respecto a la producción de agua, ésta alcanza un valor medio de  $10^{27} \text{ moléc. s}^{-1}$ , con un máximo en



**Figura 4.8:** Evolución con el tiempo de la producción de monóxido de carbono para el caso nominal (rojo). Las líneas horizontales marcan los límites observacionales (corregidos) La línea verde discontinua representa la producción de monóxido de carbono suponiendo que el radio del 29P es el límite superior estimado por Stansberry et al. (2004).

torno a  $4 \cdot 10^{27}$  moléc.  $s^{-1}$ , ambos inferiores al límite superior que imponen las observaciones. Estos valores pasarían a ser  $1.4 \cdot 10^{27}$  moléc.  $s^{-1}$  y  $5.6 \cdot 10^{27}$  moléc.  $s^{-1}$  si utilizásemos como radio el límite superior de 32 km en lugar del valor nominal, y también estarían por debajo del límite de detección.

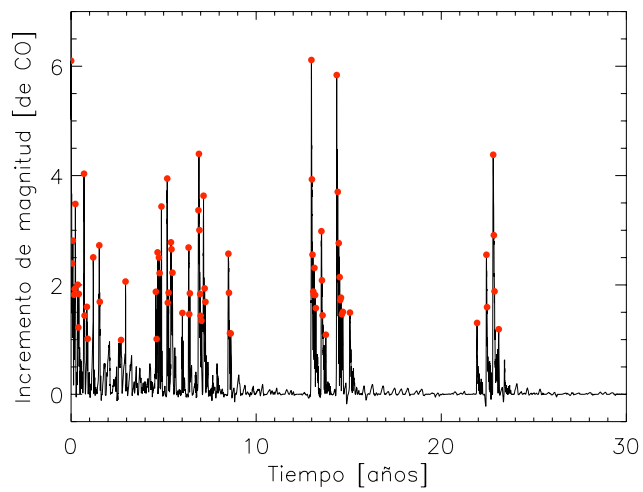
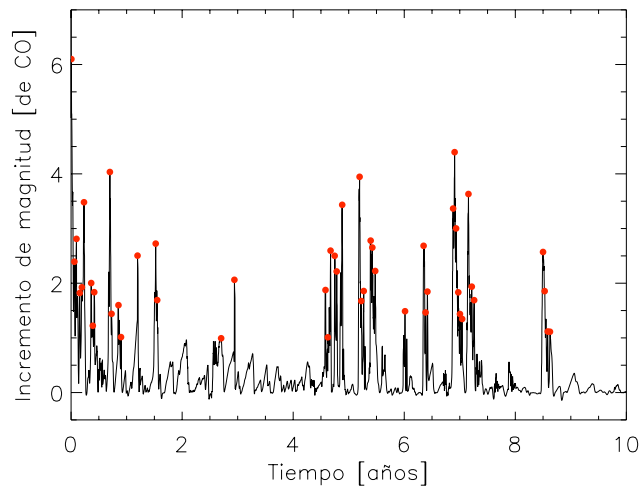
En la Fig 4.8 se puede ver que la producción de monóxido de carbono se encuentra significativamente afectada por explosiones de actividad, i.e., aumentos rápidos de la producción similares a los mostrados en la Fig. 4.5, aunque claramente se pueden distinguir dos fases. Una primera, que cubre los 10 primeros años y está caracterizada por una mayor frecuencia de explosiones y la segunda, que básicamente corresponde al segundo período orbital, donde las explosiones presentan un marcado carácter estacional.

Hay que decir que no es sencillo localizar e identificar lo que podríamos llamar una explosión de actividad y estimar la magnitud asociada. Igualmente, no hay

un única posibilidad de determinar la altura o cambio de magnitud que produciría tal explosión y la elección de un método distinto podría dar lugar a resultados diferentes. En nuestro estudio, persiguiendo una descripción cualitativa y tal y como hicimos en la Fig. 4.6, consideraremos válida la relación de Biver (2001) para estimar la magnitud visual a partir de la producción de monóxido de carbono. Identificaremos como explosiones el máximo aumento de brillo que ocurre en ventanas temporales de 15 días y el cambio asociado será el cambio de magnitud instantánea determinado desde la línea de producción media. Con estas consideraciones detectaríamos las explosiones marcadas con un punto rojo en la Fig. 4.9 restringiéndonos a aquellas que experimentan un cambio de magnitud mayor que 1 (que es el límite observacional dado por Trigo-Rodríguez et al. 2010). En esa figura, el panel superior muestra los cambios de magnitud que ocurrirían durante los primeros 10 años de simulación. En el panel inferior se muestran las explosiones que ocurrirían durante las dos órbitas que cubren nuestras simulaciones. Vemos que, siempre teniendo en cuenta que se está utilizando la aproximación lineal de Biver (2001), se obtienen cambios de brillo compatibles con lo observado. Cambios de 2 y 3 magnitudes resultarían relativamente frecuentes obteniéndose cambios incluso mayores que 4 magnitudes.

Durante los 10 primeros años de simulación, donde la tasa de producción se podría considerar compatible con la observacional, el modelo nominal produce 47 explosiones de actividad (seleccionadas según los criterios mencionados anteriormente) con un cambio de magnitud superior a 1. Esto es, aproximadamente, 4.7 explosiones/año, una cantidad muy superior a la determinada por Enzian et al. (1997), que estaría entre los límites observacionales determinados por Cook et al. (2005) (1-2 explosiones/año) y Trigo-Rodríguez et al. (2010) (7.3 explosiones/año). Aunque el período de rotación del 29P en nuestra simulación es de 10 días, un análisis de serie temporal, mediante periodograma de Lomb, no muestra ninguna periodicidad significativa en la ocurrencia de las explosiones. A este respecto sólo podemos decir que la separación media entre explosiones es de 68 días (con una mediana de 18 días). Si realizamos un periodograma de Lomb sólo de los momentos en los que ocurre la explosión (es decir, analizando una serie temporal de una función con 1 en los momentos en los que ocurre la explosión, siendo 0 en cualquier otro momento) la situación no mejora, y aunque se podrían observar picos localizados en 103.1 días y 59.1 días, su potencia espectral no es significativa (es decir, un conjunto aleatorio de datos puede dar potencias espectrales superiores a los valores obtenidos en el programa).

El número total de explosiones que ocurre durante el período completo de simulación (dos órbitas) es de 75 (siempre imponiendo el límite de aquellas que son mayores de 1 magnitud considerando como válida la expresión de Biver 2001), es decir, 2.5 por año, del mismo orden que las determinadas por Cook et al. (2005) pero inferior al dado por Trigo-Rodríguez et al. (2010). En cualquier caso, la inspección del panel inferior de la Fig 4.9 revela que, aunque la frecuencia de explosiones durante el período total de simulación es relativamente compatible con las determinaciones observacionales, las explosiones halladas en nuestras simula-



**Figura 4.9:** Arriba: cambios en magnitud (sustraída la línea base) estimados a partir de la producción de monóxido de carbono utilizando la relación lineal de Biver (2001) durante los 10 primeros años de simulación. Los puntos rojos marcan lo identificado como explosión de actividad. Abajo: Igual que el anterior pero para el período completo de simulación, cubriendo dos órbitas enteras. Ambas simulaciones corresponden al llamado caso nominal.

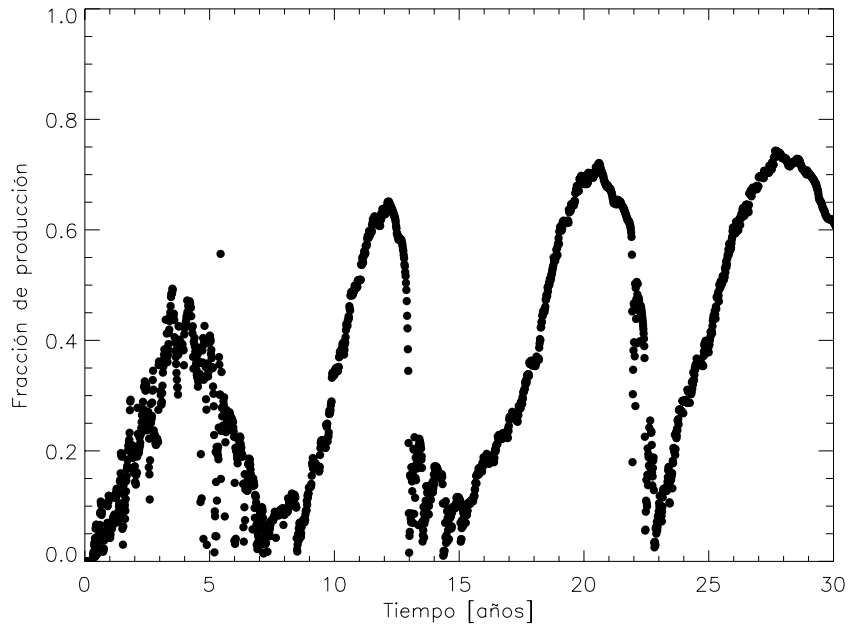
ciones muestran un marcado carácter estacional, apareciendo grandes períodos de tiempo en los que no se observaría ninguna.

Otros resultados del modelo nominal relacionados con la producción de monóxido de carbono muestran algunas características compatibles con las de las observaciones. Si recordamos, las observaciones radio (Crovisier et al. 1995, Festou et al. 2001) sugerían que entre un 20 y un 25 % de la producción de monóxido de carbono debía proceder del lado nocturno del cometa. En la Fig. 4.10 se muestra la fracción de la producción total de monóxido de carbono procedente del lado nocturno del núcleo en el caso nominal. Se puede ver que ese porcentaje observacional alcanza, e incluso se sobrepasa, en gran parte del recorrido orbital. En relación a este resultado es importante señalar que el modelo sugiere que la producción de monóxido de carbono desde el lado no iluminado no es un hecho singular o extraordinario, sino ciertamente natural. Esto sucede debido a que la sublimación de este compuesto (o su liberación del hielo amorfo) se produce a una cierta profundidad en el núcleo, lo que requiere que la energía se transmita hasta allí.

También en relación a la producción de gas desde la superficie del núcleo es interesante mencionar que la producción de agua y la de monóxido de carbono están desacopladas. En las simulaciones se obtiene que mientras que la primera sigue básicamente la localización del punto subsolar conforme se mueve en su órbita, la del monóxido de carbono se desacopla de la del agua al poco de empezar la simulación, siguiendo la evolución que le corresponde en función del calentamiento interior. Conforme la simulación evoluciona, se puede comprobar que todo el núcleo es activo (aunque no homogéneamente activo) con respecto al monóxido de carbono.

Uno entiende que, dadas las aproximaciones involucradas en nuestros cálculos, una comparación directa con las observaciones podría llevar a una interpretación errónea o a una sobreinterpretación si se persigue un ajuste numérico lo más perfecto posible. Ello resultaría evidente, por ejemplo, en el cálculo de la función acumulativa de las explosiones. Nosotros estimamos los cambios de magnitud producidos por el modelo con una aproximación simple, a partir de la correlación observacional entre monóxido de carbono y brillo de Biver (2001). Además, los cambios de magnitud que produce el modelo se deben a la producción en cada momento, siendo por lo tanto instantáneos, mientras que los determinados observacionales podrían deberse a la acumulación de distintos procesos (e.g. producción y fragmentación). Como simple ejemplo, dos explosiones breves separadas por horas podrían ser identificadas observacionalmente como una única con una amplitud mayor que la de las individuales.

En cualquier caso, como se viene diciendo, nuestro objetivo principal es determinar si las características físicas del modelo resultan compatibles cualitativamente con las observaciones. Si de las observaciones recogidas por Hughes (1990) y Trigo-Rodríguez et al. (2010) con respecto a las explosiones de actividad (no se puede decir lo mismo de la tasa de producción ya que las determinaciones observacionales existentes corresponden al último período orbital) se puede pensar que el 29P ha tenido un comportamiento similar al menos durante los últimos 70 años, el análisis cualitativo nos indica que el modelo, en su caso nominal, no recoge en primer orden la evolución termofísica cometaria. Resultan evidentes de

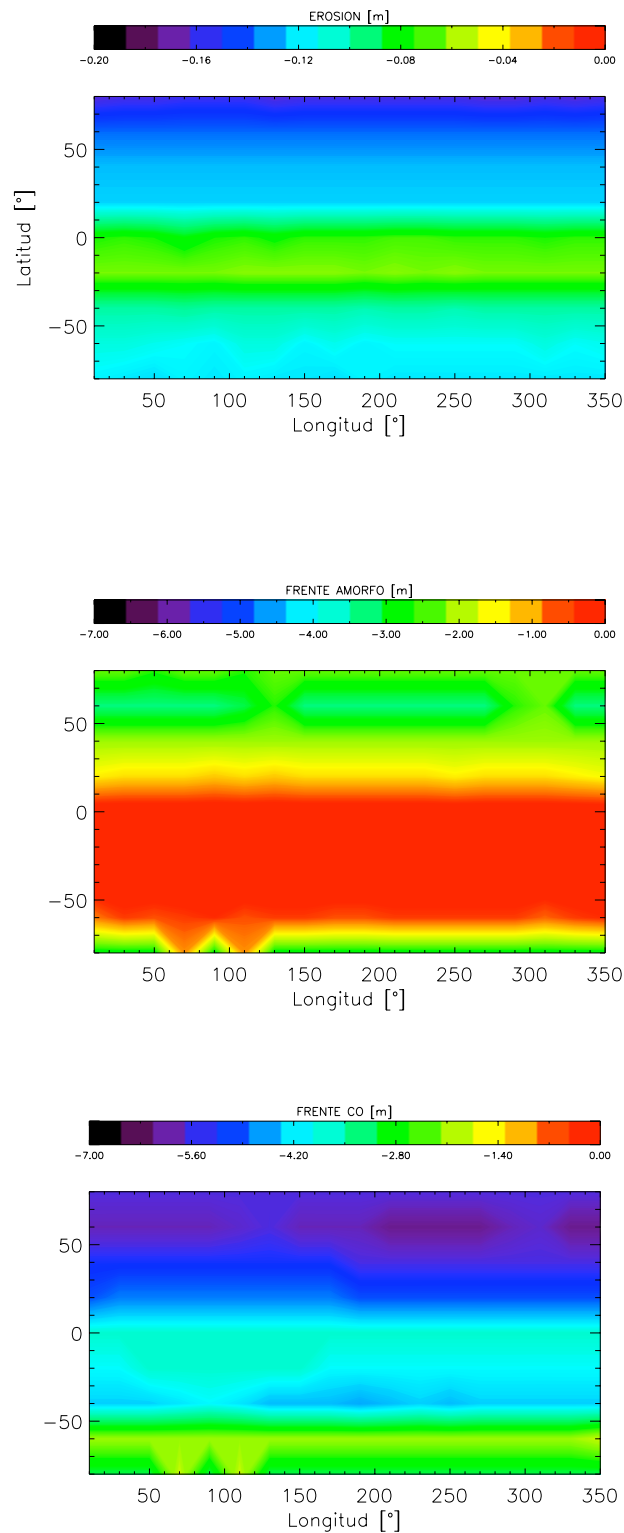


**Figura 4.10:** Fracción de la producción total de monóxido de carbono procedente del lado nocturno en la simulación nominal.

la Fig. 4.9 los largos períodos de inactividad, en lo que a explosiones se refiere, que mostraría el 29P. Esta estacionalidad sería incompatible con lo reportado por Trigo-Rodríguez et al. (2010), quienes encuentran 7.3 explosiones por año en un estudio sistemático realizado durante 8 años.

En esta interpretación cualitativa, en principio, cabría decir que el cometa 29P se comporta actualmente como en nuestros primeros 10 años de simulación y los parámetros definiendo el modelo nominal podrían ser una descripción razonable de la naturaleza del 29P si, a lo largo del tiempo, se pudiesen mantener las características físicas de esos 10 años. La Fig. 4.11 muestra la evolución de la erosión y de los frentes de cristalización y sublimación del monóxido de carbono tras esos primeros 10 años de simulación. La erosión y las localizaciones de los frentes dependen de la latitud concreta y los resultados son válidos para la orientación del eje de rotación utilizada en la simulación nominal. Esta orientación contenida en el plano orbital hace que, como se puede ver, los mayores efectos se produzcan en el polo norte, que es el iluminado permanentemente en el perihelio. En la Fig. 4.11 se puede ver que en esos primeros 10 años la superficie se erosiona, como máximo,





**Figura 4.11:** Mapas mostrando la erosión superficial (arriba), la localización del frente de cristalización (centro) y la profundidad del frente de sublimación del CO (abajo). La escala está en metros.

unos 20 cm, lo que equivaldría a una velocidad de erosión media de  $5,5 \cdot 10^{-5}$

m/día, por debajo de la velocidad de erosión media determinada en el cometa Tempel 1 y relativamente cercana a lo que en el capítulo anterior definimos como Tasa de Erosión Baja (TEB), definida considerando la erosión estimada en el Halley a partir de imágenes de Giotto. A partir de los 10 años, la erosión se estanca, lo que se debe a la caída en la producción de monóxido de carbono que se observa en la Fig 4.8. El frente de cristalización se encuentra a una profundidad que varía entre los 3.5 m del polo norte y los 22 cm de latitudes medias del hemisferio sur. El frente de sublimación del monóxido de carbono se encuentra, lógicamente, a mayor profundidad, entre 6.3 m en el polo norte y los 2 m del polo sur.

Dada la orientación del eje de rotación, los frentes de cristalización y monóxido de carbono así como la superficie del polo sur empiezan a avanzar desde el mismo comienzo de la simulación. Conforme el cometa se mueve en su órbita y el punto subsolar se desplaza desde el polo sur al norte, los frentes avanzan en toda la superficie del núcleo. Si se acepta que la simulación de los 10 primeros años del modelo nominal proporciona una interpretación aceptable de los principales hechos observacionales del 29P entonces se podría decir que la composición nominal del 29P exige que los procesos que se desarrollen en el interior del núcleo no lleven el frente de sublimación del monóxido de carbono a más de 6.5 m de profundidad y que el frente de cristalización no esté a más de, aproximadamente, 3 m de aquel. Lo que ocurre es que conforme el núcleo avanza en su órbita y van evolucionando la erosión y los diferentes procesos físicos, las características superficiales del núcleo cambian. Debido a esto se altera, entre otras cosas, la inercia térmica y por tanto la difusión de calor hacia el interior. A partir de un momento (en este caso 10 años), el frente de monóxido de carbono está a una profundidad tal que la energía que le llega es insuficiente para mantener la tasa del principio durante la mayor parte del período orbital. Se alcanzan sólo niveles comparables cuando el cometa se encuentra relativamente cerca de los ápsides y el Sol ilumina de manera persistente alguno de los polos. Al bajar la producción de monóxido de carbono la erosión se estanca y los frentes siguen avanzando cada vez más lentamente, pues la energía superficial debe recorrer cada vez una mayor distancia.

En primer orden, la producción de monóxido de carbono se podría descomponer en dos: Un valor medio que corresponde a la producción del monóxido de carbono libre y las explosiones que se superponen a la producción media, debidas a la cristalización del hielo amorfo. La primera, el valor medio de la producción, dependerá de la energía que se transmite, difícilmente, a través del medio amorfo. Para mantener el nivel medio es fundamental entonces que el frente de sublimación libre de monóxido de carbono no se aleje mucho del frente de cristalización. De hecho, en realidad, es lógico suponer que más importante que la profundidad absoluta del frente de sublimación del monóxido de carbono libre, lo que es importante para mantener una tasa de producción media es su distancia relativa al frente de cristalización. La razón es que el frente de cristalización, independientemente de las circunstancias y los procesos físicos, debe estar a una temperatura cercana o ligeramente superior a los 135 K. La producción media dependerá entonces de la energía que es posible transportar desde el frente de cristalización al de sublima-

ción libre. Esta distancia relativa, en las circunstancias del modelo nominal, es de unos 3 metros. Por su parte, la segunda componente de la producción, la causante de las explosiones y debida a la cristalización depende de la energía que alcanza el frente de cristalización desde la superficie.

Según lo descrito, las observaciones sugieren que lo “necesario” es que los frentes de cristalización y de sublimación libre se mantengan relativamente cerca, o dicho de otro modo, que ambos frentes avancen a velocidades similares. Según los resultados del modelo nominal esto implicaría que o bien el frente de sublimación libre evolucione más lentamente de lo que lo hace (manteniendo la producción) o bien que la velocidad del frente de cristalización sea mayor que la alcanzada en la simulación. La posibilidad de ralentizar el avance del frente de sublimación del monóxido de carbono depende de la cantidad de hielo presente y de la inercia térmica de la región amorfa del núcleo. No es inmediato evaluar las consecuencias de actuar en esas magnitudes dado su acoplamiento. Por ejemplo, al aumentar la cantidad relativa de hielo en el núcleo (lo que aumentaría la producción de monóxido de carbono), la conductividad del medio cae drásticamente debido a la mayor proporción de hielo amorfo presente, reduciendo la energía que se transporta desde el frente de cristalización hasta el frente de sublimación (cuya velocidad podría disminuir a costa de reducir la cantidad sublimada). Los efectos individuales de esas magnitudes serán descritos a continuación.

Para aumentar la velocidad del frente de cristalización existirían, a su vez, dos posibilidades, ambas orientadas a aumentar la energía que lo alcanza. La primera sería que la inercia térmica fuese mayor, lo que de nuevo depende de la inercia térmica propiamente o de la razón polvo-hielo. Es interesante notar que si actuásemos directamente sobre la inercia térmica aumentándola (e. g. modificando la densidad o la conductividad), ésta también aumentaría en la región amorfa. Esto hace que no sea intuitivo predecir el efecto global final, pues puede ocurrir que aunque aumenten tanto la velocidad del frente de cristalización como la del de sublimación de monóxido de carbono, su diferencia disminuya. Sin embargo, una disminución de la razón polvo-hielo podría tener el efecto contrario en ambas velocidades. El aumento relativo de la cantidad de hielo presente en el núcleo favorece, por un lado, el aumento de la energía transportada desde la superficie hasta el frente de cristalización y por otro, como ya ha sido mencionado, la disminución de la energía que alcanza el frente de sublimación desde el frente de cristalización, lo que disminuye la velocidad del frente de sublimación. Ello es porque en la región más superficial el hielo de agua es cristalino y su conductividad es más elevada que la del polvo para las temperaturas que, de acuerdo a nuestras simulaciones (que, recordemos, utilizan los parámetros que presentamos en la tabla 4.2), se alcanzan en el 29P. En la región amorfa, entre ambos frentes, el aumento de la cantidad de hielo produce justamente lo contrario dada la baja conductividad del hielo amorfo. Habrá que comprobar si la disminución de la energía que alcanza el frente de sublimación se compensa, en términos de producción, con el aumento de la cantidad de hielo a sublimar. En cualquier caso, cabe destacar que los resultados obtenidos apuntan a que un núcleo con una razón polvo-hielo baja y una inercia térmica

relativamente elevada podría representar mejor la evolución del 29P que el modelo nominal.

Una segunda posibilidad para aumentar (o no reducir) la velocidad del frente de cristalización es que la velocidad de erosión sea mayor (por ejemplo hasta niveles similares a los observados en Tempel 1). Dadas las características del modelo, es necesario reconocer que cualquier discusión al respecto es muy especulativa porque, además, sería necesario basarse en posibles limitaciones observacionales. En principio se podría pensar que la erosión aumentaría simplemente considerando una eficiencia (proporción entre el polvo arrastrado y la producción de gas) mayor que la considerada en el modelo nominal. De hecho, como discutimos anteriormente, la incertidumbre observacional nos permite, sin contradicción, considerar eficiencias del orden de 1. Incluso se podría argumentar que los modelos de inversión de la coma no permiten detectar toda la masa de polvo expulsada, sino la correspondiente a tamaños concretos para justificar eficiencias mayores que 1. Los resultados de las simulaciones realizadas con los parámetros nominales simplemente modificando la eficiencia y aumentándola hasta 1 no muestran diferencias significativas. De hecho, la erosión y el frente de sublimación del monóxido de carbono alcanzan, prácticamente, las mismas profundidades que en el caso nominal. La única diferencia, que favorecería algo nuestro objetivo es que una mayor eficiencia resulta en un ligero aumento de la profundidad del frente de cristalización respecto a la que alcanza en el modelo nominal. Ello se explica porque cuando el polvo es expulsado desde la superficie, ésta se enriquece, de manera relativa, en hielo cristalino por lo que aumenta su inercia térmica. Al hacerlo, aumenta la cantidad de energía que penetra en el interior, aumentando ligeramente la velocidad del frente de cristalización. El hecho de que la erosión se mantenga similar al caso nominal se debe a que, aunque aumenta la producción de polvo, la estructura del núcleo se mantiene por el hielo cristalino presente. De hecho, la presencia de ese hielo cristalino sería el principal problema para aceptar que se pueden encontrar circunstancias físicas que, manteniendo los principales parámetros del modelo nominal, se puedan considerar una descripción aceptable del 29P en el largo plazo. Para aumentar la erosión sería necesario entonces que el núcleo expulsase granos de hielo de agua a la vez que granos de polvo. El problema es que uno debe justificar que, dependiendo de la tasa de erosión necesaria, gran parte de esos granos de hielo deben permanecer como tales, sin contribuir a la tasa de producción de agua, para mantener la producción de agua total por debajo del límite observacional ( $1 \cdot 10^{28}$  moléc.  $s^{-1}$  o  $300 \text{ kg s}^{-1}$ ). Si se asume que los granos de hielo se funden en escalas de tiempo relativamente cortas, lo que depende de su tamaño y composición (presencia o no de material refractario), el límite observacional de la tasa de producción sólo nos permitiría una eficiencia de 0.1-0.2 (al tener en cuenta la contribución de la producción superficial) para la emisión de granos de hielo cristalino. Esos valores no cambiarían significativamente los resultados. Se trataría, entonces, del problema contrario al desarrollado por Gunnarsson (2003), que buscaba las circunstancias precisas para que los granos de hielo de agua se fundiesen en un momento concreto desde su expulsión. En nuestro caso, los parámetros nominales exigirían que los

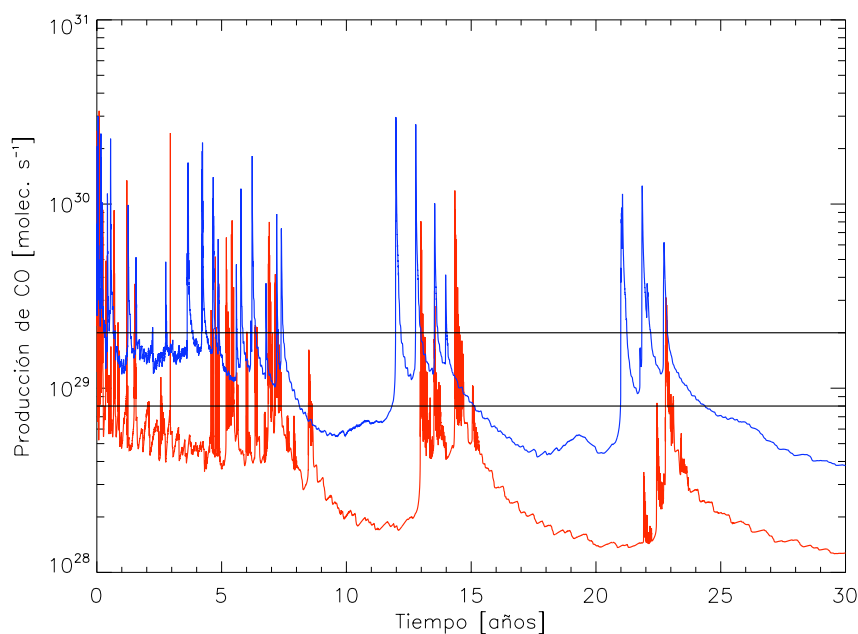
granos no sublimasen el agua y no contribuyesen a la producción total de agua. Ello sería posible, utilizando los mismos cálculos de Gunnarsson (2003), si los granos fuesen relativamente grandes, del orden de  $10\ \mu\text{m}$  o mayores, con una pureza relativamente alta.

Resumiendo lo discutido hasta ahora, podemos decir que el modelo nominal resulta compatible con los principales hechos observacionales durante los primeros 10 años de simulación (tasa de producciones de agua, polvo y monóxido de carbono, ocurrencia de explosiones frecuentes con características similares a las detectadas observacionalmente y producción significativa desde el lado no iluminado). A partir de los 10 años, la estacionalidad domina la producción de monóxido de carbono, transmitiéndose a las demás magnitudes, hecho que no encuentra soporte en las observaciones. Una posibilidad para conciliar el modelo nominal con las observaciones, entendemos que muy especulativa y por ahora sin base observacional, sería que el núcleo expulsase gran cantidad de granos relativamente grandes de hielo cristalino. Esto permitiría aumentar la erosión en la superficie manteniendo la razón polvo-hielo cercana a 1, la nominal.

En cualquier caso, si entendemos que la causa de las principales diferencias entre el modelo nominal y los resultados observacionales es la caída estacional de la tasa de producción de monóxido de carbono tras los primeros 10 años, se hace necesario, antes de aceptar la anterior descripción como la más probable, continuar explorando el espacio de parámetros. Existen argumentos razonables para ello ya que, por ejemplo, como hemos descrito, la profundidad excesiva del frente de sublimación de monóxido de carbono con respecto al de cristalización podría reducirse si la razón polvo-hielo es menor.

## 4.9. Efecto del aumento de la inercia térmica global

Como ya se ha mencionado una posibilidad para elevar la producción de CO con respecto al modelo nominal es que la cantidad de calor que se dirige hacia el interior del núcleo, donde se produce la sublimación de ese volátil, sea significativamente mayor que la que entra de acuerdo a la simulación ya descrita. Descartando el posible efecto del albedo, que ya ha sido mencionado, el calor dirigido hacia el interior vendría básicamente controlado por la conductividad térmica. Sin embargo, una alta conductividad térmica, por sí sola, no sería garantía de un aumento de la producción de monóxido de carbono, pues es necesario que la energía se acumule en el interior, elevando la temperatura por encima de la de sublimación de ese compuesto (entendiendo que el nivel medio de monóxido de carbono se debe principalmente al hielo de monóxido de carbono libre). En cualquier caso y de manera genérica, se podría decir que los resultados del modelo nominal podrían sugerir que la inercia térmica podría ser mayor que la considerada en el caso nominal. Hemos realizado la correspondiente simulación para verificar esa circunstancia y la evolución de la producción de monóxido de carbono en ese caso se puede ver en la figura 4.12. La curva azul de esa figura corresponde a una simulación con



**Figura 4.12:** Tasa de producción de monóxido de carbono del modelo nominal (rojo) comparada con el caso en el que el factor de Hertz se ha incrementado en un factor 10

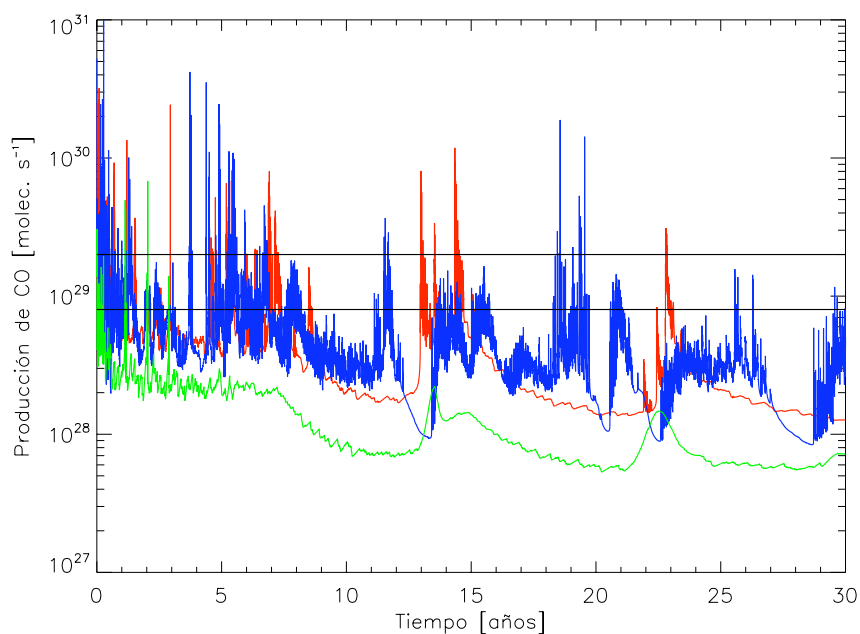
los parámetros nominales modificando únicamente el factor de Hertz para que la inercia térmica superficial alcance el valor de  $200 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$  en la superficie de referencia. Como hemos comentado, esa inercia térmica estaría en el límite superior de lo aceptado para cometas, siendo el valor utilizado por Enzian et al. (1997). En nuestro caso, se puede ver que la combinación tamaño de núcleo, cantidad de monóxido de carbono e inercia térmica, todos en valores razonables, nos da una producción de monóxido de carbono media que se acerca más a los límites observacionales que el modelo nominal. Sin embargo, por un lado, la estacionalidad sigue presente, sólo se observan explosiones en zonas orbitales concretas. Por otro lado, como se esperaba teniendo en cuenta los resultados del capítulo anterior, un aumento de la inercia térmica reduce el número de explosiones y cambia sus características, haciéndolas mucho más largas. En esa simulación, realizando el mismo proceso que el llevado a cabo para construir la figura 4.9 del caso nominal, encontramos que se producen 22 explosiones mayores que 1 magnitud durante los primeros 10 años y 30 explosiones si consideramos el período total de simulación,

es decir, 2.2 explosiones/año y 1 explosión/año respectivamente. Esos valores estarían algo alejados de los determinados por Trigo-Rodríguez et al. (2010). Por lo demás, la fracción de la producción desde el lado iluminado sigue un patrón similar al mostrado en la Fig. 4.10 (es decir, compatible con las observaciones) y la tasa de producción de agua no supera el límite observacional.

Entonces, como se puede ver, una inercia térmica relativamente elevada favorece una tasa de producción de monóxido de carbono media más compatible con las observaciones que la del modelo nominal. Sin embargo, esto es a costa de reducir el número de explosiones que, si bien serían compatibles con las que detectaban Cook et al. (2005), están lejos del valor determinado por Trigo-Rodríguez et al. (2010). Este resultado es, en cierta manera, esperado según los resultados descritos en el capítulo anterior. Un aumento de la inercia térmica espaciaba los aumentos repentinos de la velocidad de cristalización. En el mismo capítulo vimos que la razón polvo-hielo podría compensar ese efecto.

#### 4.10. Efecto de la razón polvo-hielo

Como ya mencionamos, el efecto de la variación de la razón polvo-hielo en la producción global no es intuitivo. Ello se justificaba porque un cambio de la cantidad de hielo podría tener efectos que actuaban de manera contraria. La Fig. 4.13 muestra la evolución de la producción de monóxido de carbono para tres simulaciones, la nominal, con una razón polvo-hielo de 1, un caso muy rico en hielo, con una razón polvo-hielo de 0.1 y un caso muy rico en polvo, con una razón de 5. Las simulaciones muestran que la producción media de monóxido de carbono es similar en los casos 0.1 y 1, observándose una reducción de la tasa de producción del monóxido de carbono cuando la razón polvo-hielo aumenta hasta 5. Para justificar estos resultados es necesario recordar que la sublimación del monóxido de carbono libre (principal contribuyente al valor medio), pasados los efectos transitorios iniciales, ocurre por debajo del frente de cristalización. Esta circunstancia hace que la sublimación del monóxido de carbono libre dependa de la energía que se transmite desde el frente de cristalización, a través de una zona de hielo amorfo, hasta la zona del frente de sublimación del monóxido de carbono libre (esto sería una consecuencia de que el frente de cristalización, donde ocurre una transición de fase, tiene una temperatura que es prácticamente independiente de la razón polvo-hielo). Una de las consecuencias inmediatas de considerar distintas razones polvo-hielo es que la inercia térmica, en general, es diferente. Dada la baja conductividad del hielo amorfo, la inercia térmica disminuye hasta valores prácticamente nulos conforme aumenta la cantidad de hielo presente en el núcleo. Esto se traduce, por ejemplo, en que cuanto más hielo hay y mayor producción podría haber, más difícil es la conducción de calor hacia el interior, lo que compensa de alguna manera la mayor densidad de componente volátil. Lo contrario ocurre si la razón polvo-hielo es elevada. Cuanto más polvo hay presente, más fácilmente difunde la energía hacia el interior y más fácilmente alcanza el frente



**Figura 4.13:** Efecto de la razón polvo hielo en la tasa de producción de monóxido de carbono. La curva roja corresponde al caso nominal que se incluye para facilitar la comparación. La curva azul corresponde a una simulación en la que el núcleo tiene las mismas características que el modelo nominal excepto la razón polvo-hielo que se reduce a 0.1. La curva verde representa la producción cuando la razón polvo-hielo del modelo nominal se aumenta a 5.

de sublimación del monóxido de carbono. Así, la reducción de hielo en elemento de volumen causada por un aumento de la cantidad de polvo con respecto al hielo se compensa, sólo parcialmente, con un mayor aporte de energía. Esto explicaría que las producciones medias de monóxido de carbono de los núcleos con diferentes razones polvo-hielo sean del mismo orden (con una ligera reducción cuando la razón polvo-hielo es elevada), al menos en el período de tiempo cubierto en las simulaciones y siempre teniendo en cuenta las hipótesis del modelo y las características orbitales de 29P (lo que impide su generalización a las circunstancias de un cometa en el que, por ejemplo, la sublimación de agua se convierte en mecanismo dominante desde un punto de vista energético). El período cubierto por las simulaciones podría ser relevante porque un efecto significativo que se observa en las simulaciones con distintas razones polvo-hielo es la evolución diferente de los



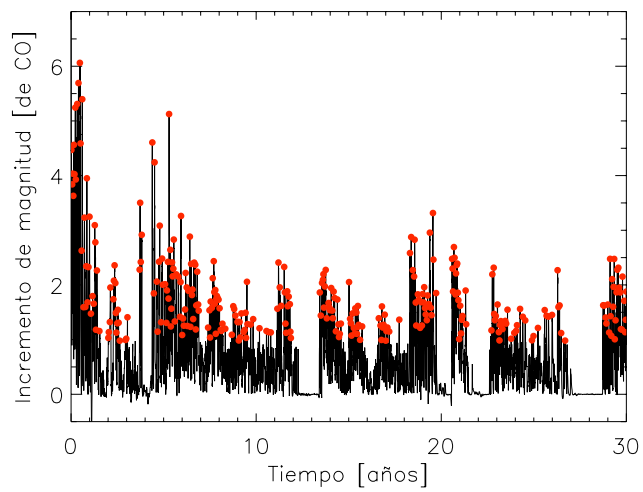
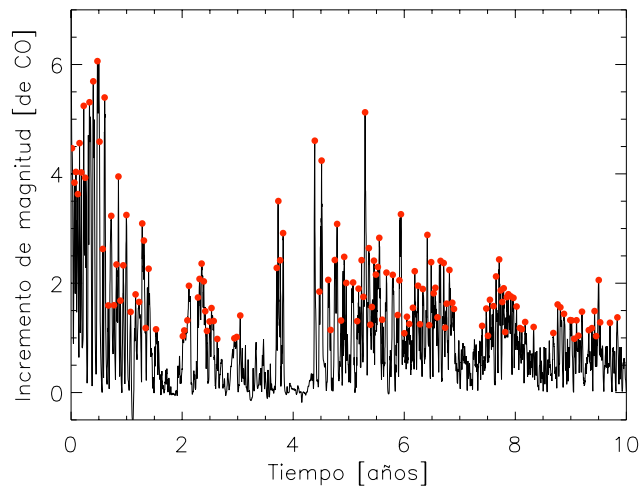
frentes. De manera efectiva, la menor cantidad de hielo presente cuando la razón polvo-hielo es elevada, se traduce en una evolución más rápida del frente de sublimación del monóxido de carbono. Con el frente de cristalización, como vimos en las simulaciones del capítulo anterior, ocurre justamente lo contrario. Efectivamente, la evolución del frente de cristalización dependerá de la energía que lo alcance desde la superficie. Ocurre que, al contrario de lo que sucede en la región amorfa, la inercia térmica aumenta significativamente cuando disminuye la razón polvo-hielo, debido a la relativamente alta conductividad del hielo cristalino (dominante en la región por encima del frente de cristalización). Esto se traduce en que, a igual temperatura superficial, la energía que alcanza el frente de cristalización es menor cuanto mayor es la razón polvo-hielo y, por tanto, el frente de cristalización evoluciona más lentamente conforme crece la razón polvo-hielo. Estas distintas evoluciones de los frentes harán que, en el muy largo término, puedan aparecer diferencias más significativas en las producciones de los distintos compuestos.

Una diferencia evidente en las producciones de monóxido de carbono comparando núcleos con diferentes razones polvo-hielo, esperada según los resultados del capítulo anterior, es la frecuencia de explosiones, aumentos repentinos de la producción de monóxido de carbono. Se puede ver que para razones polvo-hielo elevadas no hay explosiones de modo que, de acuerdo a las hipótesis del modelo, no pueden describir al 29P. De nuevo, analizando el caso con razón polvo-hielo baja (representada en la Fig. 4.14), de la misma manera que aplicamos para construir la figura 4.9, encontramos que durante todo el período de simulación se producen 314 explosiones con un cambio de magnitud superior a 1, es decir, 10.5 explosiones/año con una separación media de 35 días, valores que se podrían considerar compatibles con las observaciones de Trigo-Rodríguez et al. (2010). En la Fig. 4.14 también se puede ver que otro efecto de la disminución polvo hielo es la reducción de la estacionalidad. Ello se debe al mayor aporte energético al frente de cristalización desde una superficie constituida prácticamente por hielo cristalino.

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos hasta ahora, siempre aceptando las hipótesis de modelo, las simulaciones indican que un conjunto de parámetros que podría resultar compatible con las observaciones sería el del modelo nominal, con una razón hielo polvo reducida y una inercia térmica relativamente alta, caracterizada por un factor de Hertz de 0.1 que daría un valor  $I = 200 \text{ Jm}^{-2}\text{K}^{-1}\text{s}^{-1/2}$  en la superficie de referencia.

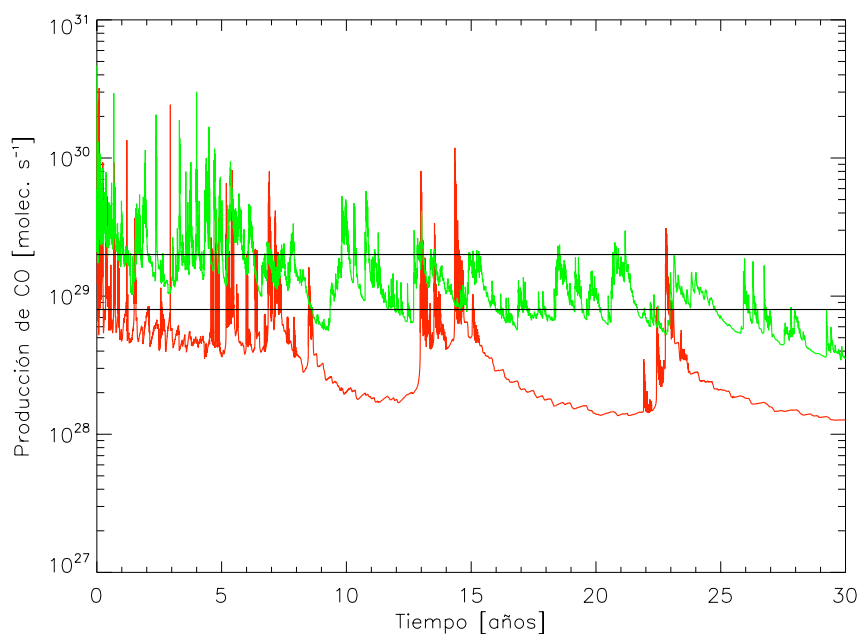
#### 4.11. Razón polvo-hielo baja e inercia térmica alta

La Fig. 4.15 muestra la tasa de producción del núcleo con los parámetros del modelo nominal excepto la razón polvo-hielo que es igual a 0.1 y la inercia térmica que está caracterizada por un factor de Hertz de 0.1. Se puede ver que, durante el período de simulación, la producción de monóxido de carbono se encuentra, aproximadamente, entre los límites observacionales. En este caso la producción de agua también se encuentra por debajo de la detección observacional, alcanzando



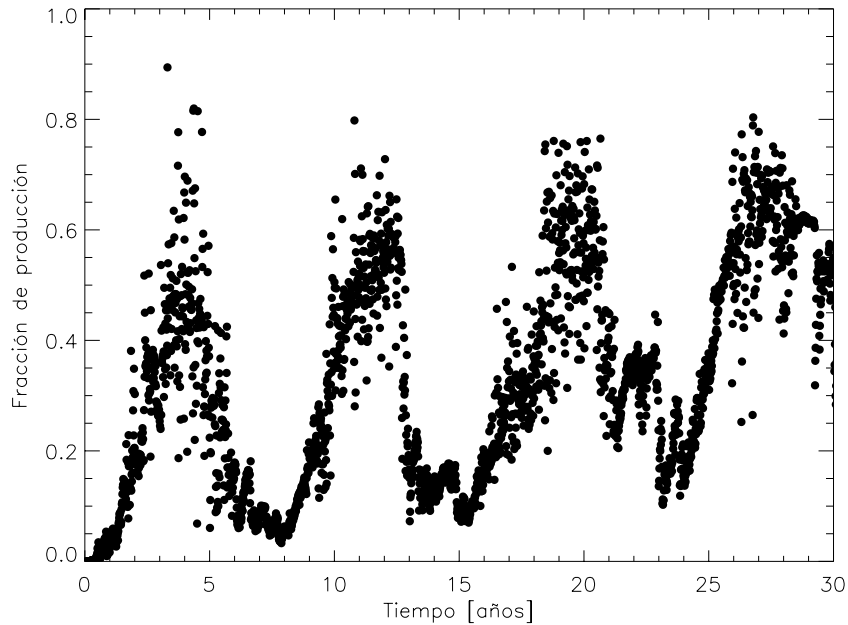
**Figura 4.14:** Explosiones de actividad contabilizadas para un núcleo como el nominal con una razón polvo hielo baja (0.1) para los primeros 10 años de simulación (arriba) y para las dos primeras órbitas (abajo).

como máximo  $3 \cdot 10^{27}$  moléc./s en el perihelio. La tasa de producción de polvo, por construcción del modelo con una eficiencia de 0.5 obtenida de las observaciones, también verifica las restricciones observacionales discutidas anteriormente. La figura 4.16 muestra la evolución de la fracción de la producción de monóxido de carbono procedente del lado no iluminado con el tiempo, siendo similar al caso



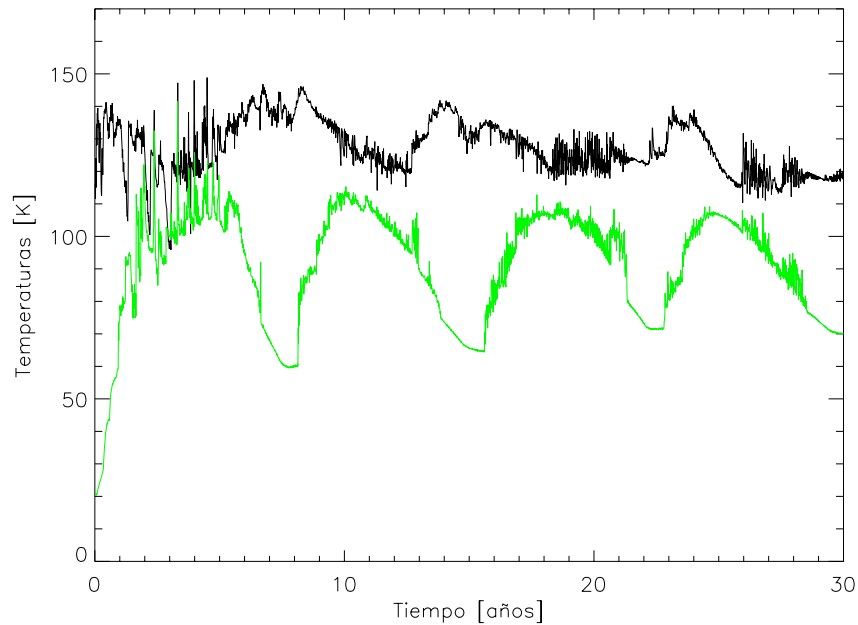
**Figura 4.15:** Tasa de producción de monóxido de carbono (verde) obtenida con una simulación en la que el factor de Hertz se eleva un factor 10 y la razón polvo-hielo se ha disminuido hasta 0.1 frente a la simulación del caso nominal (rojo).

mostrado en la Fig. 4.10. Se puede ver que, durante gran parte de la órbita, el lado no iluminado produce una cantidad significativa del monóxido de carbono total, resultado compatible con lo derivado de las observaciones. En relación a la producción desde los lados iluminado y nocturno, si recordamos, tendríamos también una estimación de las temperaturas superficiales. Según Crovisier et al. (1995) las temperaturas de expulsión del monóxido de carbono (que los autores identifican con las superficiales) que ajustaban sus datos de radio serían 100 K y 40 K para los lados iluminado y nocturno respectivamente. La reevaluación de las temperaturas realizada por Enzian et al. (1997) arrojaba valores superiores, 156 K y 61 K respectivamente. Las discrepancias en esas temperaturas indican la dependencia de los resultados de las suposiciones realizadas para estimarlas y, por tanto, cualquier ajuste tiene carácter especulativo. En cualquier caso hemos estimado las temperaturas que obtenemos en nuestra simulación, lo que se muestra en la Fig. 4.17. En esa figura se muestra la evolución de las temperaturas superficiales promedio de las zonas iluminada y nocturna de nuestro núcleo simulado.



**Figura 4.16:** Fracción de la producción de monóxido de carbono procedente del lado nocturno en el caso de la simulación con inercia térmica alta y razón polvo-hielo baja.

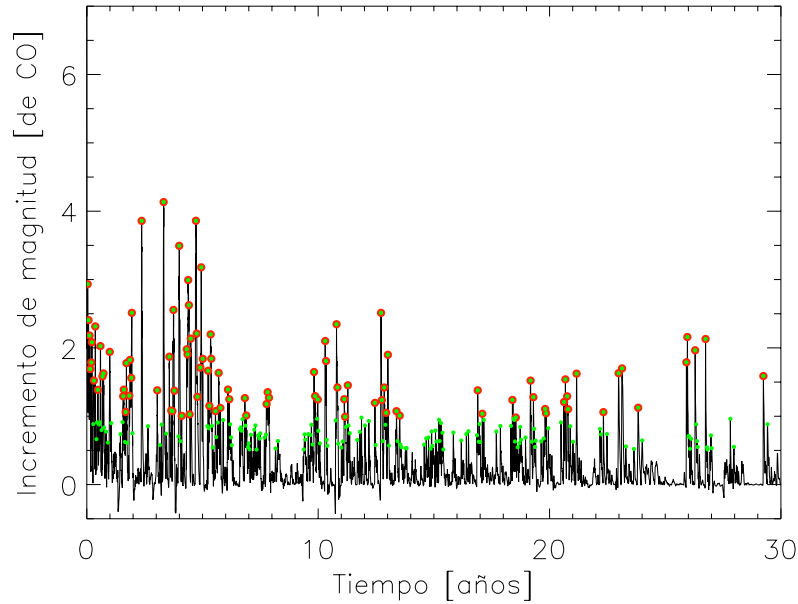
Para estimar el promedio se ha utilizado como peso la producción de monóxido de carbono de cada celda pues, como discutimos anteriormente, el desacople entre la localización del punto subsolar y la producción de monóxido de carbono hace que la zona superficial más caliente no sea la más productiva. Eso es particularmente evidente a partir de la figura 4.16, donde se puede ver que hay zonas orbitales en las que la mayor parte de la producción de monóxido de carbono procede del lado nocturno. Nuestra temperatura media del lado iluminado se encuentra entre los valores determinados a partir de las observaciones de 100 K y 156 K por Crovisier et al. (1995) y Enzian et al. (1997), respectivamente. La temperatura media nocturna alcanza valores mayores que los esperados según esas mismas estimaciones. Si uno le confiere mayor confianza a las estimaciones de Crovisier et al. (1995) (i.e. 100 K y 40 K), ya que incluían un modelo más riguroso y completo que el de Enzian et al. (1997), nuestros resultados de aproximadamente 120 K y 70 K (las observaciones de Crovisier et al. 1995 fueron tomadas cerca del afelio) podrían ser una indicación de que el gas, en su paso a través del núcleo, no alcan-



**Figura 4.17:** Temperaturas superficiales promedio de la zona iluminada (negro ) y de la zona nocturna (verde) para la simulación con inercia térmica alta y razón polvo-hielo baja. El promedio ha sido calculado pesando la temperatura superficial de la celda superficial con su contribución a la producción total de CO.

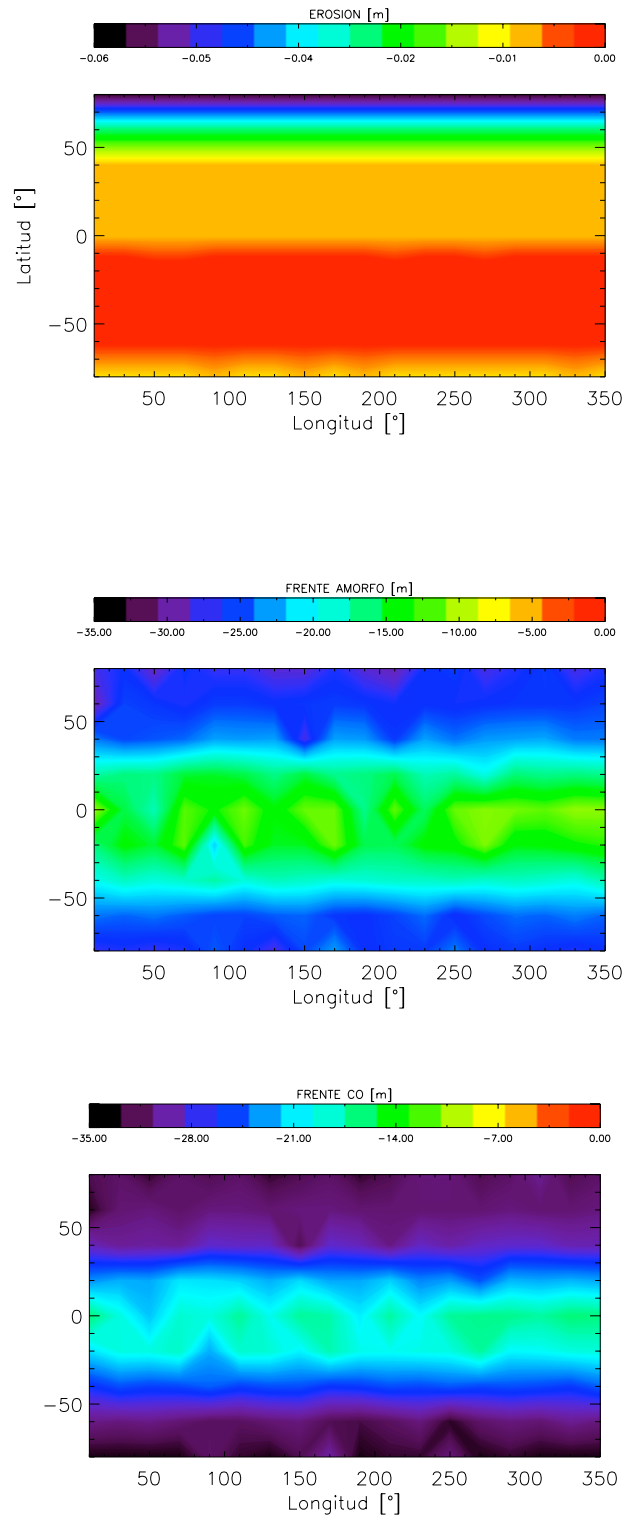
za la termalización completa. En cualquier caso, como ya ha sido mencionado, el desacuerdo en los valores de las estimaciones obtenidas por los distintos autores a partir de los mismos datos observacionales hace que cualquier discusión al respecto sea altamente especulativa.

Finalmente, la Fig. 4.18 muestra la ocurrencia de explosiones para esta simulación. Teniendo en cuenta la conversión de producción de monóxido de carbono en magnitud de Biver (2001) encontramos que durante el período de simulación, donde han desaparecido prácticamente los efectos estacionales, se producen 97 explosiones con magnitud mayor que 1, es decir, 3.2 explosiones/año con una separación media de 110 días. Estos valores, en nuestra opinión, se podrían considerar indicio de compatibilidad con las observaciones. Como se ha repetido en varias ocasiones, no tiene sentido un ajuste perfecto de las observaciones pues, por ejemplo, la conversión de producción de monóxido de carbono a brillo, que se basa en un ajuste global de observaciones radio, no tiene que ser válido cuando



**Figura 4.18:** Explosiones identificadas según el procedimiento descrito en el texto (e igual al utilizado en la Fig. 6) para la simulación con alta inercia térmica y baja razón polvo-hielo. Los puntos verdes marcan las explosiones que ocurrirían si el umbral de detección estuviese en 0.5 mag, brillo obtenido a partir de la producción de CO utilizando la relación lineal de Biver (2001)

ocurre una explosión, donde se pueden desencadenar una serie de procesos complejos. De hecho, es evidente que en esta simulación no se obtienen frecuentemente explosiones que según la relación de Biver (2001), produzcan cambios mayores de 2 magnitudes. Dada la complejidad del problema del brillo en la coma, más allá de nuestras posibilidades con el modelo actual, no es posible asegurar que la posible diferencia en brillo sea debida a la producción de monóxido de carbono o a la relación de Biver (2001). Esta circunstancia haría altamente especulativo cualquier intento de ajustar perfectamente las observaciones, aunque siempre sería posible acercarse. Por ejemplo, si considerásemos las explosiones que producen, según la relación de Biver (2001), un cambio en magnitud mayor que 0.5, obtendríamos 243 explosiones durante el período de simulación, unas 8 explosiones/año con una separación media de 44 días, valores que sí se podrían considerar compatibles con las observaciones de Trigo-Rodríguez et al. (2010). En nuestro caso, el análisis me-



**Figura 4.19:** Erosión (arriba), localización del frente de cristalización (centro) y de sublimación de CO libre (abajo) en metros al final del período simulado en el caso de un núcleo con razón polvo -hielo baja e inercia térmica alta.

diente periodograma de Lomb de los momentos en los que ocurren las explosiones

(tanto las mayores de 1 mag como las mayores de 0.5 mag), como se hizo en el caso nominal, no proporciona frecuencias significativas por lo que no es posible, analizando los datos globalmente, concluir nada sobre su posible periodicidad. En cualquier caso, la simulación realizada muestra que es posible obtener aumentos repentinos de brillo con una separación media del orden de los 50 días que no estarían relacionados ni con la rotación del núcleo ni con la existencia de zonas activas, como es la interpretación de Trigo-Rodríguez et al. (2010). Si las explosiones de actividad del 29P están causadas por la cristalización del hielo amorfo, la frecuencia de su ocurrencia depende, esencialmente, de las características físicas del núcleo (razón polvo-hielo e inercia térmica, principalmente).

La figura 4.19 muestra la localización de los distintos frentes al final de la simulación considerada. La primera diferencia con el caso nominal (descrito en la Fig. 4.11) es que hay parte de la superficie, en el hemisferio sur y concretamente cerca del ecuador, que ahora no se erosiona. Ello se debe a que al aumentar la proporción de hielo cristalino y, por tanto, aumentar la inercia térmica en la región superficial, aumenta la energía que va hacia el interior, disminuyendo la temperatura superficial y la producción de agua superficial, que es la que mantiene estructuralmente el núcleo. El frente de cristalización se localiza a una profundidad máxima de, aproximadamente, 30 m en el hemisferio norte y 11.5 m en el ecuador. Recordando que la Fig. 4.11 corresponde sólo a 10 años de simulación (aunque a partir de entonces el avance de los frentes se ralentizaba significativamente y, de hecho, la erosión quedaba estancada) y la Fig. 4.19 corresponde a 30 años, el frente de cristalización resulta en este caso significativamente más profundo que en el caso nominal. Esto es una velocidad de propagación media del máximo de, aproximadamente,  $2.7 \cdot 10^{-3}$  m día<sup>-1</sup> frente a los  $0.9 \cdot 10^{-3}$  m día<sup>-1</sup> del caso nominal. El frente de sublimación de monóxido de carbono libre evoluciona a una velocidad ligeramente superior, encontrándose a una profundidad máxima de 34 m y mínima de 17 m.

Teniendo en cuenta esta última simulación se puede decir que los parámetros que caracterizan este núcleo proporcionan una interpretación razonable de todos los hechos considerados en este estudio. Es cierto que sería un asunto pendiente el mostrar que estas condiciones se mantienen en períodos de simulación más grandes, de al menos 6 órbitas. Una diferencia importante de esta simulación, comparada con la otra posible solución que mencionamos anteriormente (i.e. un núcleo con las características del modelo nominal durante sus primeros 10 años de simulación), es que la erosión superficial necesaria para mantener el régimen de actividad ahora sería mucho menor. Así, en el caso de que los frentes alcanzasen profundidades tales que alejasen las producciones de los niveles observacionales, es posible que una eficiencia en la emisión de granos helados baja (que sería compatible con el límite observacional de producción de agua sin requerir la supervivencia de los granos liberados) permita mantener los frentes a distancias compatibles con las observaciones. Esto sería algo a tener en cuenta en las futuras simulaciones a largo plazo.



## 4.12. Otras magnitudes

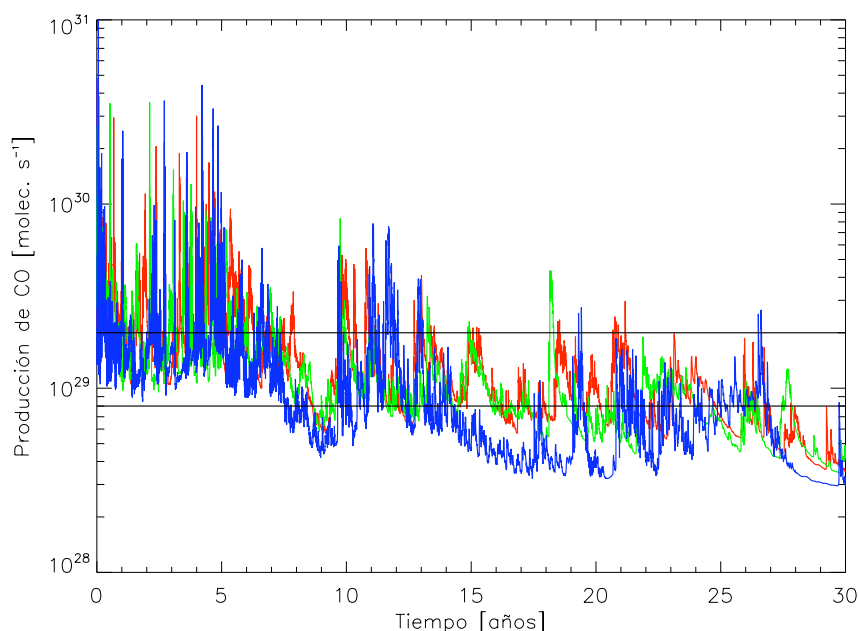
Todas las simulaciones de este apartado comparten razón de polvo-hielo baja y factor de Hertz alto por lo que, en adelante, nos referiremos a ellas por el parámetro que las diferencia. Llamaremos al caso con razón polvo-hielo baja y factor de Hertz alto modelo de referencia al ser, hasta ahora, el que mejor reproduce el comportamiento del 29P.

### 4.12.1. Efecto de la densidad

La densidad del núcleo supone un cambio en las cantidades absolutas de los distintos componentes volátiles y, por ello, en la inercia térmica. La mayor cantidad de materia se traduce en una mayor necesidad energética para alcanzar una temperatura dada. El aporte energético procedente del Sol se mantiene, mientras que el debido a la cristalización aumenta al aumentar la densidad (la variación del calor liberado en sublimación-condensación con la densidad no es significativo al depender de la temperatura). Esto hace que al principio de la simulación del caso más denso se tarde más en alcanzar las temperaturas necesarias para activar el proceso de cristalización. La Fig. 4.20 muestra la tasa de producción de la simulación de referencia (i.e. como la nominal pero con razón polvo-hielo baja e inercia térmica alta), junto con la de núcleos con las mismas características excepto la densidad, mostrando los casos de densidades 300 y 700 kg m<sup>-3</sup>.

La figura 4.20 nos muestra que mientras el caso con densidad baja mantiene la producción de monóxido de carbono prácticamente dentro de los límites observacionales, un aumento de la densidad produce una ligera reducción de la producción de monóxido de carbono. Dicho de otra manera, al disminuir la densidad hasta el valor de 300 kg m<sup>-3</sup>, la menor cantidad de hielo de monóxido de carbono se compensa con la menor inercia térmica y, por tanto, con la menor necesidad de energía para aumentar la temperatura en el interior del núcleo. Por el contrario, al aumentar la densidad y tener una mayor necesidad energética, la producción de monóxido de carbono cae ligeramente. La diferente necesidad energética cuando la densidad del medio cambia se traduce en que los frentes evolucionan más lentamente conforme aumenta la densidad. En los dos pasos orbitales encontramos que la profundidad máxima del frente de monóxido de carbono varía desde los 31 m del caso con densidad elevada a los casi 40 m cuando la densidad es la menor de las consideradas.

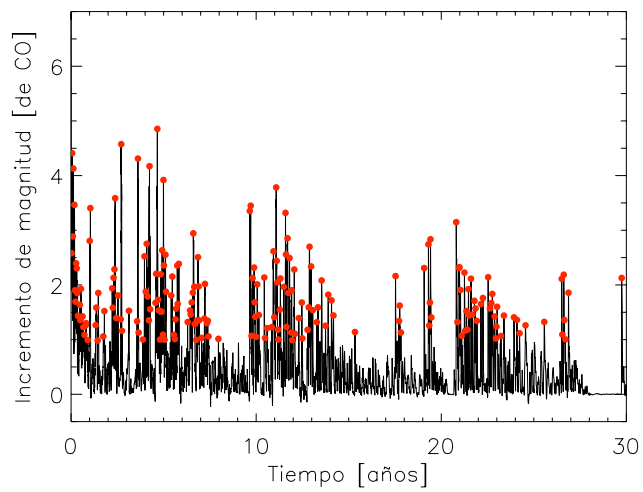
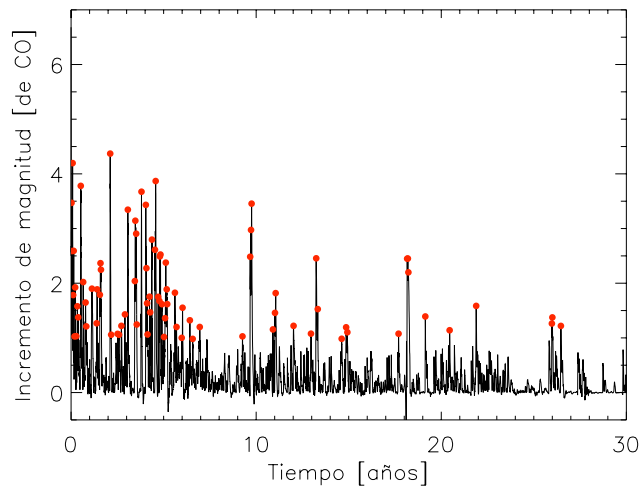
En estas simulaciones, en principio, cabría decir que mientras que una densidad en el rango 300-500 kg m<sup>-3</sup> sería compatible con las observaciones de producción de monóxido de carbono, una densidad mayor empezaría a estar marginalmente fuera de la compatibilidad. Sin embargo, si consideramos la incertidumbre en el tamaño del núcleo, se requeriría sólo un ligero aumento de la conductividad para mantener la producción de monóxido de carbono del núcleo denso dentro de los límites observacionales. Dado que las diferencias son pequeñas y aún se pueden disminuir considerando la incertidumbre razonable tanto en el tamaño como en la



**Figura 4.20:** Tasas de producción de monóxido de carbono mostrando el efecto de la densidad para un caso de razón polvo-hielo baja e inercia térmica alta. La línea roja corresponde a una densidad de  $450 \text{ kg m}^{-3}$  (caso de referencia), la verde a  $300 \text{ kg m}^{-3}$  y la azul a  $700 \text{ kg m}^{-3}$ .

conductividad térmica, consideramos que una densidad en el rango 300-700 sería compatible con el comportamiento del 29P en lo que a producción de monóxido de carbono se refiere.

La Fig. 4.21 muestra las explosiones identificadas, como en los casos anteriores, cuando la densidad es  $300 \text{ kg m}^{-3}$  y  $700 \text{ kg m}^{-3}$ . Un resultado inesperado según el estudio realizado en el capítulo anterior es el aumento del número de explosiones identificadas cuando la densidad aumenta. En el estudio resumido del capítulo anterior se mostró que un aumento de la densidad implicaba una disminución de la frecuencia en los aumentos bruscos de la velocidad de cristalización. Ello se entiende por, como venimos describiendo, la mayor necesidad energética del interior del núcleo conforme su masa aumenta. Sin embargo, las simulaciones realizadas en circunstancias más realistas, las de este estudio, indican lo contrario. La simulación correspondiente a una densidad de  $300 \text{ kg m}^{-3}$  permite identificar unas 82 explosiones mayores que 1 magnitud (i.e. 2.7 explosiones/año), con una



**Figura 4.21:** Explosiones identificadas en las simulaciones mostrando el efecto de variaciones de la densidad sobre el caso de referencia. El panel superior muestra la simulación correspondiente a un núcleo con densidad  $300 \text{ kg m}^{-3}$  y el inferior uno con densidad  $700 \text{ kg m}^{-3}$ .

separación media de 20 días. Cuando la densidad es  $700 \text{ kg m}^{-3}$ , el número de explosiones prácticamente se duplica, alcanzando las 196, esto es 6.5 explosiones/año con una separación media de 55 días, valores compatibles con los derivados en el

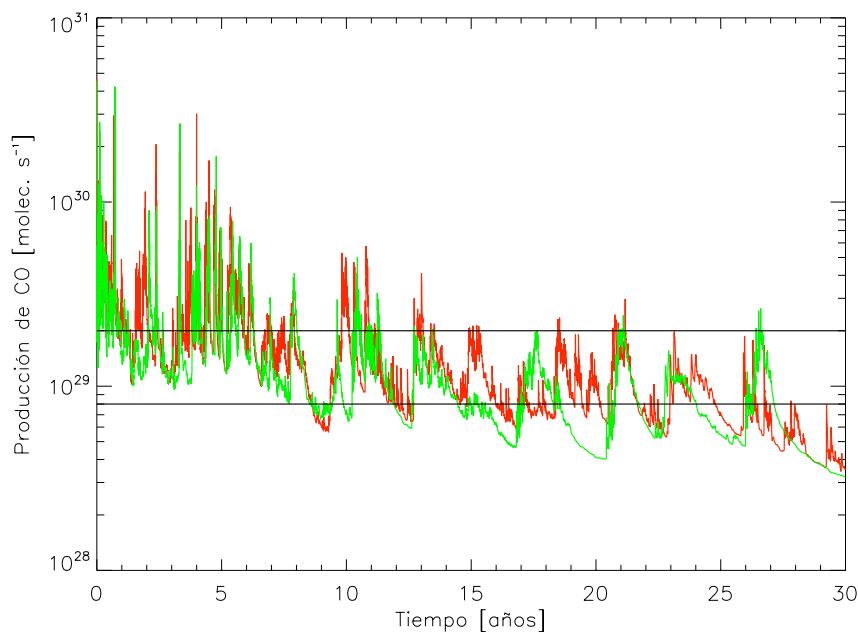
estudio de Trigo-Rodríguez et al. (2010). Como referencia, recordar que cuando la densidad es  $450 \text{ kg m}^{-3}$  se identificaron 97 explosiones mayores de 1 mag en todo el período de simulación. Ocurre además que, cuando la densidad es mayor, las explosiones implican cambios de producción (y presumiblemente de brillo) mayores, más compatibles, utilizando la relación de Biver (2001), con las observaciones. Entendemos que las diferencias con el estudio anterior provienen por un lado de la situación realista actual y por otro de la duración de las simulaciones. Al disminuir la densidad, como ya hemos dicho en varias ocasiones, la energía requerida por el medio para alcanzar una temperatura dada disminuye. Además ocurre que, en primera aproximación, al variar la densidad, no cambian ni el aporte energético desde fuera ni la conductividad, ni la capacidad calorífica del sistema (en realidad sí cambiarían un poco porque al tener evoluciones diferentes, cambia la razón polvo-hielo superficial y, por tanto, la difusión de calor hacia el interior). Todo esto se traduce en que el medio ligero alcanza la temperatura de cristalización más fácilmente que el denso. Esto, como vimos en las simulaciones del capítulo anterior, favorece en principio la aparición de explosiones. Sin embargo, en simulaciones de largo término, se produce un efecto similar al obtenido en el estudio de la cristalización cuando elevábamos significativamente la conductividad, se obtiene una velocidad de cristalización elevada pero sin rachas. Esta circunstancia hace que las explosiones en el medio ligero se favorezcan cuando el punto subsolar se mueve a regiones más frías.

Entonces, considerando los resultados de las explosiones, la simulación más compatible con las observaciones sería la de una densidad alta. Sin embargo, recordamos que ésta podría requerir de un ligero aumento de la inercia térmica para elevar la producción media. Esto, según lo descrito anteriormente, tendería a reducir el número de explosiones por lo que se podría considerar similar a la solución obtenida con la densidad nominal.

De acuerdo a los resultados obtenidos en estas simulaciones, teniendo en cuenta la incertidumbre en el tamaño, podemos concluir que el modelo resulta compatible con las observaciones, sin necesidad de hipótesis adicionales, para una razón polvo-hielo baja (en torno a 0.1), una densidad en el rango  $450\text{-}700 \text{ kg m}^{-3}$  y una inercia térmica de  $200 \text{ Jm}^{-2}\text{K}^{-1}\text{s}^{-1/2}$  o ligeramente superior para la superficie de referencia.

#### **4.12.2. Reducción del monóxido de carbono atrapado.**

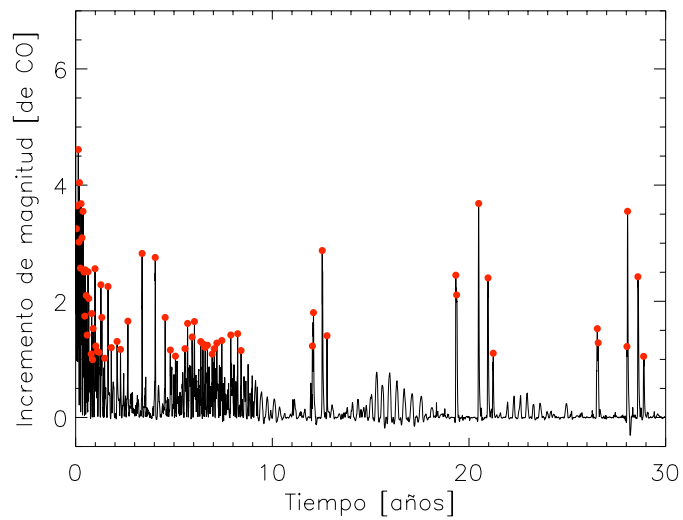
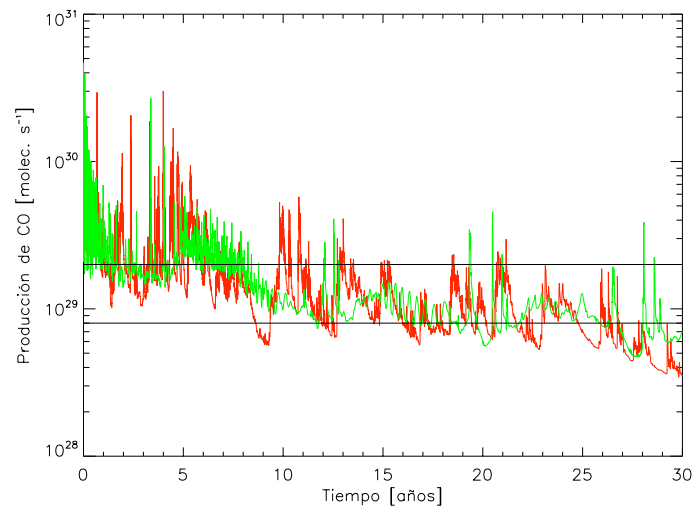
La reducción del contenido de monóxido de carbono atrapado en el hielo amorfo revela de nuevo, como se puede ver en la figura 4.22, la estacionalidad de la producción. Esto nos permite concluir que el valor del 10 % en masa es el contenido mínimo que necesita el modelo para mostrar un comportamiento compatible con las observaciones de 29P.



**Figura 4.22:** Producción de CO en una simulación en la que el contenido de hielo atrapado es del 5 % en masa (verde) comparada con la producción del modelo de referencia (rojo).

#### 4.12.3. Energía liberada en la cristalización.

Como se ha mencionado en varias ocasiones, la energía liberada en la cristalización es tratada de diferente manera por diferentes autores. Desde reacciones casi puramente exotérmicas en las que la energía de cristalización es reducida por la energía específica del dopante considerando que éste se comporta como un gas (e.g. Prialnik 1992 o Tancredi et al. 1994) hasta una reacción endotérmica o neutra (e.g. Sirono y Yamamoto 1999) pasando por el caso intermedio en el que la energía necesaria para desorber el dopante se estima a partir del calor latente de sublimación (e.g. Enzian et al. 1997). En nuestro caso, con un 10 %, el primer caso supondría considerar una reducción mínima de la energía liberada en la cristalización de amorfo puro, aproximadamente  $6 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1}$  según las estimaciones de Prialnik (1992). Este caso sería prácticamente igual a nuestra simulación de referencia donde la energía es la liberada en la cristalización del hielo amorfo puro. Hemos realizado la correspondiente simulación considerando que la energía liberada en la cristalización se reduce a la mitad, lo que correspondería a un caso



**Figura 4.23:** Arriba: tasa de producción de monóxido de carbono del modelo de referencia (rojo) comparada con la obtenida en una simulación en la que la energía liberada en la cristalización es la mitad de la liberada en una reacción puramente exotérmica (verde). Abajo: Explosiones identificadas en la simulación con la energía de cristalización reducida.

en el que el dopante se desorbe como si estuviese condensado libre y consume la

energía correspondiente a su calor latente de sublimación. Este caso sería similar al considerado por Enzian et al. (1997). La evolución de la producción de monóxido de carbono en esta nueva simulación se muestra en el panel superior de la figura 4.23 donde también se muestra la producción de monóxido de carbono de la simulación de referencia. Se puede ver que la producción de monóxido de carbono de la simulación se mantiene entre los límites observacionales a pesar de la reducción del aporte energético. Ello ocurre porque, al liberarse menos energía, los frentes evolucionan más lentamente, estando más cerca de la superficie que en el modelo de referencia. En este caso, el frente de cristalización alcanza una profundidad máxima de 14.4 m y el de sublimación libre de 20 m. Así, las producciones no podrían ser un criterio para definir qué energía liberada en la cristalización muestra mayor compatibilidad con las observaciones.

Si consideramos las explosiones identificadas (panel inferior de la Fig. 4.23) vemos que ocurren 67 aumentos bruscos de actividad, i.e. 2.2 por año, afectadas significativamente por la estacionalidad, estarían lejos de ser compatibles con la de Trigo-Rodríguez et al. (2010).

Estas simulaciones nos permiten concluir que el mayor grado de compatibilidad con las observaciones se obtiene cuando el dopante ocluido en el interior de la estructura amorfa se comporta como un gas, con una ligera reducción de la energía liberada en la cristalización del hielo amorfo puro.

### **4.13. Resumen de los principales resultados y conclusiones**

Considerando válidas las hipótesis contenidas en el modelo descrito y utilizando las estimaciones observacionales más realistas y probables para el tamaño y orientación del eje de rotación, el comportamiento del 29P (las tasas de producción de los constituyentes mayoritarios agua, monóxido de carbono y polvo; la ocurrencia de frecuentes explosiones de actividad y la producción desde el lado no iluminado) resulta compatible, sin necesidad de hipótesis adicionales, con un núcleo

-constituido por hielo amorfo con un contenido del 20 % de monóxido de carbono, siendo un 10 % atrapado y un 10 % atrapado libre. Estos contenidos de monóxido de carbono estarían sólo ligeramente por encima del contenido máximo derivado de los experimentos de Notesco et al. (2003). Sin embargo, la pequeña diferencia podría deberse a las condiciones concretas de los experimentos realizados, siendo posible que el hielo amorfo desarrollado en ausencia de gravedad presente una estructura más abierta, capaz de albergar cantidades algo mayores de monóxido de carbono. Futuros experimentos de laboratorio podrían confirmar esta posibilidad.

-Una razón polvo-hielo muy baja, del orden de 0.1. Este resultado recupera la idea original de Whipple que describía a los cometas como bolas de nieve sucias cifrando su razón polvo hielo en un valor relativamente bajo, alrededor de 0.5. Si

este valor se confirma y generaliza, las observaciones, por ejemplo del Tempel 1, que arrojaban una razón polvo-hielo muy elevada podrían ser debidas al desarrollo evolutivo de un manto superficial.

-Una densidad entre 450 y 700 kg m<sup>-3</sup>, intervalo que resulta compatible con las densidades cometarias así como con las derivadas en Centauros y KBOs a partir de sus características rotacionales.

-Una inercia térmica, en la superficie de referencia, del orden de 200 Jm<sup>-2</sup>K<sup>-1</sup>s<sup>-1/2</sup> o ligeramente superior si la densidad está en el límite superior del intervalo mencionado. Este valor resulta compatible con las últimas estimaciones realizadas a partir de los datos térmicos tomados en Tempel 1.

-Una energía de cristalización compatible con el hecho de que el monóxido de carbono atrapado se comporte, energéticamente, como un gas sublimando al desorber. Este resultado sugiere la realización de experimentos de laboratorio para determinar en qué circunstancias físicas ocurre eso, especialmente las relacionadas con la formación del hielo amorfo y la deposición del dopante.

Las características de este núcleo hacen que los frentes de cristalización y sublimación del monóxido de carbono evolucionen a velocidades similares, lo que permite obtener una producción de monóxido de carbono elevada sin requerir cantidades enormes de hielo de monóxido de carbono condensado libre. Las frecuentes explosiones de actividad se explicarían por la cristalización del hielo amorfo, cuya velocidad experimenta aumentos bruscos debido a la acumulación de energía en el propio frente, almacenada en él por el aislamiento que produce la estructura abierta del hielo amorfo.

El hecho de que el núcleo del 29P necesite una baja razón polvo-hielo y, a la vez, la existencia de hielo amorfo en su interior pueden estar relacionados. Al tener un contenido reducido de polvo, la incorporación de material radiogénico es relativamente pequeña y, por tanto, la energía liberada en el decaimiento radiactivo podría tener un impacto reducido. Sería necesario desarrollar un modelo que incluyese esta característica para comprobar esa hipótesis. Alternativamente, si aún con esa pequeña cantidad de polvo el calentamiento radiogénico fuese lo suficientemente importante para elevar la temperatura nuclear, la conservación del hielo amorfo requeriría una formación relativamente tardía de estos cuerpos helados.

Nuestros resultados se podrían considerar preliminares puesto que habría que comprobar que el régimen de actividad se mantiene tras sucesivos pasos orbitales, al menos 6. Sin embargo, hay indicios de que esto será así. Es posible que si el período de simulación se extiende considerablemente, sea necesario incluir la erosión de hielo cristalino. Sin embargo, visto el comportamiento tras dos órbitas, la expulsión de granos helados requerida debe ser pequeña y podrá cumplir, fácilmente, con el límite observacional para la detección de agua. Además, el hecho de que el modelo favorezca una solución en la que el núcleo almacena energía en su interior (por su inercia térmica relativamente alta) reduce las ya limitadas necesidades de erosión de hielo cristalino.



## Capítulo 5

# Aplicación del modelo al cometa Hale-Bopp

Como segunda aplicación del modelo que hemos introducido en capítulos anteriores realizaremos un estudio basado en el análisis de los resultados de una amplia batería de simulaciones del cometa Hale-Bopp obtenidos con nuestro modelo. En primer lugar describiremos el objetivo de nuestro estudio y los motivos que nos llevaron a la realización del mismo. Posteriormente, mencionaremos las suposiciones adicionales que hemos hecho sobre el modelo general para este trabajo, que son las mismas realizadas en el capítulo anterior. Finalmente detallaremos los resultados y las conclusiones que hemos obtenido.

### 5.1. Contexto y motivación

En esta sección describiremos lo que conocemos acerca del cometa Hale-Bopp, los resultados de otros modelos termofísicos que han sido aplicados a la simulación del mismo y los motivos que hacen relevante el estudio que presentamos.

#### 5.1.1. El cometa Hale-Bopp

El cometa Hale-Bopp (C/1995 O1) es uno de los más conocidos y más intensamente observados de las últimas décadas. Fue descubierto, como su nombre oficial indica, en el año 1995 a más de 7 UA y posteriormente se constató que aparecía en datos de observaciones anteriores a 13 UA del Sol. Su brillo de 10 magnitudes a tales distancias heliocéntricas auguraba un espectáculo sin precedentes al acercarse al Sol, aunque el aumento en la actividad dependía de las características internas del núcleo. Hale-Bopp alcanzó el perihelio en abril de 1997 y superó todas las expectativas, pudiendo verse a simple vista desde la Tierra durante más de un año. La actividad posperihelio fue menor que la preperihelio (ver e.g. Weaver et al., 1999) pero, aunque mitigada, la actividad continuó durante mucho tiempo. Szabó et al. (2008) detectaron actividad en el núcleo incluso a una distancia

heliocéntrica 25.7 UA. Dicha actividad no sería producto de la sublimación de agua (ya que las temperaturas a esas distancias indican que no es significativa), sino que ha sido atribuida a la producción de monóxido de carbono, mucho más volátil. En un trabajo posterior, los mismos autores (Szabó et al., 2011) realizaron la detección más distante al Sol, a 30.7 UA. Aparentemente, aún a esta distancia despliega cierta actividad de bajo nivel, ya que suponiendo lo contrario el núcleo tendría que ser mucho más grande que lo estimado (o tener un albedo demasiado elevado) para explicar las observaciones.

A continuación, detallaremos la información observacional de Hale-Bopp más relevante para nuestro estudio.

#### 5.1.1.1. Características orbitales

La órbita del cometa Hale-Bopp es poco usual, en el sentido de que presenta una inclinación orbital próxima a los  $90^\circ$  con nodo ascendente próximo a la órbita de Júpiter y descendente próximo a la de la Tierra. Las efemérides de Marsden (1995) indican que esta no es la primera vez que pasa por la parte interna del Sistema Solar. Se estima que su anterior perihelio sucedió hace aproximadamente 4600 años, lo que indica un periodo relativamente corto dentro de los cometas de largo periodo. Estas características orbitales podrían indicar que Hale-Bopp es un cometa recientemente capturado por perturbaciones jovianas. Además de por esta razón, Schleicher et al. (1997) consideran que no puede ser un cometa nuevo por la evolución de su brillo, que aumentó significativamente al acercarse al Sol. Para Schleicher et al. (1997) esto sería una prueba de que ya no quedaban en el núcleo elementos supervolátiles, que aumentarían el brillo a mayores distancias heliocéntricas, haciendo que el perfil global fuese plano. No obstante, este fenómeno también podría deberse al hecho de estar los elementos supervolátiles atrapados en el interior del núcleo por algún motivo (presencia de hielo amorfo, clatratos hidratados, bolsas de gas, etc.).

Bailey et al. (1996) hicieron un estudio dinámico de la evolución orbital (pasada y futura) del cometa Hale-Bopp, para evaluar las probabilidades de cada una de las posibilidades. Para ello estimaron los parámetros orbitales actuales a partir de las observaciones y realizaron baterías de simulaciones (en ambos sentidos temporales) variando ligeramente los elementos orbitales de modo sistemático. Al ser la órbita caótica, no es posible la determinación a muy largo plazo ya que errores prácticamente despreciables se propagan hasta acabar siendo significativos. Los autores concluyeron que, si bien el cometa no es dinámicamente nuevo en el sentido de venir directamente de la nube de Oort, sí que es relativamente joven (no lleva más de unos pocos pasos por la zona interna del Sistema Solar) y tiene un 15 % de probabilidades de evolucionar en un rasante de Sol. Otro resultado muy importante de este estudio es que al determinar los parámetros orbitales en 1995 y 1997 encontraron que eran muy diferentes. Esto se debe a que el 5 de Abril de 1996 tuvo un encuentro cercano con Júpiter que modificó su órbita.

### 5.1.1.2. Composición

Como es habitual, la información referente a la composición química de este cometa procede de la coma, en la cual se han encontrado gran cantidad de moléculas diferentes. El trabajo de Biver et al. (1997) nos indica que Hale-Bopp es un cometa típico en este sentido, con la excepción del HNC, cuya abundancia sufrió variaciones mayores de lo esperado entre 2.9 y 1.4 UA. Por otro lado, el trabajo de Crovisier et al. (2004) es un inventario de las moléculas detectadas en la coma a partir de espectroscopía en radio, confirmando la detección de múltiples orgánicos (muchos de ellos complejos) e imponiendo límites superiores a especies no detectadas. El estudio de Cosmovici et al. (2006), orientado a los gases nobles, detectó por primera vez las bandas de  $H_2$  y  $N_2$ , ya esperadas. Además, estos autores también informaron de una posible detección de argón, lo que implicaría una relativa riqueza de este material. Esto significa que el interior cometario no habría alcanzado las temperaturas necesarias (alrededor de los 35 o 40 K) como para eliminar el argón primordial. La ausencia de ciertas especies también puede darnos información acerca del núcleo cometario. Cosmovici et al. (2006) no detectaron neón, lo que implica una escasez en el material cometario frente a las abundancias solares.

Al igual que en otros cometas, el segundo componente volátil en importancia detectado en Hale-Bopp es el monóxido de carbono, con abundancia media cerca del perihelio de un 24 % frente al agua según DiSanti et al. (2001), y de un 37 a un 41 % según Brooke et al. (2003). Si bien hay un cierto acuerdo en que la proporción de CO en la coma es elevada, no se puede decir lo mismo respecto a su fuente. Los trabajos de DiSanti et al. (1999) y DiSanti et al. (2001) concluyen que a distancias heliocéntricas menores aproximadamente que 1.5 UA la producción de CO es en un 50 % nuclear y el 50 % restante distribuida, siendo nuclear a distancias mayores. El trabajo de Dello Russo et al. (2000) apoya esta hipótesis, ya que observan que los perfiles espaciales de densidad de CO en la coma se desvían de lo que sería esperable en caso de que su fuente fuese principalmente nuclear. La fuente distribuida se activaría al sobrepasar un umbral térmico y los autores sugieren que dicha fuente podrían ser las partículas CHON. De manera independiente, Brooke et al. (2003) sostienen que la mayoría del monóxido de carbono a distancias heliocéntricas pequeñas proviene de una fuente distribuida, probablemente también de granos de polvo carbonáceos. Finalmente, el trabajo de Kuan et al. (2004) defiende que la mayoría de la producción de CO (consistente en abundancia con la estimación de DiSanti et al. 2001) es nuclear, y similar a estimaciones de otros cometas de largo periodo. El trabajo de Gunnarsson et al. (2003) simula la emisión suma de tres posibles fuentes de monóxido de carbono (el sublimado en la superficie nuclear, el liberado o sublimado a ciertas profundidades del núcleo y el sublimado de granos helados en la coma) y la compara con los perfiles de líneas de emisión obtenidos de las observaciones. Entre sus conclusiones destaca en primer lugar que el monóxido de carbono procedente de la sublimación de granos helados en la coma a distancias heliocéntricas pequeñas resultaría indistinguible del procedente del núcleo. Tam-

bién es importante notar que Gunnarsson et al. (2003) obtienen producciones de monóxido de carbono un 40 % más bajas en media que las de Biver et al. (2002) a partir de los mismos datos al dejar de asumir que la expulsión de gas es isótropa.

La posible presencia de granos helados en la coma (en particular de agua, que son los que han sido estudiados observacionalmente) merece cierta discusión. En primer lugar, Davies et al. (1997) informaron de la detección de rasgos característicos de absorción del hielo de agua en el espectro de Hale-Bopp a unas 7 UA del Sol, que se asociaron a hielo de agua mezclado con material refractario, posiblemente en forma de granos en la coma. Este hielo, además, no presentaría el pico en  $1.65 \mu\text{m}$  que hemos mencionado en la introducción, lo que indica que podría estar en estado amorfo. Por su lado, Grün et al. (2001) detectaron posibles indicios de granos de agua helados entre 4.9 y 4.6 UA del Sol, esta vez en estado cristalino.

La existencia de granos helados en la coma encuentra también apoyo en algunas evidencias indirectas. Rauer et al. (1997) proponen que la presencia de granos helados a distancias heliocéntricas relativamente grandes podría aumentar artificialmente el parámetro  $Af\rho$  de la coma <sup>1</sup>. Al irse acercando al Sol el hielo sublimaría y bajaría el albedo de dichos granos, de modo que el aumento en la producción de polvo quedaría enmascarado por los valores anteriores, explicando el perfil plano de  $Af\rho$  a grandes distancias heliocéntricas (cuando lo esperable sería que aumentase al aumentar la producción de gas). A menores distancias heliocéntricas, concretamente a 2.9 UA, los espectros estudiados por Lellouch et al. (1998) y Crovisier et al. (1999) mostraban también rasgos característicos indicativos de la presencia de granos de hielo de agua en la coma. El primero de los trabajos que acabamos de mencionar, además, concreta que dichas partículas heladas tendrían un radio medio del orden de las  $15 \mu\text{m}$  (con un factor 2 de incertidumbre), estarían a una temperatura aproximada de 153 K y su vida media sería de unos dos días. El trabajo de Biver et al. (1997) presenta otro argumento favorable a la presencia de granos helados de agua (y también de  $\text{CH}_3\text{OH}$ ) en la coma, que es que más allá de 3.5 UA el OH presenta menor corrimiento al azul que el CO. Esto indicaría que procede, al menos en parte, de la sublimación de granitos helados en la coma. Por otro lado, también hay estudios que no encuentran indicios de la presencia de granos de hielo en la coma de Hale-Bopp. Según Dello Russo et al. (2000) (que realizaron observaciones entre enero y mayo de 1997, cerca del perihelio) los perfiles espaciales de agua y polvo son compatibles con que su fuente sea nuclear, y la contribución de una fuente distribuida sería pequeña. Ya en la rama posperihelio, las observaciones de Weaver et al. (1999) no muestran indicaciones de la presencia de granos helados de agua en la coma. Como posición intermedia, el trabajo de McCarthy et al. (2007) encuentran posperihelio rasgos de absorción de hielo de agua en granos a menos de 4000 km of the coma, pero no en los más distantes. Al

---

<sup>1</sup>El parámetro  $Af\rho$  nos permite estudiar la actividad y las propiedades de los granos de polvo presentes en las comas cometarias independientemente del filtro o del diafragma utilizados. A representa el albedo bolométrico de los granos de polvo, f es un factor de llenado (dado por la superficie ocupada por polvo dividida por la superficie del diafragma) y  $\rho$  es el radio del diafragma utilizado en la observación.

calcular también la velocidad de expansión de dichos granos, los autores llegan a la conclusión de que están asociados a una explosión de actividad sucedida unas horas antes de las observaciones.

### 5.1.1.3. Polvo: Eficiencia, distribución de tamaños y composición

El polvo es un componente que no se debe olvidar al tratar la evolución térmica de los núcleos cometarios, ya que su influencia es significativa. Como ya hemos visto en el capítulo 3, la proporción entre hielo y polvo en la matriz modifica las propiedades térmicas del material cometario y, por lo tanto, tiene consecuencias en su evolución. Por ejemplo, el material refractario puede formar un manto en la superficie cometaria, que puede actuar como aislante térmico, pero a su vez ser atravesado por el gas producido bajo la superficie. El efecto del manto depende de las características concretas de su formación en cada momento, que a su vez dependen de las características concretas del polvo y del arrastre por el gas, en las que influirán la composición y distribución de tamaños del polvo y la eficiencia de arrastre.

En primer lugar vamos a hablar de la razón entre las producciones de polvo y gas (que denotaremos por  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$ ) detectada en la coma de Hale-Bopp. Esta magnitud se puede entender como la eficiencia del gas a la hora de arrancar polvo del núcleo y por otro lado es la magnitud más cercana a la razón polvo-hielo del núcleo (aunque la relación entre ambas es compleja y todavía no se ha cuantificado adecuadamente), una de las magnitudes que nos interesa acotar. En general, hay acuerdo en que el cometa Hale-Bopp tiene una razón de polvo-gas en la coma particularmente alta, aunque la cifra concreta ya es una cuestión más discutida. Kidger (1997) calcularon la razón de producciones de polvo-gas en la coma entre 3 y 5 en masa. Estos valores son similares a los de Rauer et al. (1997), que hallan valores  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  entre 2.3 y 6 y Dello Russo et al. (2000), cuyos cálculos dan como resultado  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}} = 5,1 \pm 1,2$ . Entre los que estiman esta magnitud por encima de este rango se encuentran Jewitt y Matthews (1999) (que consideran que la proporción entre polvo y gas en la coma debe ser mayor que 5), y también Grün et al. (2001) (que encontraron una razón polvo-gas entre 6 y 10). La estimación más pequeña para esta magnitud es de Altenhoff et al. (1999) y tiene valor 0.6. También es baja la de Weiler et al. (2003), que obtuvieron una relación con la distancia heliocéntrica y las producciones de polvo y gas  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}} = 1,40 - 0,05r_h$ , aunque suponiendo que el albedo Bond del cometa es 0.02 en lugar de 0.04 aumentaría este resultado un factor 3/2. Estos datos nos indicarían que la razón polvo-gas en la coma varía significativamente con el tiempo, aunque no se puede descartar que parte de la variación se deba a los modelos y aproximaciones que han utilizado los distintos autores para determinar tanto  $Q_{\text{polv}}$  como  $Q_{\text{gas}}$  a partir de las observaciones. Más adelante volveremos sobre esta cuestión, mostrando el posible perfil temporal de la eficiencia.

La distribución de tamaños del polvo de la coma de Hale-Bopp es una cuestión

compleja sobre la que hay gran cantidad de estudios. Es importante recordar que generalmente en las observaciones en un rango espectral determinado sólo se detecta la contribución, principalmente, de los granos con tamaños en un intervalo concreto. Por ejemplo, Harker et al. (2002) indican que más de aproximadamente el 90% del flujo térmico en la región de  $10 \mu\text{m}$  procede de granos con radios menores de  $20 \mu\text{m}$ . Recordemos de la introducción que en los trabajos que ajustan espectros se suelen hacer cortes en tamaños (se toman las partículas entre un radio mínimo y uno máximo  $[r_{\min}, r_{\max}]$ ) que no tienen por qué representar todo el polvo que hay, sino el detectable a las longitudes de onda de las observaciones. Además, también se debe suponer una forma para la función de distribución del polvo  $n(r)$ , que representa el número de partículas de radio  $r$ . Lo más habitual es suponer una distribución exponencial,  $n(r) = r^{-\alpha}$ , donde el exponente  $\alpha$  regula si predominan las partículas pequeñas ( $\alpha > 3,5$ ) o las grandes ( $\alpha < 3,5$ ). Sin embargo, en cada vez más trabajos se está utilizando una distribución tipo Hanner, que es una modificación de una exponencial  $n(r) = (1 - \frac{r_{\min}}{r})^M (\frac{r_{\min}}{r})^N$ , donde  $N$  sería el exponente que jugaría un papel similar a  $\alpha$  en el caso anterior y  $M$  está relacionado con el tamaño mínimo considerado en la distribución  $r_{\min}$  y con el radio al que se alcanza el pico de la distribución  $r_{\text{pico}}$ . Recordemos que no está claro que las ventajas de este tipo de distribuciones vayan más allá de la mejora formal de los ajustes.

Comenzaremos describiendo los trabajos con una distribución exponencial estándar para continuar con las de tipo Hanner. En primer lugar, Lasue et al. (2009) ajustan las propiedades de polarización observadas en Hale-Bopp con un exponente  $\alpha = 3$ , con un radio mínimo  $r_{\min} = 0,2\mu\text{m}$  y un radio máximo  $r_{\max}$  entre  $40$  y  $120 \mu\text{m}$ . En el mismo trabajo, además, se encuentran referencias de las funciones de distribución obtenidas por otros autores para el mismo cometa (algunas de las cuales no mencionaremos en este trabajo por ser similares a las que sí aparecen aquí). Este exponente es similar al obtenido por Kolokolova et al. (2003) a partir de los colores en la coma, entendidos como la razón de intensidades de la luz dispersada en dos longitudes de onda. Kolokolova et al. (2003) consideran una muestra de observaciones espectroscópicas a diferentes longitudes de onda con las que producen cinco colores con los que obtienen una serie de ecuaciones para cada posición en la coma. A continuación resuelven las ecuaciones para obtener los parámetros que minimizan la diferencia entre los colores calculados y observados, obteniendo un exponente  $\alpha = 3,15$  muy estable para todas las fechas y distancias consideradas, y unos radios  $r_{\min}$  entre  $0.08$  y  $0.15 \mu\text{m}$  y  $r_{\max}$  de unos pocos decímetros. Min et al. (2005) ajustan una distribución conjunta con 8 subdistribuciones de distintos componentes, obteniendo un exponente común  $\alpha = 3,48$  (aunque luego lo modifican para alguno de los componentes) y obtienen  $\min(r_{\min}) = 0.01 \mu\text{m}$ ,  $\max(r_{\max}) = 92.8 \mu\text{m}$ . Mayor (por tanto implicaría una distribución inclinada en mayor grado hacia las partículas más pequeñas) es el exponente  $\alpha = 3,9 \pm 1$  hallado por Altenhoff et al. (1999) al ajustar el halo, con tamaño entre  $1 \mu\text{m}$  y  $1 \text{cm}$ .

Pasando a las distribuciones de polvo tipo Hanner, comenzaremos con la del trabajo de Grün et al. (2001), con un exponente  $N=3.5$  radios entre  $0.1 \mu\text{m}$  y  $1$

cm, con  $r_{\text{pico}} = 0,42\mu\text{m}$ . Vasundhara (2002) usaron un modelo fotométrico para seguir la trayectoria de los granos y calcular ciertos parámetros a comparar con las observaciones, obteniendo una distribución Hanner con  $N=3.85$ ,  $M=92$ ,  $r_{\text{min}} = 0,05\mu\text{m}$  y  $r_{\text{max}} = 30\mu\text{m}$ . Jorda et al. (1997) encontraron un exponente  $N$  variando en el intervalo (3.8,4.4) ó (3.2, 3.7) dependiendo del subconjunto considerado, con un radio mínimo de  $0.1\mu\text{m}$  y un radio medio entre  $0.8$  y  $1.3\mu\text{m}$ . También Harker et al. (2002), modelando el espectro con granos de polvo de 5 minerales distintos con radios entre  $0.1$  y  $100\mu\text{m}$ , hallaron una distribución de tamaños cuya pendiente aumentaba en el paso por el perihelio, concretamente de  $3.4$  a  $3.7$ , lo que indicaría un aumento de la proporción de granos pequeños (pese a que podría haber más granos de mayor tamaño presentes, ocultos por el elevado flujo de los pequeños). Sin embargo, el radio pico de la distribución se mantuvo constante  $r_{\text{pico}} = 0,2\mu\text{m}$ . Por otro lado, los modelos de Weiler et al. (2003) de expulsión de gas obtuvieron un radio máximo expulsado de casi un decímetro, y los índices espectrales hallados por Jewitt y Matthews (1999) (similares a los encontrados en los discos de polvo circumestelares de estrellas jóvenes) indican partículas relativamente grandes (del orden de  $1\text{mm}$ ) emitiendo.

Resumiendo, las distribuciones de tamaño calculadas para Hale-Bopp presentan una pendiente entre  $3$  y  $4$ . Además, hay indicios que apuntan a la presencia de granos de radio considerable, a partir de unas  $100\mu\text{m}$  o mayores.

La información acerca de la composición del polvo es relativamente escasa. Lasue et al. (2009) proponen unos porcentajes en masa de silicatos en el intervalo (40,67) y por tanto de orgánicos en (60,33). Vasundhara (2002) obtuvo una razón de masas de silicatos frente a orgánicos  $\frac{m_{\text{silic}}}{m_{\text{org}}}$  entre  $1$  y  $2$ , aunque también apunta que ciertas diferencias detectadas en los granos de la coma y de ciertas estructuras (capas) puede ser debida a diferencias en la razón silicatos/orgánicos más que a diferencias en la distribución de tamaños. Dentro de los silicatos, también tiene importancia la proporción entre cristalinos y amorfos ya que (de modo análogo a lo que ocurría con el hielo de agua) los primeros se forman a temperaturas mayores que los segundos. Wooden et al. (2004) informan de una razón cristalino-amorfo elevada, similar a la del cometa C/2001 Q4 (NEAT). Esto implica que se formaron en reservas similares o, en caso de que esa razón cristalino-amorfo sea común a todos los cometas, que de algún modo los silicatos cristalinos quedaron repartidos por todo el Sistema Solar (bien porque se esparcieron hacia zonas más alejadas del Sistema Solar o porque se calentaron in situ por shock térmicos).

#### 5.1.1.4. Estado rotacional

El estado rotacional de Hale-Bopp está bastante bien determinado. Tanto Jorda et al. (1997) como Licandro et al. (1997) hallaron un período de rotación aproximado de  $11.34$  horas. Estos autores también encontraron inclinaciones del eje de rotación similares ( $84^\circ$  en el caso de Jorda et al. 1997 y  $83^\circ$  en el de Licandro et al. 1998). Las estimaciones de Vasundhara y Chakraborty (1999) también son compatibles con dichas estimaciones, con una inclinación entre  $77^\circ$  y  $90^\circ$ . Además,

éstos últimos estimaron también el argumento del eje de rotación en el intervalo ( $68^\circ$ ,  $84^\circ$ ).

#### **5.1.1.5. Actividad, chorros y morfología de la coma**

El cometa Hale-Bopp desplegó una actividad inusualmente intensa y, debido a ello, además de presentar una cola de polvo particularmente larga, en su coma aparecieron gran cantidad de rasgos morfológicos. Kidger (1997) informó de chorros de polvo distinguibles incluso a grandes distancias, que presentaban comportamientos diferentes en el tiempo. En 1995 parecían tener un período de aproximadamente 20 días, que podría estar asociado a precesión, aunque aparentemente Hale-Bopp no es un cometa muy excitado rotacionalmente. Éstos desaparecieron en las observaciones de 1996, en las que se detectaron hasta 6 chorros de polvo. Ya en 1997, cerca del perihelio, aparecen gran cantidad de nuevas y diversas estructuras. Hasta qué punto y de qué modo están relacionados los diferentes rasgos morfológicos todavía no está claro. En el trabajo de Bockelée-Morvan et al. (2009) los autores describen un chorro de monóxido de carbono (aparentemente independiente de chorros de polvo o de otros componentes volátiles) a bajas latitudes ( $\sim 20^\circ$  de latitud) en el hemisferio norte. El método que utilizan para ello es el modelado de una coma cometaria producto de una fuente de monóxido de carbono que parte de una fuente discreta en el núcleo y una fuente isótropa. Los resultados de su modelo son posteriormente comparados con sus observaciones y concluyen que el comportamiento debe ser más complejo de lo que asumen para el chorro en su modelo (de estructura cónica y espiral). En secciones posteriores volveremos a mencionar este trabajo, ya que adoptan la misma orientación del eje y período de rotación que Jorda et al. (1997), compatible con la que utilizaremos en nuestras simulaciones. Tampoco Lederer et al. (1997) encontraron una correlación obvia entre los chorros de gas identificados en su trabajo y los de polvo, aunque encontraron que si bien los chorros de elementos volátiles aparecen tanto en la zona iluminada como en la no iluminada, los de polvo están restringidos a la zona iluminada. Además de los chorros que acabamos de mencionar, se han detectado también otro tipo de estructuras (principalmente formadas por polvo en la coma), como por ejemplo capas o halos.

#### **5.1.1.6. Núcleo**

El intenso brillo de la coma de Hale-Bopp tuvo una desventaja desde el punto de vista científico: No permitió observar más allá de la coma, de modo que tenemos poca información acerca de las características del núcleo. La falta de datos es tal que incluso Sekanina (1998) ha propuesto que es binario. Esta hipótesis es la consecuencia de su trabajo de modelado de los halos de polvo del cometa, que ajusta con 3 fuentes de polvo en dos núcleos que rotan en sentidos opuestos. Es por ello que aún disponiendo de estimaciones acerca de su tamaño efectivo, el rango plausible de estimaciones para dicho tamaño es bastante amplio. Por un



lado, Weaver et al. (1997) acotó el diámetro del cometa entre los 27 y 42 km y, por otro, Fernandez (2002) estimó el radio en 30 km, con una incertidumbre de 10 km como compromiso de compatibilidad entre la mayoría de las observaciones. El estudio que acabamos de mencionar está relacionado con el de Weaver y Lamy (1997), en el que también se revisan las diferentes estimaciones del tamaño hechas mediante diferentes técnicas y llegan a resultados parecidos. Además de las que acabamos de mencionar, tenemos también estimaciones dadas por Sekanina (1997) ( $R = 35,5 \pm 2$  km), Altenhoff et al. (1999) ( $R = 22,1$  km con un valor medio de 24 km) y McCarthy et al. (2007) ( $R = 20 \pm 5$  km), que entrarían dentro del rango aceptable dado por Fernandez (2002).

### 5.1.1.7. Estimaciones de las distintas producciones

Finalmente, y aunque en algunas secciones de las inmediatamente anteriores hemos tratado ya someramente este tema, destacar que dado el impacto que generó en la comunidad científica la aparición del Hale-Bopp, disponemos de gran cantidad de datos observacionales. Entre ellos serán de especial importancia para nuestro estudio las producciones de agua, monóxido de carbono y polvo de los trabajos recopilados en la tabla 5.1, y que se muestran en la Fig. 5.1.

**Cuadro 5.1:** Resumen de las distintas referencias de las que tomamos las producciones de agua, monóxido de carbono y polvo para la realización de este trabajo.

Referencia	Producción
Biver et al. (2002)	H <sub>2</sub> O, CO
Brooke et al. (2003)	H <sub>2</sub> O, CO
Crovisier et al. (1999)	H <sub>2</sub> O, CO
Woods et al. (2000)	H <sub>2</sub> O, CO
Weaver et al. (1997), Weaver et al. (1999)	H <sub>2</sub> O, polvo
Dello Russo et al. (2000)	H <sub>2</sub> O
Combi (2000)	H <sub>2</sub> O
Gunnarsson et al. (2003)	CO
DiSanti et al. (2001)	CO
Jewitt y Matthews (1999)	polvo
Rauer et al. (1997)	polvo
Grün et al. (2001)	polvo

Biver et al. (2002) calcularon la producción de agua (a partir de la de OH) y monóxido de carbono, entre otros volátiles, a partir de observaciones de radio realizadas con distintos telescopios. También Brooke et al. (2003) nos proporcionaron la producción directa de agua y monóxido de carbono en algunas fechas, en este caso a partir de espectroscopía infrarroja (obtenida en la *NASA Infrared Telescope Facility* en el observatorio de Mauna Kea). Crovisier et al. (1999) obtu-

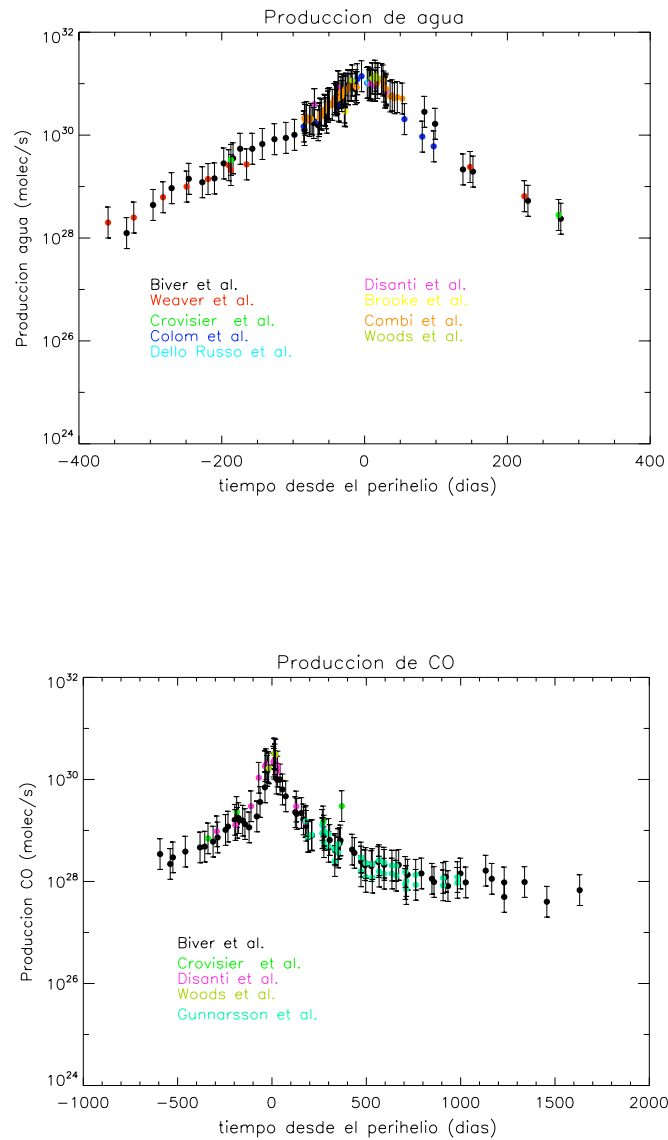
vieron producciones de agua y monóxido de carbono a partir de las observaciones espectroscópicas con ISO, el observatorio infrarrojo espacial. El trabajo de Woods et al. (2000) nos proporciona la producción de agua y monóxido de carbono a partir de medidas de OH y C, respectivamente, de observaciones en el ultravioleta realizadas con el instrumento SOLSTICE. Los resultados que obtienen son coherentes con los de los otros grupos. El telescopio espacial Hubble dedicó parte de su tiempo de observación al cometa Hale-Bopp, cuyos resultados se pueden consultar en Weaver et al. (1997), (1999). Estos autores calcularon producciones de agua a partir de la emisión molecular del OH en los espectros obtenidos y también los valores del parámetro  $Af\rho$  a partir de fotometría absoluta. A partir de dicho parámetro se realizó una estimación de la producción de polvo supuestas una velocidad, densidad, radio medio y albedo geométrico para el polvo. Dello Russo et al. (2000) utilizaron espectroscopía infrarroja de alta resolución para calcular las producciones de agua de Hale-Bopp. Este es el primer estudio sobre la dependencia heliocéntrica del agua liberada por un cometa a partir de observaciones de la propia molécula de agua.

Finalmente, el trabajo de Combi (2000) revisa las producciones de agua calculadas por diferentes autores y nos previene de que las producciones asociadas al gran tamaño de Hale-Bopp hacen que su coma sea distinta de lo que sería normal para otros cometas, sobre todo en los meses que rodean al perihelio, por la gran cantidad de gas y los pequeños tiempos de disociación. La zona colisional de la coma es más grande, y la velocidad de expansión, así como la temperatura cinética aumentan con tasas de producción mayores <sup>2</sup>. Por estas razones, usar en el cálculo de las producciones la velocidad estándar en el contexto cometario de 1 km/s podría llevar a errores de un factor 2 ó 3. Este argumento es de gran importancia y lo utilizaremos en nuestro estudio. Generalmente los errores asociados a las producciones proceden de errores fotométricos, de calibración o de incertidumbre en las tasas de disociación. Estos factores llevan a errores formales que, generalmente, suponen un error inferior al factor 2. Sin embargo, la incertidumbre asociada tanto al patrón de emisión o a la velocidad de expansión (que exige un tratamiento hidrodinámico de la coma) puede ser mucho mayor y en raras ocasiones se incluye. Teniendo en cuenta el argumento anterior, en lo que sigue, asignaremos un factor 2 como incertidumbre conservativa en las tasas de producción. Este factor 2 queda representado por las barras de error mostradas en las figuras de la producción.

El trabajo de Gunnarsson et al. (2003) nos presenta la producción de monóxido de carbono de Hale-Bopp a grandes distancias heliocéntricas a partir de espectros tomados con SEST. Las producciones totales que deducen a partir de los mismos datos de Biver et al. (2002) resultan en media un 40% más bajas, ya que para calcularlas no asumen que la producción sea isótropa, sino que hay diferencias día-noche. DiSanti et al. (2001) también estimaron la producción de monóxido

---

<sup>2</sup>La fuente principal de calor de la parte interna de la coma es la disociación del agua en H + OH, que proporciona una energía significativa al átomo de hidrógeno disociado. Como estos hidrógenos deben colisionar varias veces para hacer efectivo el calentamiento, es en el interior de la zona colisional donde este proceso es más eficiente.



**Figura 5.1:** Producciones de agua (panel superior) y de monóxido de carbono (panel inferior) a partir de los datos de las referencias dadas en la tabla 5.1. En ambos casos se han añadido las barras de error correspondientes a la incertidumbre observacional. Las producciones calculadas por cada uno de los autores en la tabla 5.1 aparecen representadas en un color diferente.

de carbono utilizando espectroscopía infrarroja de alta resolución en la zona de

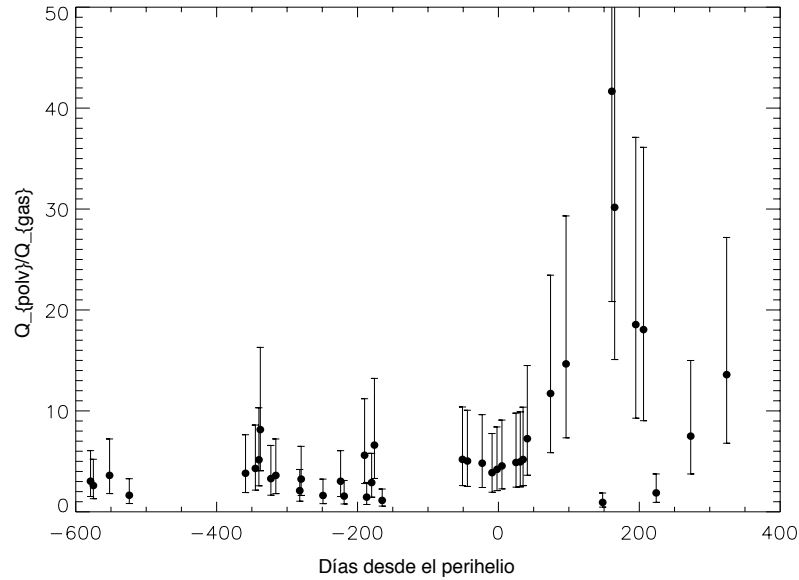
las  $4.7 \mu\text{m}$ . Además de la producción, obtuvieron su temperatura rotacional y su distribución espacial en la coma, de la que dedujeron que había una fuente nuclear y otra distribuida.

El trabajo de Jewitt y Matthews (1999) presentó las observaciones de polvo en la región submilimétrica (realizadas con el James Clerk Maxwell Telescope en Mauna Kea) que, a diferencia de las ópticas e infrarojas, es más sensible a las partículas grandes de polvo. Las estimaciones de polvo que obtuvieron a partir de dichas observaciones son más de 5 veces mayores comparadas con las de gas de Biver et al. (2002) mencionadas anteriormente. Rauer et al. (1997) calcularon el parámetro  $Af\rho$  del cometa Hale-Bopp (a partir de observaciones en el óptico con el Danish Telescope en ESO) que utilizaron para estimar la producción de polvo. Grün et al. (2001) realizaron fotometría infrarroja con ISOPHOT (el fotómetro a bordo de ISO), lo que les permitió estimar la producción de polvo en algunas fechas, asumido un modelo para el polvo.

A partir de todos estos datos, y dado que los volátiles mayoritarios detectados en Hale-Bopp son agua y monóxido de carbono, con gran diferencia respecto al siguiente, podemos calcular la eficiencia, o dicho de otro modo la razón entre las producciones de polvo y gas,  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$ . La gráfica 5.2 presenta la razón polvo-gas calculada interpolando en tiempo las producciones de los distintos componentes de modo que se puedan comparar (ya que los datos originales están tomados en fechas diferentes). Como se puede observar,  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  presenta una gran dispersión y grandes variaciones con el tiempo, algo que ya mencionamos con anterioridad.

Respecto a la razón entre las producciones de agua y monóxido de carbono que se deriva de estos datos, será presentada en secciones posteriores para su comparación con la obtenida en nuestro modelo.

En resumen, podemos decir que, dentro de los posibles errores de los que nos advierte Combi (2000), las producciones de volátiles calculadas por los distintos autores son coherentes entre sí y nos proporcionan unos perfiles fiables con los que comparar los resultados de nuestras simulaciones. Todo esto se puede comprobar en la Fig. 5.1, en la que se muestran los datos observacionales para las producciones de agua y monóxido de carbono calculadas por los autores mencionados anteriormente (Tabla 5.1) con sus correspondientes barras de error. El panel superior de la Fig. 5.1 presenta la producción de agua del cometa Hale-Bopp frente al tiempo desde el perihelio. La producción de agua varía entre, aproximadamente  $10^{28}$  y  $10^{31}$  molec  $\text{s}^{-1}$  y presenta asimetría pre y post perihelio y diversos cambios de pendiente. El panel inferior de la figura 5.1 presenta la producción de monóxido de carbono. Ésta también es asimétrica respecto al perihelio, variando en este caso entre unas  $10^{28}$  y  $5 \cdot 10^{30}$  molec  $\text{s}^{-1}$ . Ya hemos visto (Fig. 5.2) que la eficiencia o razón  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  muestra una gran dispersión y variabilidad con el tiempo. Anteriormente ya se mencionó que es posible que parte de esa dispersión y variabilidad provenga de los distintos modelos y suposiciones utilizados por los diferentes autores para derivar las producciones de polvo a partir de los datos observacionales así como de la inhomogeneidad de los propios datos observacionales para derivar



**Figura 5.2:** Eficiencia de arraste o razón entre las producciones de polvo y gas ,  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$ , a partir de los datos de las referencias en la tabla 5.1. Las barras de error corresponden a la estimación conservativa de un factor 2 como error en la producción de gas (ver texto).

$Q_{\text{polv}}$  ( $Af\rho$ , imágenes térmicas, visibles, etc.). Por otro lado, además de los posibles problemas derivados de la inversión de los datos observacionales, la variabilidad y dispersión de  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  pueden enmascarar efectos y procesos de la coma (e. g. fragmentación del polvo) con una compleja dependencia heliocéntrica. Todo esto nos impide afirmar con rotundidad cual es el comportamiento físico de esta variable y, por lo tanto, de la producción de polvo.

### 5.1.2. Modelos Previos

Dada la espectacularidad del Hale-Bopp y la riqueza de los datos observacionales han sido varios los modelos teóricos utilizados para estudiar este cometa. Considerando todos los modelos desarrollados hasta la fecha podemos distinguir dos grupos en atención a su tratamiento geométrico: los que utilizan aproximaciones monodimensionales (como la del punto subsolar o el rotador rápido) y los que utilizan una geometría tridimensional teniendo en cuenta el efecto de la orientación

del eje de rotación.

Al primer grupo pertenecen modelos como los de Prialnik (1997a,1997b), Flammer et al. (1998), Capria et al. (2002) y Huebner y Benkhoff (1997). La mayor parte de estos modelos fueron realizados pronto, poco después del descubrimiento del Hale-Bopp y tenían un marcado carácter predictivo. El problema de estos modelos monodimensionales es que, a pesar de que su descripción es bastante completa incluyendo procesos físicos complejos, su aplicabilidad y especialmente la información física que proporcionan cuentan con un serio inconveniente. Hoy sabemos que la orientación del eje de rotación favorece el desarrollo de efectos estacionales y afecta significativamente a la evolución temporal de los perfiles de producción, creando entre otras cosas asimetrías alrededor del perihelio. Si el modelo no tiene en cuenta la orientación del eje de rotación (como ocurre en las aproximaciones monodimensionales) los efectos estacionales deben ser asumidos por una de las hipótesis del modelo o, en el peor de los casos, asumido en especulación al intentar interpretar los datos observacionales discrepantes con los resultados del modelo. Como simple ejemplo, mencionar los trabajos de Prialnik (1997a,1997b). En estos trabajos, muy valiosos desde el punto de vista teórico, se obtenía por un lado que el flujo de CO comenzaba demasiado pronto y, por otro, que el desarrollo de manto sobre la superficie ahogaba la producción de CO postperihelio, ambas comparadas a las determinadas observacionalmente. La solución propuesta por la autora en sus conclusiones era, por un lado, que los poros debían ser muy grandes para retrasar lo máximo posible el comienzo del flujo de CO y, por otro, que el tamaño máximo de la distribución de polvo era de  $10 \mu\text{m}$ , lo que evitaría la formación de manto postperihelio y mantendría una producción de CO postperihelio relativamente alta. Ambos efectos, comienzo y retroceso de la producción de CO se ven afectados significativamente por la orientación del eje de rotación, circunstancia que no es tenida en cuenta en los modelos monodimensionales. Así, los resultados de Prialnik podrían ser un ejemplo de cómo posibles efectos derivados de la limitación del modelo llevan a modificar una hipótesis que podría incluso ser contraria a lo que nos indican las observaciones, como ocurre en este caso con el tamaño del polvo liberado (según se describió anteriormente).

Uno no puede negar el enorme valor teórico de las aproximaciones monodimensionales en los modelos termofísicos cometarios, pero también ha de reconocer su limitada aplicabilidad en la interpretación de los datos observacionales. Por ello no nos detendremos más en las características y resultados del primer grupo de modelos, centrandó nuestra atención en el segundo. Antes de ello habría que hacer una puntualización que deriva de nuestra imposibilidad de describir correctamente el trabajo de Capria et al. (2002). Estos autores realizaron simulaciones multiórbita del Hale-Bopp para estudiar los efectos de la presencia de hielo amorfo. Nos consta, no sólo por la afirmación de los propios autores sino por la aplicación de su modelo a otros cometas, que el modelo de Capria et al. (2002) está preparado para hacer un tratamiento cuasi-3D. Sin embargo, no nos es posible afirmar que ésta fuese la versión utilizada para analizar los datos del Hale-Bopp. Aunque los autores mencionan que tienen en cuenta la orientación del eje de rotación, no mencionan cuál

utilizan, tampoco mencionan el período de rotación o la discretización superficial del cuerpo y tampoco los resultados de las producciones de agua parecen afectados por asimetría estacional o variabilidad rotacional. Dado que los autores mencionan en el artículo que el modelo puede trabajar tanto en cuasi-3D como con la aproximación del rotador rápido, pensamos que por las necesidades computacionales de la simulación multiórbita y la ausencia de efectos rotacionales y estacionales en los resultados, optaron por utilizar la aproximación monodimensional, simplificando así el tratamiento. Como resumen de este trabajo, creemos monodimensional, decir que sus simulaciones sugerían la presencia de hielo amorfo para explicar la producción de CO, pero no encontraron una explicación satisfactoria para el agua más allá de 3 UA.

Dentro del segundo grupo de modelos, cuasi 3-D, incluimos los de Enzian (1999), Kührt (1999,2002) y Gortsas et al. (2011).

El primero de ellos, el de Enzian (1999) es una adaptación del modelo termofísico presentado en Enzian et al. (1997) y descrito en el capítulo anterior en su aplicación al cometa 29P. Como anteriormente, Enzian et al. (1997) suponen que el núcleo, con razón polvo-hielo de 1, está constituido inicialmente por hielo amorfo con CO atrapado y codepositado, condensado libre. Como una simplificación respecto al modelo utilizado en Enzian et al. (1997), el aplicado al Hale-Bopp no incluye ningún tratamiento para el polvo (ni producción, ni erosión, ni formación de manto) cuyo papel es pasivo, afectando sólo a las propiedades térmicas de la matriz cometaria. El modelo de Enzian (1999) incluye, además, una hipótesis que, si bien podría estar fundamentada, resulta algo artificial. Enzian (1999) consideran dos órbitas del cometa Hale-Bopp con un eje de rotación que en la primera órbita es perpendicular al plano orbital y en la segunda aparece contenido en él. Los resultados obtenidos se resumen en su figura 1. En ella se puede ver que el ajuste de los datos existentes en el momento del trabajo de Enzian (1999) es razonable para la segunda órbita para el CO. La producción de agua, al igual que en el caso de Capria et al. (2002) presenta mayores dificultades, mostrando discrepancias que a grandes distancias heliocéntricas alcanzan más de un orden de magnitud. Esto se confirmaría y haría más evidente si incorporásemos más datos observacionales. Esta diferencia, ya en aquel momento notada por Enzian (1999), se justificaría en base a la emisión de partículas heladas ya que la alternativa, un aumento de la conductividad térmica, desajustaría la producción de CO. En cualquier caso y más allá de las posibles diferencias entre los resultados y las observaciones de H<sub>2</sub>O, entendemos que el principal inconveniente en el trabajo de Enzian (1999) es que para reproducir las observaciones de CO en la segunda órbita, necesita que el núcleo tenga una orientación perpendicular a la de una órbita anterior, lo que resulta algo artificial.

La producción de agua es el foco de atención de Kührt (1999). Ese trabajo consideró una orientación del eje de rotación fija y compatible con las determinaciones de Jorda et al. (1997) y Licandro et al. (1997). Sin embargo, el modelo es muy simple desde el punto de vista termofísico, prescindiendo de componentes volátiles secundarios, transporte de gas, desarrollo de manto, etc. En Kührt

(1999) el núcleo estaría constituido sólo por hielo cristalino y polvo, cuyo papel es estático y simplemente reduce la superficie nuclear disponible para la sublimación de agua cristalina desde la superficie y la difusión de calor de estado sólido hacia el interior. Considerando como parámetros libres la conductividad superficial y la emisividad de la superficie, Kührt (1999) intenta ajustar la producción observacional del Hale-Bopp para determinar estos dos parámetros. Sus mejores resultados se muestran en su figura 2. Kührt (1999) obtendría así que la conductividad superficial del hielo debe ser  $0.001 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  y la emisividad cercana a la unidad. El mayor inconveniente del trabajo realizado por Kührt (1999) es la simplicidad de su modelo que deja abierta la posibilidad de que la conductividad obtenida sea compatible con la producción de CO.

Kührt (2002) retomó la interpretación de los datos observacionales de Hale-Bopp considerando un modelo más complejo, que supuestamente incluía el desarrollo de manto y el transporte de gas desde el interior, refiriendo para detalles del modelo a Kührt y Keller (1994). Lamentablemente no nos es posible confirmar ni resumir las aproximaciones utilizadas en su modelo ya que las descripciones que el autor realiza tanto en Kührt (2002) como en Kührt y Keller (1994) son muy vagas o inexistentes como sucede en concreto con las relacionadas con la sublimación interior del monóxido de carbono. En cualquier caso, aceptando sus propios resultados como válidos y manteniendo la hipótesis principal del trabajo anterior (la presencia de hielo cristalino), Kührt (2002) reevalúa la conductividad térmica que mejor reproduce la producción observacional aumentándola en un orden de magnitud el valor que obtenía en su trabajo anterior. Kührt (2002) encuentra que la producción de CO obtenida por el modelo considerando la nueva conductividad no puede explicar los datos observacionales. Para ello sería necesario que el CO procediese sólo de la superficie y que la conductividad fuese un orden de magnitud mayor que la que ajusta los datos de agua, algo que crea una inconsistencia. Además de la inconsistencia en la conductividad térmica que ajusta los datos simultáneos de agua y CO con este modelo, entendemos que la exigencia de tener CO superficial es muy alta pues la elevada volatilidad de este compuesto hace que a distancias heliocéntricas relativamente pequeñas su frente de sublimación evolucione a gran velocidad. Además la sublimación superficial del monóxido de carbono no encuentra soporte en las velocidades de expansión determinadas en observaciones radio realizadas cuando el cometa está a grandes distancias heliocéntricas (e.g. Biver et al., 1997) que sugieren termalización y calentamiento del gas antes de liberarse en la coma.

Una versión más completa, termofísicamente hablando, del modelo de Kührt (1999,2002) ha sido presentada en un trabajo reciente realizado, en el mismo grupo de investigación, por Gortsas et al. (2011). Estos autores mantienen la hipótesis principal del modelo de Kührt, la cristalinidad del hielo presente en el núcleo del Hale-Bopp (80 % del material volátil) con monóxido de carbono condensado libre (20 %). La razón polvo-hielo toma el valor canónico de 1. El modelo incluye conducción de calor, advección, difusión de gas por el interior, sublimación y recondensación, pero no incluye el desarrollo de manto, por lo que el polvo se con-



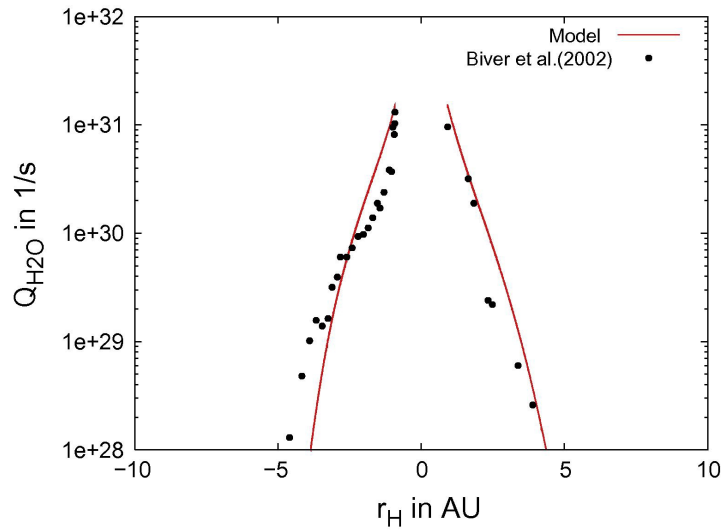
sidera un componente estático. Sí incluye, y de manera muy novedosa, la erosión superficial, resolviendo el problema de Stefan. Cuando la conductividad térmica es baja (como indican los propios resultados de Kührt 2002) y la velocidad de erosión es significativa ésta última se puede comparar a la velocidad de propagación de la onda térmica diurna. De este modo consideran el movimiento del frente de cada componente volátil resolviendo una ecuación y dan a entender que en el caso del agua dicho movimiento coincide con la recesión de la superficie. En cada paso temporal, calculan dicha recesión y mueven la superficie y los nodos interiores de modo que la resolución espacial quede constante e interpolan las variables a los nuevos nodos (utilizando splines cúbicos para la temperatura e interpolación lineal en el resto de los casos). De un modo similar, siempre asumen que la interfaz de monóxido de carbono queda en uno de los nodos de la malla, y varían el número de nodos de profundidad a la que queda dependiendo tanto del movimiento del frente de monóxido de carbono como del de la superficie.

También hay que mencionar, con respecto al tratamiento de gases, que éste está simplificado, realizando una aproximación estacionaria. Como parámetro clave dada la aproximación de Stefan utilizada, los autores estudiaron el comportamiento del núcleo para distintas conductividades efectivas de la matriz, encontrando que el mejor ajuste a las observaciones se obtenía para el valor determinado por Kührt (2002), i.e  $0.01 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ , lo que daría una inercia térmica inferior a  $100 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$  en la superficie de referencia <sup>3</sup>. Es importante aclarar que tanto en el trabajo de Gortsas et al. (2011) como en los de Kührt la conductividad térmica de la matriz se considera constante. Para esa conductividad térmica y con respecto a la producción de CO, si uno integra la producción que obtienen Gortsas et al. (2011) en todo el cuerpo, el modelo no reproduce los datos observacionales, con importantes sobreestimaciones a distancias heliocéntricas moderadamente grandes. Por ello, Gortsas et al. (2011), haciendo uso de la hipótesis de Bockelée-Morvan et al. (2009) que establece la existencia de un chorro de CO en latitudes alrededor de  $+20^\circ$ , consideran el caso en el que la actividad de CO está restringida a latitudes superiores a  $+10^\circ$ . Bajo estas circunstancias y considerando que de esa región sólo el 75 % es activa, Gortsas et al. (2011) sí reproducen el perfil observacional de CO.

Con respecto a la producción de agua, el perfil que obtienen se muestra en la figura 5.3. Ese es el perfil que los autores consideran mejor ajuste de los resultados para lo que han tenido que considerar que si bien el monóxido de carbono sólo procede del hemisferio norte con una fracción activa del 75 %, el vapor de agua debe proceder desde toda la superficie con una fracción de actividad del 25 %. Aunque los coeficientes de fracción activa homogéneos por componente podrían tener su base física, no es posible dejar de calificar la solución como artificial ya que es necesario recurrir a aspectos que no se conocen y que no se pueden conocer como serían inhomogeneidades internas. En cualquier caso y en nuestra opinión,

---

<sup>3</sup>Recordemos la superficie de referencia, definida anteriormente para comparar las propiedades térmicas de distintos modelos. Se trata de una superficie con una razón polvo-hielo de 1, en la que el hielo de agua es cristalino y está a una temperatura de 140 K.



**Figura 5.3:** Figura 7 de Gortsas et al. 2011, en la que se presenta la producción de agua obtenida por su modelo (línea) frente a las observaciones (puntos).

como los propios autores reconocen, ese ajuste no mejora sustancialmente las cosas con respecto a los ajustes simultáneos de CO y H<sub>2</sub>O de e.g. Enzian (1999), sino que simplemente se ofrece otra interpretación. Precisamente esto hace que, en nuestra opinión, el problema siga abierto.

### 5.1.3. Motivación

Aunque existen indicios de que el cometa Hale-Bopp no es dinámicamente nuevo (i.e. en su espectacular paso orbital de 1997 no procedía directamente de la nube de Oort), sí se puede calificar, sin duda, de cometa termofísicamente poco evolucionado. Esto, unido a la gran cantidad de datos observacionales disponibles, hace que este cometa sea un auténtico banco de pruebas para los modelos termofísicos.

Hasta la fecha no se han podido explicar, simultáneamente, los perfiles observacionales de producción de agua y monóxido de carbono del cometa Hale-Bopp. Es posible que ello sea debido a las propias hipótesis incluidas en los modelos, incluyendo la aparente necesidad de fuentes distribuidas de difícil modelización. Sin embargo, como describimos en secciones anteriores, los datos observacionales tomados por distintos autores no muestran acuerdo sobre esta última cuestión por lo que no está confirmada ni desmentida la necesidad de fuentes distribuidas, más allá de posibles emisiones puntuales.

Dentro de los modelos cuasi-3D, distinguimos dos propuestas que, siendo contrarias, son capaces de proporcionar una interpretación parcial de los datos. Por un lado, Enzian (1999) asumiendo hielo amorfo con monóxido de carbono atrapado ajustan razonablemente bien el monóxido de carbono mientras que fallan al explicar la producción de agua a distancias heliocéntricas relativamente grandes.

**Cuadro 5.2:** Parámetros y condiciones iniciales de modelos cuasi-3D aplicados por los distintos autores mencionados en el texto a Hale-Bopp

Parámetro	Enzian et al. (1997)	Kührt (2002)	Gortsas et al. (2011)
Orbitales y rotacionales			
Radio [km]	35	13 (lim. inf)	30
Excentricidad	0.9953	-	0.99508
Semieje mayor [UA]	193.6	-	185.55
Eje rotación (I, $\phi$ ) [°]	(0,-),(90,-)	(84,64)	(84,105)
Período rotación [h]	10	11.35	11.4
Condiciones iniciales			
Porosidad	-	0.5	0.5
Densidad [kg m <sup>-3</sup> ]	500	-	-
Diámetro poro [m]	10 <sup>-4</sup>	10 <sup>-3</sup>	10 <sup>-4</sup>
Albedo	0.04	0.04	0.04
Emisividad	0.96	0.9	-
Hielo amorfo	sí	no	no
Fracción de agua	0.4	-	-
Fracción de CO atrapado	0.05	-	-
Fracción de CO libre	0.05	-	0.1
Fracción de polvo	0.5	-	0.5

La misma capacidad de ajuste tiene el modelo de Gortsas et al. (2011) pero ahora suponiendo que el núcleo es cristalino con monóxido de carbono codepositado. Ambos modelos adolecen de un tratamiento dinámico del polvo con desarrollo de manto. En el trabajo de Enzian (1999) simplemente no es considerado. En el de Gortsas et al. (2011) el manto se desarrolla artificialmente a posteriori estableciendo los coeficientes de actividad (75 % para el monóxido de carbono sólo en el hemisferio norte y 25 % para el agua en toda la superficie) que mejor ajustan los datos. Esa es la principal diferencia de nuestro modelo con respecto a los cuasi-3D mencionados. Se pretende, como se ha dicho en varias ocasiones, encontrar una posible interpretación a los datos observacionales de Hale-Bopp con el modelo presentado en el capítulo 2, en el que el manto y, por tanto la fracción de superficie activa se desarrollará de una manera consistente con las hipótesis incluidas en el modelo. De este modo, partiremos de condiciones iniciales homogéneas (que representarían las propiedades promedio que se pueden deducir actualmente de las observaciones) y el núcleo evoluciona según sus características internas y condiciones de iluminación de modo que el manto se podrá desarrollar de manera no homogénea. La capacidad del modelo para reproducir los datos nos dirá si es posible proporcionar una interpretación sobre la naturaleza del Hale-Bopp (construyendo los principales parámetros) o son necesarias hipótesis adicionales como la producción de granos helados. Nuestro modelo, según se ha descrito, comparte con Enzian (1999) la principal hipótesis: el núcleo está constituido por hielo amorfo con monóxido de carbono atrapado. Las diferencias termofísicas de nuestro modelo comparado con el de Enzian (1999) ya fueron descritas en el capítulo anterior.

#### 5.1.4. Metodología

Como ya se ha mencionado, los estudios dinámicos confirman que Hale-Bopp sufrió un encuentro cercano con Júpiter en 1996 que redujo sustancialmente tanto su semieje mayor como su período orbital, trayéndolo a la órbita en la que desplegó su espectacularidad. Para estudiar la evolución con el tiempo de las producciones de un núcleo simulando al Hale-Bopp, en principio y estrictamente, sería necesario desarrollar una simulación multiórbita similar a las desarrolladas por Capria et al. (2002). Sin embargo, el hecho de que antes de su encuentro con Júpiter orbitase con un semieje mayor superior a las 300 UA reduce su actividad a una fracción muy pequeña de su órbita de enorme período. Capria et al. (2002) confirman esta idea afirmando, además, que esa actividad concentrada está acoplada a una fuerte erosión que reduciría significativamente el impacto de la posible diferenciación termofísica ocurrida por órbita. Según esta idea, creemos entonces que en primera aproximación es razonable estudiar el comportamiento de Hale-Bopp en una única órbita, la desarrollada a partir del encuentro con Júpiter.

Para conseguir todo lo mencionado en la sección anterior hemos realizado una batería de simulaciones del cometa Hale-Bopp, con los parámetros orbitales y rotacionales más aceptados y una serie de combinaciones variando las magnitudes menos constreñidas. Posteriormente, hemos procedido a compararlas con las observaciones que tenemos, para conseguir ciertas restricciones sobre las magnitudes que estudiamos. Finalmente, analizaremos con mayor detalle el comportamiento del cometa Hale-Bopp con los parámetros óptimos. Los resultados aquí mostrados completan el trabajo presentado en González et al. (2012).

En la tabla 5.3 aparecen los rangos de valores en los que hemos variado los parámetros principales y las condiciones iniciales en el conjunto completo de simulaciones. Es importante recordar nuevamente que, al estar acoplados, no todos los valores son compatibles con todos, sino que han de variarse consecuentemente para no llevar a inconsistencias (por ejemplo, fijar un factor de Hertz, densidad y razón polvo hielo determina una inercia térmica). Como se puede ver en la tabla, el rango probado es amplio, muestreando una zona significativa del espacio de parámetros asociada a nuestro sistema.

El resto de valores para los parámetros termofísicos (presiones de saturación, etc) coinciden con los descritos en el capítulo anterior, de modo que no repetiremos las justificaciones realizadas anteriormente.

En relación a las magnitudes dadas en la Tabla 5.3, destacamos la inercia térmica (controlada principalmente por el factor de Hertz considerado). En la introducción de esta memoria se describió que, de acuerdo a las estimaciones más recientes, resulta razonable un límite superior de unos  $200 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$  para el cometa de la familia de Júpiter Tempel 1, valor que se estimaba a partir de modelos complejos que incluían la posible rugosidad de la superficie. También se describió que, matemáticamente, era posible ajustar los datos térmicos con valores muy superiores de la inercia térmica. Esto, junto con el hecho de que el Hale-Bopp puede proceder de una región diferente a la de los cometas de la familia

**Cuadro 5.3:** Parametros estudiados y condiciones iniciales utilizadas en nuestras simulaciones de Hale-Bopp.

Parámetro	Valor	Unidades
Termofísicos y materiales		
Razón polvo-hielo	0.25-5	–
Fracción de monóxido de carbono	0.05-0.1	–
Inercia térmica	50,200,500,800,1000	$\text{J m}^{-2} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1/2}$
Factor de Hertz $h$	$4,108 \cdot 10^{-4}$ -0.125	–
Eficiencia	0.5-5	–
Energía neta liberada en la cristalización	0,45000,90000	$\text{J kg}^{-1} \text{m}^3$
Rotacionales		
Inclinación eje rotación	84	°
Argumento eje rotación	60	°
Periodo de rotación	11.34	h
Orbitales		
Elipticidad	0.99508	–
Argumento Perihelio	130.589	°
Inclinación	89.43	°
Longitud nodo ascendente	282.47085	°
Distancia al perihelio	0.91413	UA

de Júpiter nos lleva a explorar valores que, de acuerdo a lo generalmente aceptado, se considerarían extremadamente grandes.

Cuando evaluamos la razón  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  ya mencionamos que dadas las dificultades en la inversión de los datos de la coma, las discrepancias entre los distintos autores así como las posibles fuentes de incertidumbres en las estimaciones de  $Q_{\text{polv}}$ , no nos era posible evaluar cuál es el comportamiento físico real de esa variable, no pudiendo establecer de manera fiable si varía o no con la distancia heliocéntrica y, en caso afirmativo, cómo. Por ello, como primera aproximación, en este estudio mantendremos la hipótesis que utilizamos en el capítulo anterior de que la eficiencia es constante. En este caso, la eficiencia será un parámetro libre que intentaremos determinar en base al mejor ajuste de las observaciones de las producciones de agua y monóxido de carbono simultáneamente entendiendo que, con esta aproximación, no es posible ajustar los datos observacionales del polvo. El valor de la eficiencia así estimado representaría un promedio de la experimentada por el Hale-Bopp y, en caso de compatibilidad y en el mejor de los casos, lo esperable y lo que exigiremos es que esté entre los valores determinados a partir de las observaciones y representados en la figura 5.2 En esa figura mostramos que  $\frac{Q_{\text{polv}}}{Q_{\text{gas}}}$  variaba, impredeciblemente, entre un valor inferior a 1 y superando los 50. Sin embargo, los datos parecen favorecer valores inferiores a 5 (10 considerando la barrar de error). Esto nos lleva a explorar los efectos de una eficiencia entre 0.5 y 5.

Finalmente mencionar que, como uno de nuestros objetivos es evaluar el impac-

to de la energía liberada en la cristalización, consideraremos, como anteriormente, tres casos: una reacción puramente exotérmica, una con gran consumo de energía y una energéticamente neutra.

Dado que es una de las características distintivas de este modelo, también hemos estudiado los efectos de la distribución de polvo sobre las producciones. En la tabla 5.4 presentamos las principales distribuciones de polvo utilizadas en este estudio. En todos los casos de la tabla, las fracciones en masa de partículas de cada tamaño serán inicialmente uniformes, y consideraremos tanto distribuciones monodispersas como distribuciones discretizadas de una exponencial tipo  $n(r) = r^{-\alpha}$  (siendo, igual que anteriormente  $r$  el radio de la partícula y  $n(r)$  el número de partículas de radio  $r$ ), con exponente  $\alpha$  entre 3 y 3.5. De este modo, únicamente es necesario presentar los radios que representan cada una de las categorías de polvo a considerar (que en este caso serán cinco).

Además de las variaciones paramétricas que aparecen en la tabla 5.3 cuyo efecto describiremos en secciones posteriores de este capítulo, también hemos realizado pruebas adicionales con otros parámetros para comprobar que, al menos en primera aproximación, el parámetro en cuestión no afectaba a los resultados básicos. Como ejemplos de parámetros que no estudiaremos en mayor detalle podemos citar la densidad volumétrica media del núcleo o el diámetro del poro.

Como hemos mencionado en alguna ocasión, el procedimiento estándar en modelización cometaria para ajustar los datos de producción observacionales define la fracción activa como el factor que reduce la producción global del núcleo teórico hasta los valores observacionales. Como en nuestro caso la fracción activa del núcleo se desarrollará de manera consistente con las hipótesis del modelo según sea la evolución termofísica del núcleo procederemos de otra manera. Las simulaciones serán realizadas para un núcleo con un tamaño de referencia  $R_{\text{nom}}=30$  km, que es el promedio estimado por Fernandez (2002). Una vez obtenida la producción para ese tamaño de referencia normalizamos la producción de agua de nuestro modelo de modo que la producción integrada sea igual a la integral de las estimaciones con las que vamos a comparar, mencionadas en la tabla 5.1. Esto nos proporcionará el valor del radio efectivo,  $R$ , del núcleo simulado del Hale-Bopp. Únicamente serán consideradas compatibles con las observaciones aquellas simulaciones cuyo núcleo tenga un tamaño tras la normalización dentro de la incertidumbre asociada al tamaño del núcleo (según se describió  $\pm 10$  km). Es decir, las simulaciones que tras la normalización nos proporcionen un núcleo con un radio efectivo  $R$  inferior a 20 km o superior a 40 km se considerarán incompatibles con las observaciones. Es importante destacar que hemos comprobado que el cambio en radio a posteriori no produce grandes diferencias en los resultados con simulaciones adicionales realizadas con ese fin. Una vez que las producciones han sido normalizadas al radio efectivo  $R$ , éstas son posteriormente comparadas visualmente con las observacionales. Tratamos de obtener un criterio numérico que nos sirviese para estimar la calidad de los ajustes (a saber, errores  $\chi^2$  y  $\chi^2$  reducidos tanto del valor de producción de agua como del de su logaritmo entre los valores de nuestra aproximación en los puntos con datos y los propios resultados, tanto para los resultados

**Cuadro 5.4:** Distribuciones de polvo utilizadas en nuestro estudio. La distribución 1 supone la formación forzada de manto, incluyendo partículas arbitrariamente grandes que no podrán ser levantadas. La distribución 2 se puede considerar la más realista, inspirada en los datos observacionales, según se ha descrito en el texto. La distribución 3 representa una idealización con partículas monodispersas que, con su pequeño radio, facilitarían la expulsión de polvo entorpeciendo la formación de un manto.

Distribución	$r_i, i = 1..,5$ (m)
Distribución 1	$10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 2 \cdot 10^{-4}, 1$
Distribución 2	$10^{-7}, 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$
Distribución 3	$10^{-6}, 10^{-6}, 10^{-6}, 10^{-6}, 10^{-6}$

en bruto como suavizados), aunque su significancia resultaba pobre debido a que los intervalos cubiertos por los datos observacionales cubren varias magnitudes. De hecho, la calidad de un ajuste viene pesada, directamente por su magnitud dando, por tanto, más importancia a los valores cercanos al perihelio y minimizando la importancia de los datos lejos del perihelio, precisamente donde la difusión térmica y el papel del interior del núcleo tienen mayor importancia. Para corregir este comportamiento sería necesario introducir un sistema de pesos que varíen con la distancia heliocéntrica. Creemos que esto, aunque elegante desde el punto de vista matemático, condicionaría artificialmente los resultados favoreciendo los que mejor reproducen el peso elegido. Por ello creemos que una técnica de minimización en un criterio numérico, en estos casos particulares, no ofrecería mayores ventajas que la simple inspección visual.

Con respecto a las producciones, hay que mencionar que los límites superiores e inferiores dados por Colom et al. (1997) y Weaver et al. (1999) para la producción de agua constituyen otro criterio que nos ha permitido descartar las simulaciones que no los verificaban.

### 5.1.5. Suposiciones adicionales al modelo general

Para realizar este trabajo hemos hecho algunas suposiciones simplificadoras del modelo general tal y como está descrito en el capítulo 2. Al igual que en el capítulo anterior, esencialmente hemos utilizado parametrizaciones sencillas de las magnitudes que controlan la ecuación de la energía, con el doble propósito de ahorrar tiempo de computación y de tener un mayor control de dichas magnitudes de modo que al evolucionar no se salgan del rango inicialmente propuesto.

Concretamente hemos eliminado el factor de la porosidad de la conductividad, de modo que la reducción de la misma debida a la porosidad quedaría incluida en el factor de Hertz, que consideraremos constante. También consideraremos que los calores específicos de los distintos materiales son constantes. Para mayor infor-

mación acerca de las parametrizaciones utilizadas referimos a la sección 4.5.4 del capítulo anterior.

## 5.2. Resultados

Tal y como hemos adelantado en las secciones anteriores, tras realizar más de 200 simulaciones hemos encontrado un conjunto razonable de parámetros tales que, partiendo de condiciones iniciales homogéneas y puestos a evolucionar, nos proporcionan una buena aproximación de las producciones de agua y monóxido de carbono observadas por los diferentes autores mencionados en la sección anterior. Este conjunto de parámetros constituirá nuestro modelo de referencia.

Es importante notar que no podemos garantizar que este conjunto sea único ya que, además de estar limitado por las suposiciones de nuestro modelo, el espacio de parámetros es tan amplio y está tan fuertemente acoplado que es muy difícil predecir exactamente los efectos de cada uno de los cambios. Sin embargo, la calidad del muestreo realizado en nuestro estudio sí nos permite dar cierta información general sobre los efectos de variar ciertas magnitudes clave, que están relacionadas principalmente con la formación y las características del manto de polvo. Para ilustrar dichos efectos, analizaremos las diferencias entre los resultados del modelo de referencia y otros en los que se varía cada uno de los parámetros.

### 5.2.1. Modelo de referencia

**Cuadro 5.5:** Parámetros y condiciones iniciales utilizados en el modelo de referencia

Parámetro	Valor	Unidades
Densidad	500	$\text{kg m}^{-3}$
Inercia térmica	200	$\text{J m}^{-2}\text{K s}^{-1/2}$
Razón polvo-hielo	1	–
Fracción de monóxido de carbono	0.1	–
Distribución de polvo	2 (ver tabla 5.4)	–
Eficiencia	3	–
Emisividad	0.96	–
Albedo	0.04	–
Factor de Hertz	0.0078	–

A lo largo de esta sección describiremos en detalle el comportamiento de la simulación que mejor ajusta las producciones de agua y monóxido de carbono entre las que hemos realizado para este estudio. Los parámetros asociados a estas simulaciones se pueden consultar en la tabla 5.5 y constituyen un conjunto representativo de condiciones inicialmente homogéneas compatibles con las observaciones de agua y monóxido de carbono, en el sentido que hemos descrito



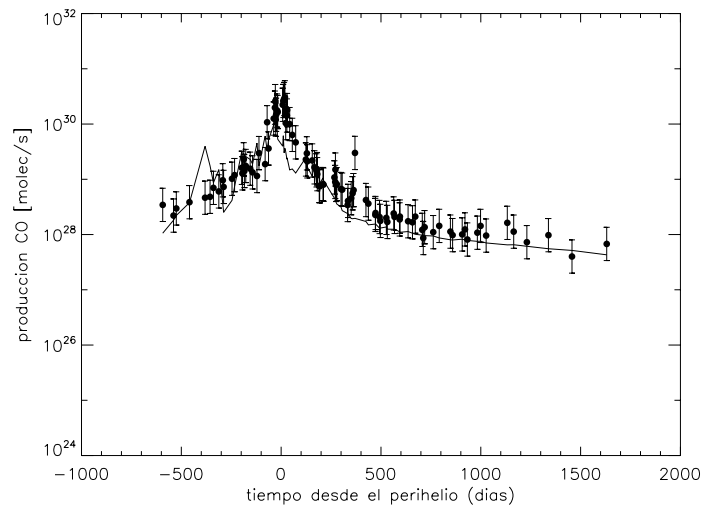
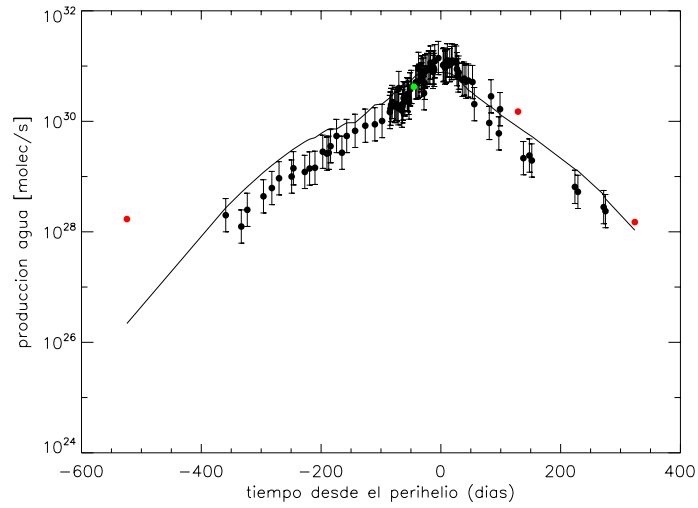
anteriormente. Entre ellas destacaremos una inercia térmica y una eficiencia que se pueden considerar elevadas dentro de lo que se considera para los núcleos cometarios. El monóxido de carbono, cuya abundancia también resulta elevada, estaría inicialmente atrapado en el hielo amorfo en su totalidad. A medida que se produce la cristalización, parte del monóxido de carbono liberado fluye hacia el interior, recondensando. El resto de los parámetros, que se pueden considerar típicos, presentan un núcleo poco denso con una cantidad moderada de polvo. La existencia de este conjunto de parámetros y el hecho de que esté dentro del rango clásicamente aceptado y observado en cometas es una prueba de que lo que creemos que ocurre en los núcleos cometarios, representado por nuestro modelo, es compatible con las observaciones, incluso partiendo de propiedades medias.

#### 5.2.1.1. Comportamiento general

La comparación entre las producciones totales calculadas con nuestro modelo de referencia y las observadas en el cometa Hale-Bopp se pueden ver en la figura 5.4 para el caso del agua y del monóxido de carbono. Las producciones observacionales, representadas por puntos, están tomadas de los trabajos mencionados en la tabla 5.1. Las barras de error representan la incertidumbre asociada a las estimaciones de la producción. Los símbolos rojos y verdes representan límites superiores e inferiores para la producción de agua, sacados de las mismas referencias. Los datos de nuestras simulaciones presentan bastante variabilidad (en parte debida a la rotación, pero también a la energía liberada en la cristalización en el caso del monóxido de carbono), lo que puede dificultar el cálculo de la integral aproximada de la producción de agua necesaria para la normalización. Por eso esas integrales se han realizado con los datos de nuestro modelo interpolados a los momentos de los datos observacionales y son esos mismos datos interpolados los que aparecen representados en las gráficas. El radio final calculado para el núcleo del modelo de referencia es de 23.85 km, que entra dentro del rango de estimaciones aceptadas para el núcleo. Tanto en el caso del agua como en el del monóxido de carbono, la producción calculada por el modelo se encuentra dentro de las barras de error durante la mayoría de la simulación.

En el caso del agua el comportamiento simulado en nuestro caso de referencia reproduce, en primera aproximación, el comportamiento observado a grandes distancias heliocéntricas respetando los límites observacionales superiores e inferiores, como se ve en el panel superior de la Fig. 5.4. Las diferencias entre las observaciones y los resultados de nuestro modelo reducen con creces la desviación de más de un orden de magnitud de las observaciones que aparecía en el trabajo de Enzian et al. (1997). Aunque el acuerdo es más que razonable para las producciones de ambos volátiles, se podría alcanzar todavía un ajuste mejor con parámetros cercanos a los utilizados. Sin embargo, intentar esto no tiene sentido al tratarse de un ajuste de comportamiento, partiendo de propiedades medias (aunque realistas) iniciales del núcleo y al no considerar efectos como los debidos a la geometría del núcleo.

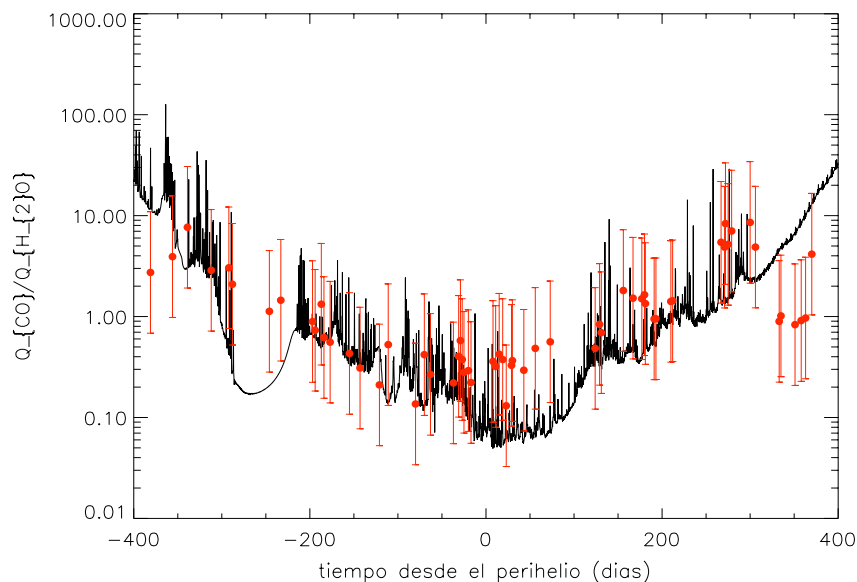
Las características del eje de rotación hacen que el modelo de referencia pre-



**Figura 5.4:** Comparación entre las producciones de agua (arriba) y monóxido de carbono obtenidas por nuestro modelo (línea) y las dadas por los trabajos citados en la tabla 5.1(puntos). Los símbolos rojos (resp. verdes) en la gráfica de producción de agua representan límites superiores (resp. inferiores) para dicha producción.

sente variaciones estacionales. La producción de agua a grandes distancias del Sol

está dominada por el hemisferio sur, mientras que el norte únicamente está iluminado alrededor del perihelio. Esto se ve claramente en la producción de agua (figura 5.4, arriba), en la que los cambios de pendiente reflejan los cambios de iluminación en el núcleo. También asociado a estos cambios de iluminación, el manto de polvo se desarrolla de forma diferente en las distintas latitudes, como veremos más adelante. La producción de monóxido de carbono, a pesar de presentar también un acuerdo aceptable está ligeramente sobreestimada en la zona preperihelio donde se sale de las barras de error, siendo muy variable, con gran cantidad de picos. Esta variabilidad está asociada a la energía liberada en la cristalización, y en general, considerar que la misma es menor tiene un cierto efecto regularizador en el perfil. En secciones posteriores trataremos el efecto de considerar una menor energía liberada en la cristalización en nuestros resultados.

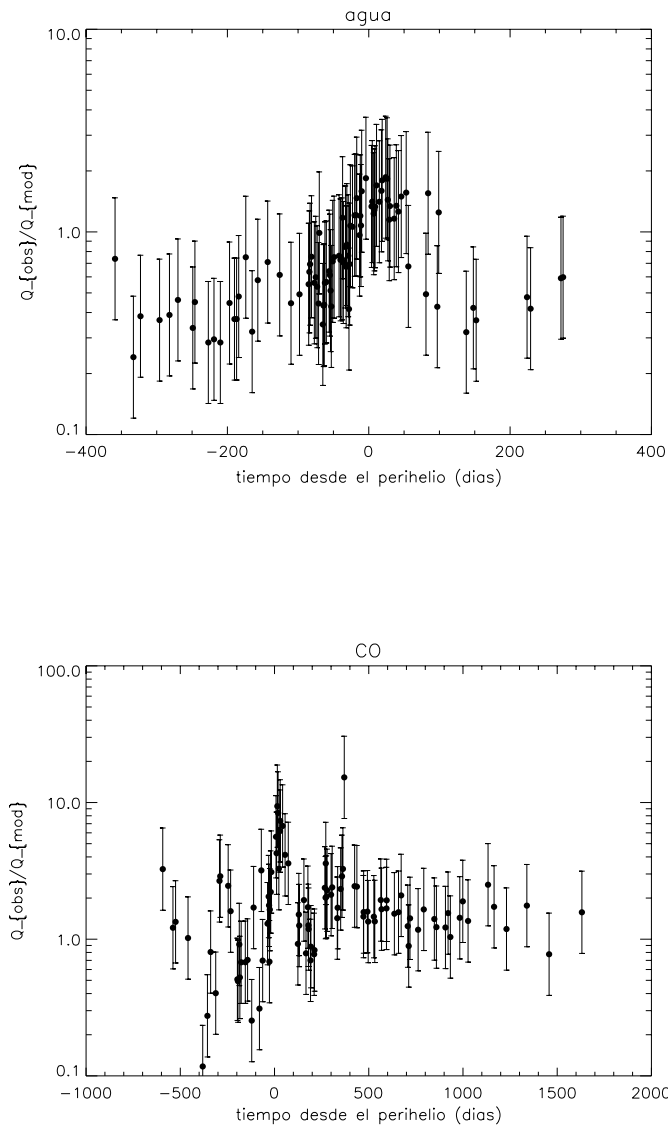


**Figura 5.5:** Comparación entre la razón de producción de monóxido de carbono frente a la de agua obtenida por nuestro modelo de referencia (línea) y la deducida de los datos que aparecen en la tabla 5.1 (puntos rojos). Las barras de error incluyen en este caso las estimaciones de la incertidumbre mencionadas en el texto tanto para la producción de agua como para la de monóxido de carbono, lo que explica que sean significativamente mayores que en los casos anteriores.

Como era de esperar dado el ajuste del modelo a los datos que acabamos de

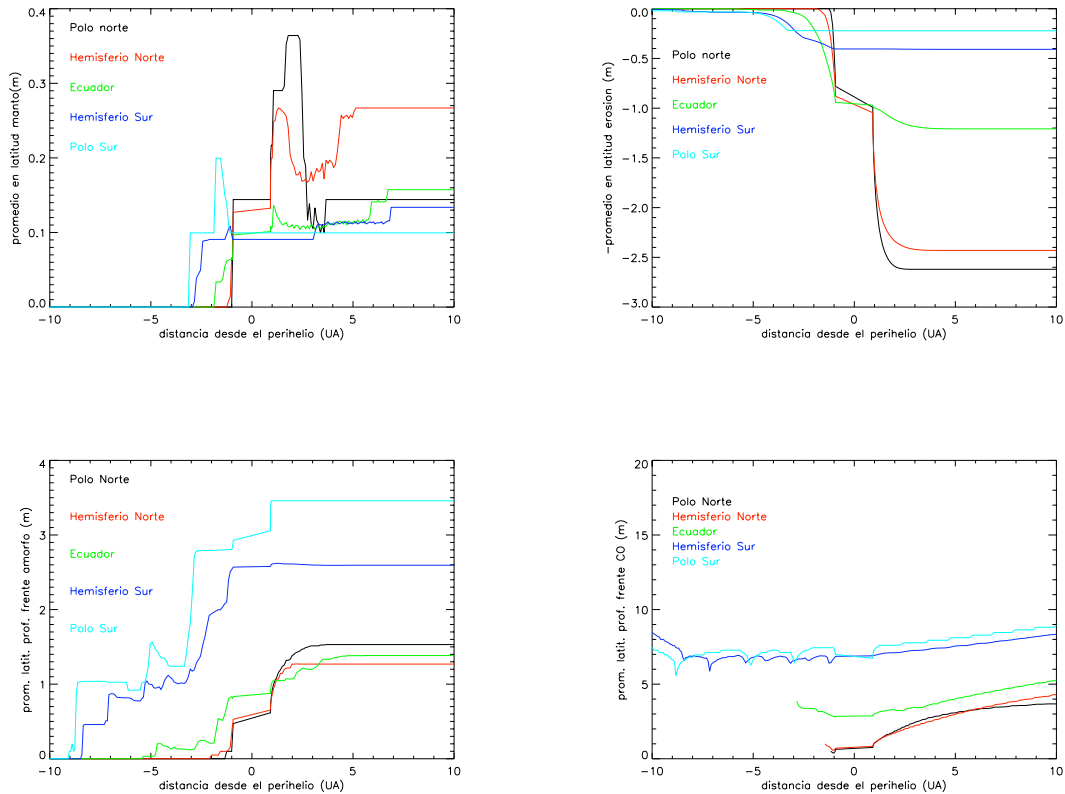
ver, la razón entre la producción de monóxido de carbono y la de agua calculada por nuestro modelo y la obtenida a partir de los datos de la Fig. 5.1 también presentan un acuerdo más que razonable, como se puede ver en la figura 5.5. Tanto en el cociente observacional como en el simulado, se puede observar la gran variabilidad temporal de la razón entre las producciones de monóxido de carbono y agua,  $\frac{Q_{CO}}{Q_{H_2O}}$ , que cubren prácticamente dos órdenes de magnitud en el caso de las observaciones. Esto confirma que las observaciones de la coma no nos indican la proporción entre agua y monóxido de carbono inicialmente presente en el núcleo, que en este caso sería 0.25. Efectivamente, durante gran parte del tiempo, al ser pequeña la producción de agua (dependiente directamente de la energía procedente del Sol, más que de la de cristalización), la razón entre las producciones sobreestima a la original del núcleo. Sin embargo, en el perihelio, nuestras simulaciones subestimarían la proporción entre monóxido de carbono y agua presente en el núcleo cometario.

La figura 5.6 presenta una comparación más entre las producciones de materiales volátiles obtenidas por el modelo y las observadas, en este caso el cociente  $\frac{Q_{obs}}{Q_{mod}}$ , ya que este tipo de representación magnifica las diferencias entre ambas cantidades. Tanto en el caso del agua como en el del monóxido de carbono, al tener en cuenta las barras de error, los resultados de nuestro modelo siguen siendo compatibles con las observaciones la mayoría del tiempo. Sin embargo, se aprecian mejor las tendencias frente a los datos observacionales tomados de la literatura (puntos) sin contar la incertidumbre representada por las barras de error. Para el agua, el modelo parece sobreestimar la producción lejos del perihelio y subestimarla en el perihelio, resultando en conjunto un buen ajuste global. En el caso del monóxido de carbono se observa una posible tendencia a la subestimación por parte del modelo, en el sentido de que los datos también serían compatibles con una producción un factor 1.5 o incluso 2 mayor que la modelada. Esto nos permite hacer una pequeña discusión acerca de la posibilidad de fuentes distribuidas. Si las suposiciones que hemos hecho para el caso de referencia son correctas, entonces en el caso del agua no sería necesaria la expulsión de granos de hielo a la coma para reproducir los perfiles de sublimación, salvo tal vez en el perihelio. En ese caso, como indicaban Gunnarsson et al. (2003) la sublimación de dichos granos sería tan rápida que resultaría indistinguible observacionalmente de emisión nuclear. En el caso del monóxido de carbono, habría espacio para la que la producción aumentase debido a la presencia de una fuente distribuida, principalmente en la rama posperihelio. La mediana de la fracción  $\frac{Q_{obs}}{Q_{mod}}$  para el monóxido de carbono es 1.57, lo que implica que aún dentro del error, podemos estar subestimando la producción de monóxido de carbono. De ello se puede deducir que algo más de un tercio del total del monóxido de carbono observado, en promedio, podría tener origen en fuentes distribuidas. En cualquier caso nuestras simulaciones no nos permiten establecer esto más allá de toda duda pues, como se puede ver en la figura 5.6, se podría decir que, aún marginalmente, los datos y la simulación son compatibles dentro del error esperado. Además, dado que la producción de granos de hielo a



**Figura 5.6:** Cociente entre las producciones de agua (arriba) y monóxido de carbono (abajo) observadas y las obtenidas por nuestro modelo de referencia. Las barras de error representan, como siempre, la incertidumbre observacional

la coma presentaría ya en la teoría los mismos problemas de modelización que el polvo al ser también arrastrados, creemos que tratar de sacar conclusiones más allá resulta demasiado especulativo.



**Figura 5.7:** Promedio en bandas longitudinales del espesor del manto (arriba, izquierda), erosión acumulada (arriba, derecha), profundidad del frente de cristalización (abajo, izquierda) y profundidad del frente de monóxido de carbono (abajo, derecha) frente a la distancia heliocéntrica para el modelo de referencia.

Como hemos dicho, nuestro modelo actualmente no permite un tratamiento de la eficiencia variable en tiempo como podrían sugerir las observaciones (ver Fig. 5.2). Sin embargo, es importante señalar que incluso con estas limitaciones, la simulación que mejor ajusta los resultados observacionales exige una eficiencia constante de 3, que estaría entre los valores favorecidos por las observaciones (según discutimos anteriormente).

A lo largo de la simulación, el núcleo se va erosionando y desarrolla un manto de polvo como consecuencia de la sublimación de los distintos componentes volátiles. La evolución de la erosión y del manto será distinto en las distintas zonas del cometa, dependiendo de las condiciones de iluminación de la superficie. En la figura 5.7 se puede observar un promedio en latitudes de la evolución del manto, de la erosión, frente de cristalización y frente de monóxido de carbono para 5 bandas latitudinales.

En los paneles superiores de la figura 5.7, a la izquierda, podemos ver la evolución del manto de polvo y a la derecha la de la erosión, que están bastante relacionadas. Ambos procesos empiezan a notarse primero en el hemisferio sur, desplazándose hacia el norte a medida que nos acercamos al perihelio. El manto de polvo parece seguir a grandes rasgos una tendencia a ser mayor a medida que tendemos al norte llegando a superar los 20 cm de ancho, mientras que en el sur y en el ecuador se mantiene en torno a los 15 cm. La excepción a esto aparece en el caso del polo norte donde la recondensación postperihelio es muy significativa, lo que hace que el manto de polvo, justo en el polo, reduzca su espesor significativamente, pasando de unos 37 a unos 16 cm. La tendencia a ser mayor en el norte también ocurre con la erosión, que alcanza unos 2.5 m en el norte frente al metro del ecuador y no llega a medio metro en el sur. Esto es la consecuencia del eje de rotación, que hace que en el afelio, la radiación (débil pero durante mucho tiempo) incida en el hemisferio sur, mientras que en el perihelio (de forma intensa pero breve) recaiga sobre el norte. Esto genera diferencias en la sublimación del agua, lo que explica las diferencias en los mantos entre ambas zonas. También es por esta razón que la erosión no sólo comienza antes en el hemisferio sur, sino que también lo hace de un modo más gradual.

Una vez que el manto de polvo está establecido, aunque sigue habiendo producción, la erosión se reduce drásticamente hasta prácticamente desaparecer, ya que cada vez es más difícil expulsar partículas de la superficie (ya que irían quedando únicamente las mayores) y, además, el cometa va recibiendo cada vez menos radiación solar conforme se dirige de nuevo al afelio.

Los paneles inferiores de la Fig. 5.7 nos presentan la profundidad a la que se encuentra el frente de cristalización (izquierda) y el frente de monóxido de carbono (derecha). Al contrario que la erosión y el ancho del manto, que dependen principalmente de la sublimación superficial del agua, estas magnitudes dependen de la temperatura en el interior del núcleo para activar la cristalización y permitir la recondensación de monóxido de carbono. Dado el efecto aislante térmico del hielo amorfo, la profundidad a la que recondensa el monóxido de carbono es totalmente dependiente de la profundidad a la que se encuentra el frente de cristalización. En estos casos ocurre lo contrario a lo que pasaba en los anteriores, ya que en el sur los frentes se encuentran a mayor profundidad, lo que es coherente al tratarse a su vez de la zona de menor recesión de la superficie. En la zona norte, que durante el perihelio sufre una gran erosión en un corto espacio de tiempo, el frente de cristalización se quedaría a menos de dos metros, mientras que en el sur se superan los dos metros. El frente de monóxido de carbono llega a unos 8 m de profundidad en el hemisferio sur, no llegando a superar los 5 m en el norte. En el panel inferior de la derecha se puede ver que el frente de sublimación de monóxido de carbono en el norte no se forma hasta llegar a menos de dos unidades astronómicas (en el hemisferio sur ocurriría lo mismo pero a grandes distancias, que no están en la gráfica). Esto es así porque el monóxido de carbono está inicialmente atrapado, y sólo después de la cristalización puede recondensar.

### 5.2.1.2. Evolución espacio-temporal del comportamiento del modelo de referencia

En la sección anterior hemos visto la evolución temporal del comportamiento de nuestro modelo de referencia. Sin embargo, todas las características que hemos visto estaban promediadas en espacio, lo que impide percibir con detalle lo que sucede en cada parte del núcleo. A continuación, pasaremos a describir en mayor detalle el comportamiento de nuestro modelo de referencia. En particular, trataremos la evolución temporal de las producciones de agua y monóxido de carbono, manto de polvo, erosión y frentes de cristalización y monóxido de carbono con la ayuda de mapas en diferentes momentos de la evolución del núcleo. Así, completaremos las cuestiones generales tratadas en la sección anterior hasta tener una descripción completa del comportamiento de nuestro modelo de referencia.

#### *Desarrollo general y temperatura superficial*

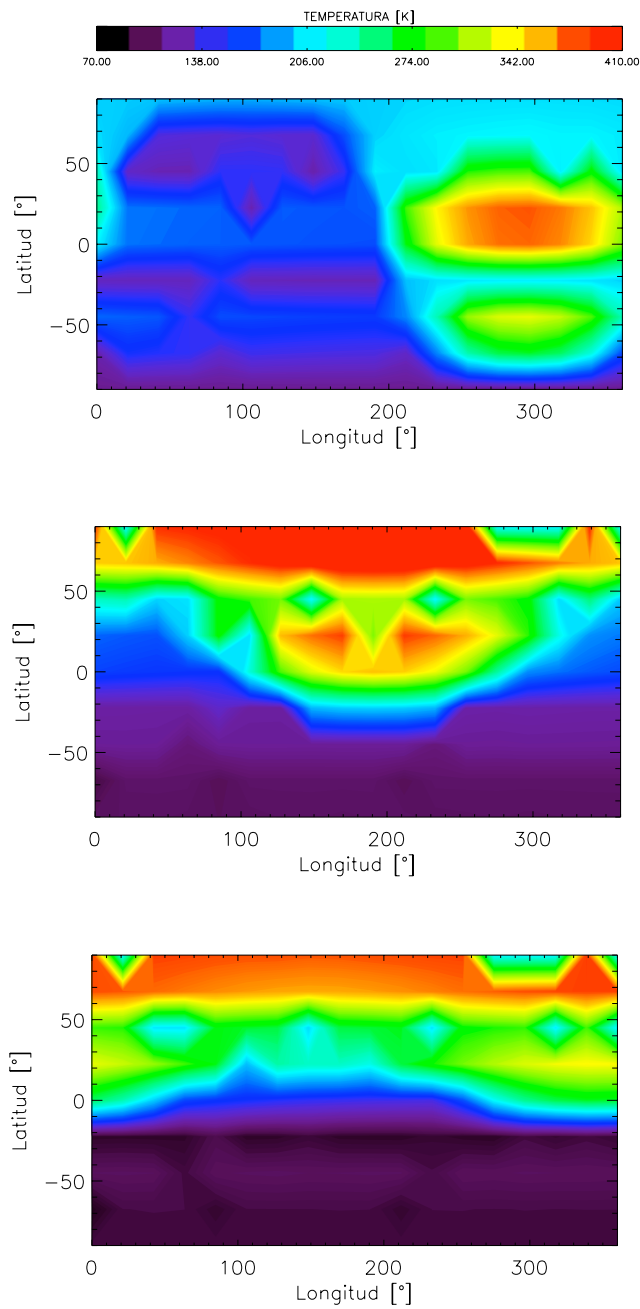
En primer lugar vamos a describir brevemente el comportamiento general del modelo a lo largo de toda la simulación. La temperatura, inicialmente de 20K en toda la superficie, va aumentando gradualmente en el hemisferio sur (que es el iluminado) a medida que el núcleo se acerca al Sol. Cuando alcanza aproximadamente 85K (en octubre de 1992, a una distancia heliocéntrica de 14 UA), comienza a haber algo de cristalización, lo que provoca un pequeño flujo de monóxido de carbono liberado en la zona del polo sur. Una pequeña parte del mismo es expulsado del núcleo y otra recondensa en el interior, formando un frente de sublimación de monóxido de carbono en la zona sur. A medida que pasa el tiempo, se produce monóxido de carbono en latitudes cada vez más el norte. Hacia Noviembre de 1994, a algo menos de 9 UA del Sol, comienza a distinguirse el frente de cristalización en el polo sur y ya tanto el frente de cristalización como las producciones empiezan a mostrar variaciones rotacionales. En el caso de la cristalización el máximo lleva un cierto retraso respecto a la temperatura superficial, debido al tiempo necesario para que la energía alcance el frente y aumente la temperatura del mismo lo suficiente como para producir la cristalización. El mapa de producción del agua sigue exactamente el de la temperatura superficial, ya que todavía no se ha formado un manto de polvo y queda hielo de agua en la superficie. Poco a poco, y en orden de aparición, los mapas de las diferentes magnitudes empiezan a mostrar actividad cada vez más hacia el norte.

Los distintos mapas presentan zonas de actividad diversas: la producción de agua resulta de sublimación debida a la iluminación superficial mientras que la de monóxido de carbono primero es debida a la cristalización y luego una combinación de cristalización y sublimación en el interior del núcleo. Ya a menos de un año del perihelio, en octubre de 1996, la distancia heliocéntrica es menor de 3 UA y comienza a formarse un manto de polvo en el polo sur. A principios de 1997, ya cerca del perihelio a 1.6 UA, la producción de agua va siguiendo las zonas más calientes y los huecos en el manto, que ya recubre gran parte del núcleo. En esos



pequeños huecos, que se podrían identificar con zonas activas, la producción suele ser mayor que en las zonas adyacentes y la temperatura superficial más baja, ya que parte de la energía incidente se emplea en la sublimación del hielo de agua superficial. El monóxido de carbono, al proceder de zonas cada vez más profundas del núcleo presenta cada vez menos relación con la temperatura superficial y la iluminación. Continuando hacia el perihelio, los mapas continúan evolucionando como consecuencia de la cada vez mayor energía procedente del Sol, que ya ilumina principalmente el norte del núcleo. Tras el perihelio hay un manto de polvo en la práctica totalidad del núcleo que se conservará hasta el final, aunque su espesor irá variando por zonas al cambiar las condiciones de iluminación de nuevo y producirse recondensación y sublimación. Conforme el cometa se aleja, las variaciones de los frentes son cada vez menores, conservándose únicamente la variabilidad rotacional en las producciones y la temperatura, que van disminuyendo con el tiempo. A medida que el Polo norte deja de estar iluminado y el núcleo se aleja del Sol, el mapa de temperatura se homogeneiza por bandas latitudinales y acaba siendo bastante similar a los del principio de la simulación.

Ahora pasaremos a describir con más detalle los mapas que aparecen en la gráfica 5.8, que representan la temperatura superficial en tres momentos. De arriba a abajo los paneles muestran los mapas un mes antes del perihelio, en el perihelio y un mes después del perihelio, cuando el cometa estaba a una distancia heliocéntrica de 1.067, 0.9141 y 1.056 UA respectivamente. Estos mapas se pueden comparar con los de otras magnitudes que aparecen en secciones posteriores ya que están tomados en los mismos momentos. El panel superior nos muestra el mapa de temperaturas superficiales un mes antes del perihelio en el que la zona subsolar roza el ecuador. La zona de temperaturas más elevadas, del orden de los 370 K, en lugar de ser un conjunto conexo muestra un corte hacia la latitud  $-25^\circ$ , aproximadamente. Dicho corte, como veremos más adelante, se corresponde con un hueco en el manto de polvo. Así, en esa zona, la energía incidente se invertirá en la sublimación del hielo de agua que queda en la superficie y no podrá aumentar tanto la temperatura. En el perihelio (panel central) sucede algo similar, formándose la estructura cortada que se observa en el hemisferio norte y alcanzándose temperaturas de más de 400 K en el polo norte. En el hemisferio sur, la temperatura baja por debajo de los 150 K. En términos generales se puede decir que cuando la energía consumida por la sublimación es elevada, cuanto más cerca esté el hielo de agua de la superficie (y por tanto, más fino sea el manto de polvo), menor será la temperatura superficial. Un mes después del perihelio (panel inferior), las temperaturas elevadas sólo se mantienen cerca del polo norte, disminuyendo tanto en latitudes intermedias del hemisferio norte como en el hemisferio sur. Las estructuras que aparecían en los paneles superior e intermedio van desapareciendo, tendiéndose a una estructura en bandas latitudinales. Esta tendencia continúa a medida que el cometa avanza hacia el afelio: al final de la simulación la temperatura ha bajado hasta un máximo de unos 60 K, ya no sigue la estructura del manto y apenas la de la iluminación. Esto sucede porque en gran parte de la rama posperihelio el núcleo deja de recibir energía suficiente del Sol y en lugar de calentarse se enfría a través



**Figura 5.8:** Mapas de temperatura superficial del modelo de referencia para tres fechas. El panel superior presenta la temperatura superficial 1 mes antes del perihelio (1 de Marzo de 1997, a 1.067 UA del Sol), en el medio está el mapa en el perihelio (1 de Abril de 1997, a 0.9141 UA del Sol ) y finalmente abajo la temperatura superficial un mes después del perihelio (el 1 de Mayo de 1997, a 1.056 UA del Sol).

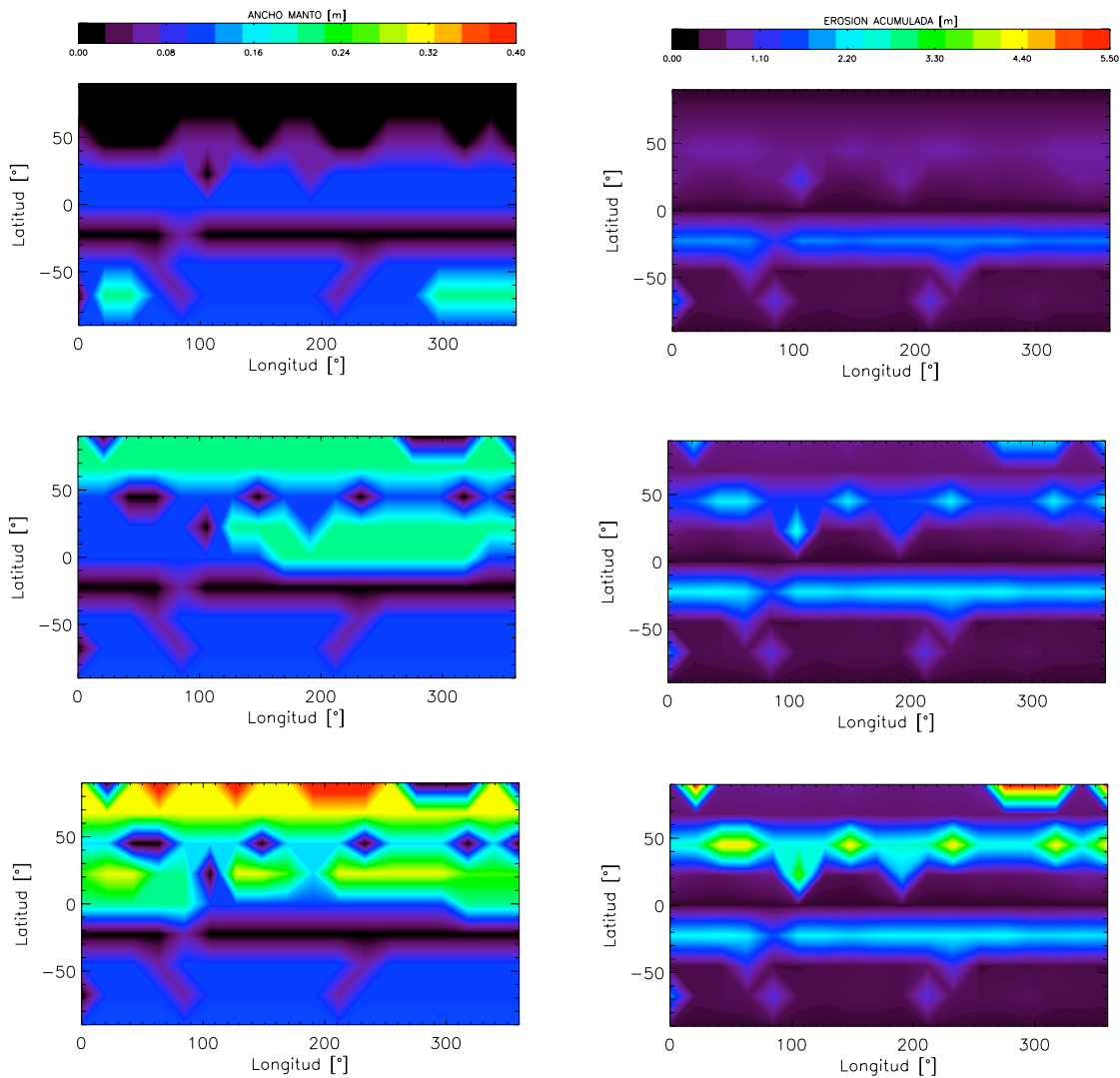
de la superficie. Este mapa es bastante similar a los del principio de la simulación,

en que el hemisferio sur se iba calentando y el punto subsolar se desplazaba hacia el norte poco a poco.

### *Manto de polvo y erosión superficial*

Como se puede ver en la tabla 5.5, el modelo de referencia lleva una cantidad significativa de polvo, con una distribución discreta que ajusta una exponencial de pendiente -3.5, dentro de las estimaciones aceptadas para cometas en general y Hale-Bopp en particular (distribución 2). El tamaño máximo de partículas de polvo considerado es de 1 mm, de modo que el manto de polvo se formará o no dependiendo de las condiciones concretas del flujo de gas en cada momento. En los paneles de la izquierda de la figura 5.9 podemos ver la evolución temporal del manto en toda la superficie. Un mes antes del perihelio (izquierda, arriba), el 1 de Marzo de 1997, el manto todavía no se ha formado en la parte norte, y en una franja en el sur (alrededor de los  $-25^\circ$  de latitud). El ancho máximo del manto en esas fechas se alcanza en la parte sur, y es del orden de los 0.25 m. En el perihelio, ya se ha formado el manto casi completamente, excepto unos pequeños huecos en el polo norte y a aproximadamente  $50^\circ$  de latitud norte y la franja a  $25^\circ$ . En esta ocasión, la zona de mayor ancho del manto es la norte, con un ancho de 0.25 m. Un mes tras el perihelio, quedan las mismas zonas sin manto, y el más ancho, del orden de 40 cm es en el polo norte. Al final de la simulación, todo el núcleo está cubierto por un manto, salvo esas pequeñas zonas a latitudes intermedias en el norte y la franja sur. La zona con mayor manto es una franja a unos  $70^\circ$  de latitud norte, en la que tiene 0.4 m.

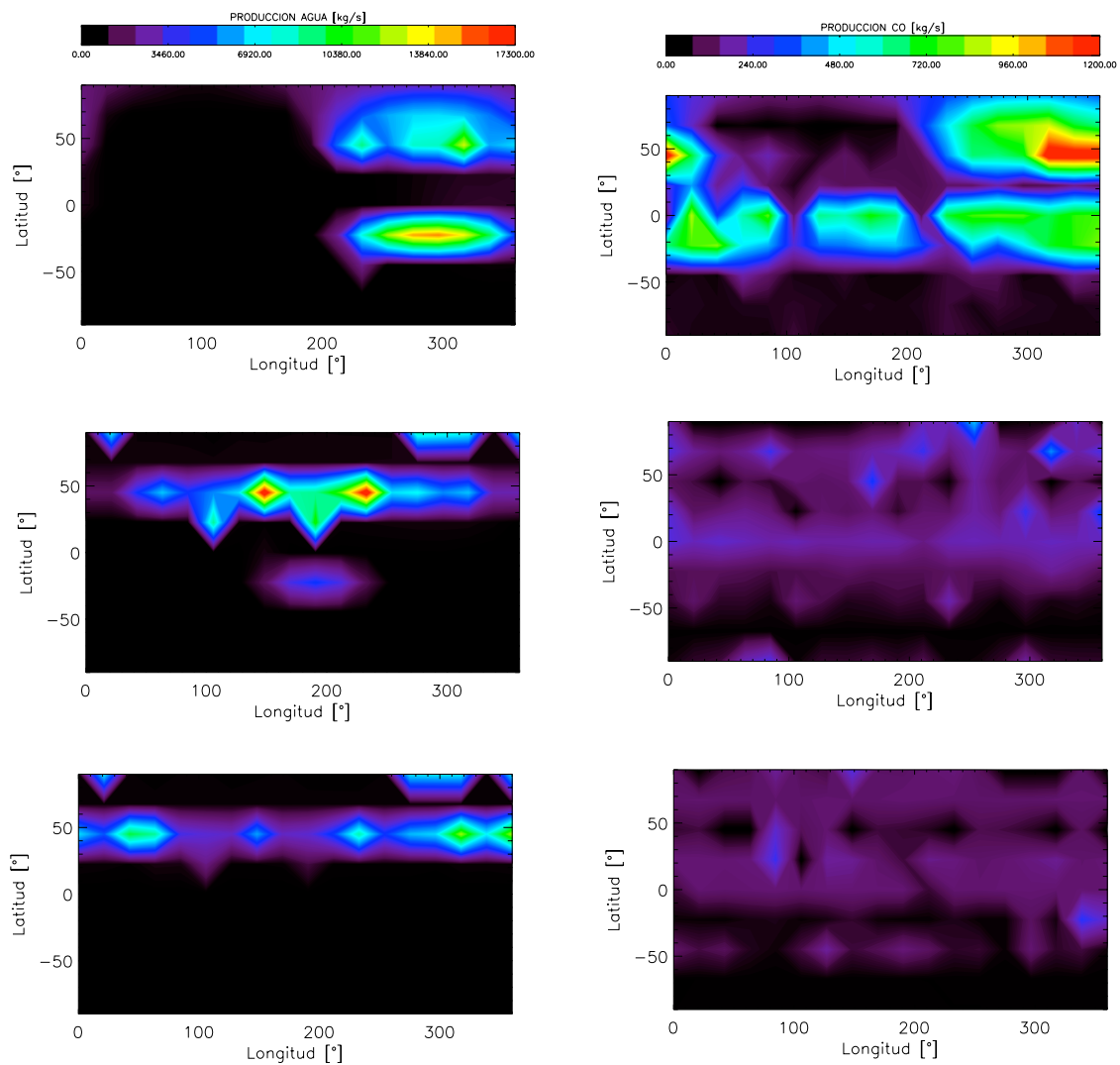
En relación a los mapas del lado derecho de la Fig. 5.9, que representan la erosión acumulada en las tres fechas elegidas, se ve claramente que la recesión de la superficie causada por la pérdida de material del núcleo cometario está fuertemente relacionada con la formación del manto de polvo que acabamos de mencionar. Dado que la erosión está causada por la pérdida de hielo (por sublimación) o material refractario (por arrastre) en la superficie, se producirá únicamente cuando haya hielo superficial o bien el flujo sea lo suficientemente grande como para arrastrar el polvo de mayores tamaños. Un mes antes del perihelio, ya se ha producido una erosión mínima de 0.18 m en toda la superficie, siendo máxima en la franja del hemisferio sur, donde alcanza un metro aproximadamente. En la imagen del perihelio, se observa también claramente que la máxima erosión sigue los huecos del manto, en los que alcanza aproximadamente los 2.2 m. Un mes después del perihelio, la erosión máxima acumulada se encuentra en el polo norte (que, recordemos, estaba iluminado durante el perihelio), llegando a los 5 m. En latitudes intermedias del hemisferio norte, la superficie nuclear ha recedido cerca de 4 m y en la franja de  $25^\circ$  sur es del orden de los 2.2 m. Al final de la simulación, la situación de la erosión acumulada es bastante similar a las de un mes después del perihelio ya que la erosión superficial se detiene cuando ya se ha formado un manto de polvo en la gran mayoría de la superficie, y al alejarse el cometa del Sol deja de haber un flujo de gas suficiente como para arrastrar el polvo superficial.



**Figura 5.9:** A la izquierda: mapas de ancho del manto, a la derecha: mapas de la erosión acumulada. La fila superior presenta los mapas un mes antes del perihelio (el 1 de marzo de 1997, a 1.067 UA del Sol), la fila central los mapas en el perihelio (1 de abril de 1997, a 0.9141 UA del Sol) y la fila inferior los mapas un mes tras el perihelio (el 1 de Mayo de 1997, a 1.056 UA del Sol)

### *Producción de agua y de monóxido de carbono*

Como ya se ha visto, las producciones de agua y monóxido de carbono son las referencias observacionales de este estudio. En la figura 5.10 presentamos los mapas de producción de agua (izquierda) y monóxido de carbono (derecha), en las mismas fechas que las anteriores, también por orden descendente. Si comparamos los mapas del agua (Fig. 5.10, izquierda) y los de temperatura (gráfica 5.8) y



**Figura 5.10:** A la izquierda: mapas de producción de agua, a la derecha: mapas de producción de monóxido de carbono. La fila superior presenta los mapas un mes antes del perihelio (el 1 de marzo de 1997), la fila central los mapas en el perihelio (1 de abril de 1997) y la fila inferior los mapas al final de la simulación (el 1 mayo de 1997). La producción de monóxido de carbono un mes antes del perihelio está saturada a partir de  $1200 \text{ kg s}^{-1}$  para que se pueda comparar con las otras fechas usando la misma escala de color. La zona a  $50^\circ$  norte y a más de  $300^\circ$  de longitud llega a alcanzar unos  $2600 \text{ kg s}^{-1}$  de CO.

manto de polvo (Fig. 5.9, izquierda) queda claro que la producción de agua sigue las zonas de mayor iluminación, siendo máxima en las zonas en las que no hay manto y hay hielo en la superficie. El panel superior de la izquierda de la Fig. 5.10 nos muestra que el 1 de Marzo de 1997, a 1.067 UA del Sol, la producción de agua está tremendamente localizada. Si bien la totalidad del núcleo produce algo, del

total de  $4 \cdot 10^5 \text{ kg s}^{-1}$  de agua que se producen, el 90 % proviene únicamente del 16.23 % de la superficie, a longitudes mayores de  $200^\circ$  y en las latitudes de  $50^\circ$  norte y  $25^\circ$  sur. En el perihelio, la producción de agua es algo menor ( $3.5 \cdot 10^5 \text{ kg s}^{-1}$ ) y está todavía más concentrada (a longitudes intermedias y  $50^\circ$  norte), al ser únicamente el 11.8 % de la superficie el productor del 90 % del agua expulsada a la coma. Esta tendencia continúa un mes después del perihelio, en el que la producción disminuye (a  $2.74 \cdot 10^5 \text{ kg s}^{-1}$ ), de la que el 90 % procede del 10.06 % de la superficie, que corresponde a las zonas sin manto a  $50^\circ$  norte. El comportamiento del agua es coherente con lo esperado, siendo consecuencia de la iluminación de la superficie y presentando una fuerte localización en lo que podríamos considerar zonas activas, que no han desarrollado manto de polvo.

La producción de monóxido de carbono (derecha) sigue un patrón más complejo, ya que en ningún momento procede de la superficie, sino que lo hace bien del frente de cristalización o bien del de sublimación, que como hemos visto se encuentra unos metros por debajo del de cristalización. La energía debe atravesar el manto de polvo y la zona con hielo cristalino para llegar al frente de la cristalización y unos metros adicionales de material muy poco conductor para alcanzar el frente de sublimación. Esto hace que las producciones de ambos frentes sufran retrasos térmicos distintos respecto a la superficie. Además, para que el hielo amorfo de agua cristalice debe alcanzarse un umbral de energía, y a su vez la cristalización actuará como una fuente interna de energía. Es razonable, entonces, que los mapas de monóxido de carbono presenten patrones variables y distintos a los de las otras magnitudes. En primer lugar, ya se distingue en el panel superior que la producción de monóxido de carbono no está tan localizada como el agua. Aunque produce algo la gran mayoría de la superficie, el 90 % de la producción total ( $2 \cdot 10^6 \text{ kg s}^{-1}$ ) proviene del 45 % de la superficie. Se distingue aún así una zona en longitudes extremas y  $50^\circ$  norte un área del que procede una mayor cantidad de monóxido de carbono y, efectivamente, resulta que el 50 % de la producción total proviene del 15.78 % de la superficie. Esta fecha, el 1 de marzo de 1997, está muy cerca de aquella en la que Bockelée-Morvan et al. (2009) detectaron un chorro de monóxido de carbono procedente de unos  $20^\circ$  norte. Hemos comprobado lo que sucede en los días que rodean esa observación y, si bien sí que en ocasiones aparece una zona localizada como en este caso, como ya hemos dicho, la producción es muy variable y se deslocaliza. Aún así, esto puede ser compatible con el trabajo de Bockelée-Morvan et al. (2009) ya que los autores concluyen que el comportamiento del chorro es más complejo que lo que ellos modelan. En el perihelio la producción total de monóxido de carbono aumenta ligeramente y se deslocaliza, procediendo el 90 % de la misma del 62.67 % de la superficie y el 50 % de un 22 %. Ya no se distingue una zona clara de producción máxima como sucedía en el caso anterior. Un mes más tarde, ya a 1.056 UA del Sol sucede algo similar, el 90 % de la producción procede del 53.8 % de la superficie y se aprecia una ligera concentración de producción en la zona del polo norte.

En el caso del agua la aparición de zonas activas (y la localización de la producción) es consecuencia de la aparición del manto, que es un proceso complejo.

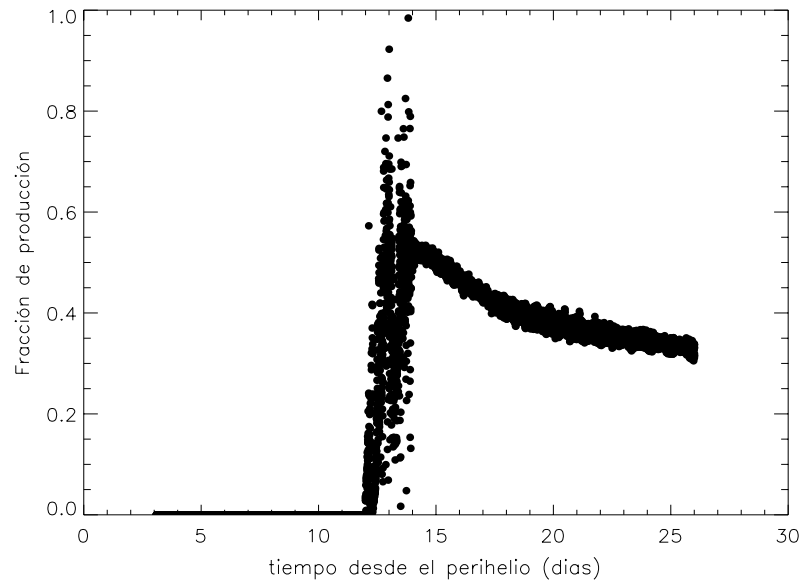
El 90% de la producción de agua procede de entre el 10 y el 15% de la superficie, siempre en la zona iluminada. El caso del monóxido de carbono es más complejo y en general la producción no se puede considerar localizada, aunque puntualmente pueden aparecer zonas de actividad concentrada. En cualquier caso, nuestras simulaciones indican que estimaciones simples para la fracción de área activa de un componente a partir de las proporciones supuestas para el núcleo (como las que se hacen en el trabajo de Fulle et al. (2010) para el agua en el cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko) no representan adecuadamente el comportamiento de los núcleos cometarios, mucho más complejos.

La figura 5.11 representa la proporción de monóxido de carbono procedente del lado nocturno en cada momento. Se observa claramente que dicha proporción también es variable, apareciendo la máxima variabilidad en la vecindad del perihelio. Antes el monóxido de carbono procedía íntegramente de la zona iluminada (liberado por la cristalización que estaba ocurriendo cerca de la superficie) y después se estabiliza tendiendo a un 35%. En la zona del perihelio aparece la máxima variación, pudiendo ser la producción casi totalmente nocturna, casi totalmente diurna y también algo intermedio. Esto es consecuencia del hecho ya mencionado de que el monóxido de carbono procede de la cristalización pero también de sublimación libre en zonas internas del núcleo. En la sección siguiente trataremos la evolución de los frentes de cristalización y de sublimación libre de monóxido de carbono.

### *Frentes de cristalización y de monóxido de carbono*

A medida que el núcleo va evolucionando también lo van haciendo los frentes de cristalización y de sublimación de monóxido de carbono. De hecho, al estar el monóxido de carbono inicialmente atrapado, no es hasta después de producida la cristalización cuando se forma su frente de sublimación, formado por el monóxido de carbono liberado al fluir hacia zonas frías del núcleo y condensar allí.

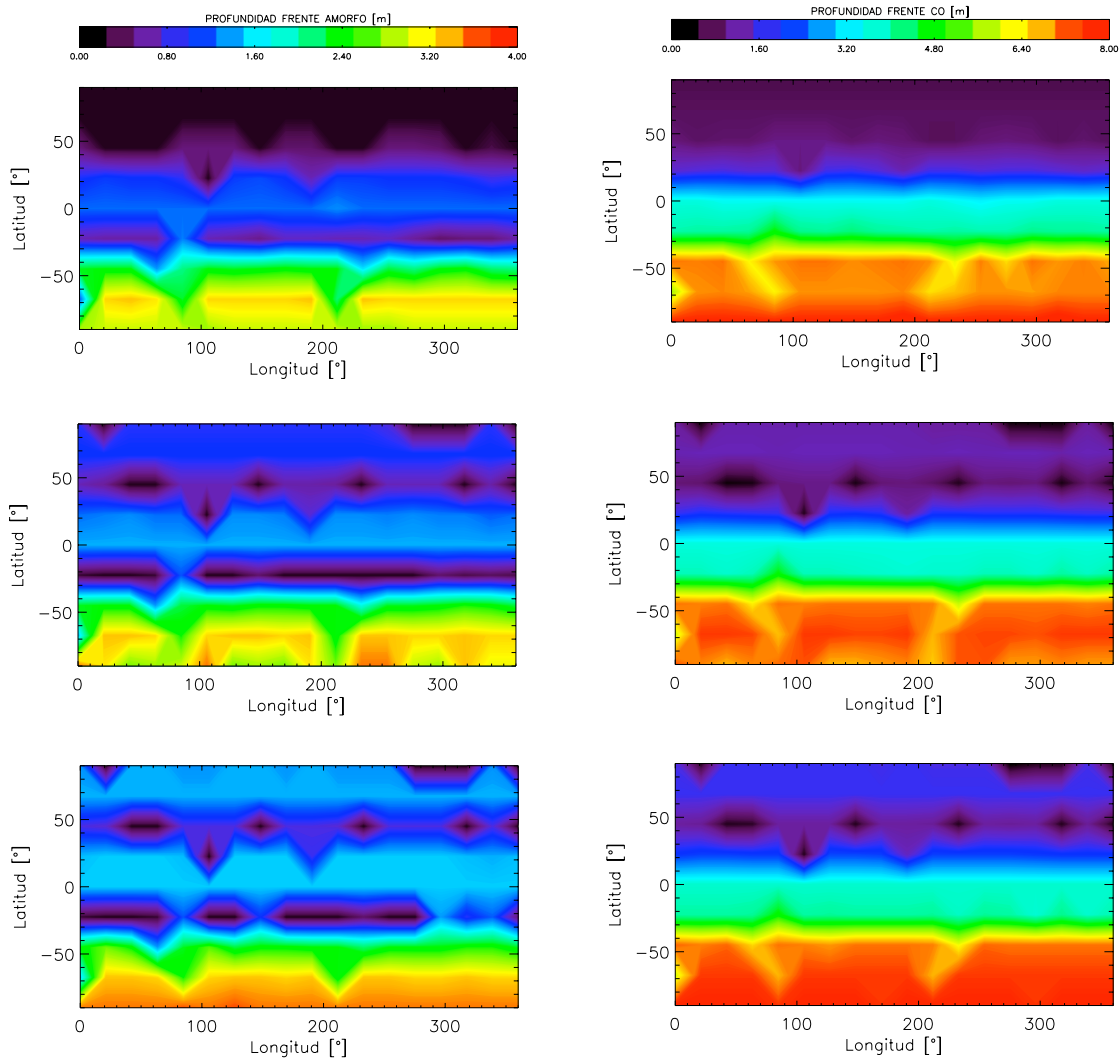
En la Fig. 5.12 podemos observar la profundidad del frente de cristalización (izquierda) y del frente de sublimación de monóxido de carbono (derecha) para las fechas que hemos utilizado para el resto de las magnitudes a lo largo de esta sección. En esta figura llaman la atención tres hechos. En primer lugar, la similitud entre los mapas del frente de cristalización y del frente de monóxido de carbono libre, salvando la diferencia de profundidad de cada uno de los casos. Esto sucede porque, en primer lugar, el monóxido de carbono es liberado en el frente de cristalización, y debe viajar hasta las zonas internas en las que el núcleo está frío para condensar formando el frente de sublimación libre. Además, el efecto aislante del hielo amorfo, que dificulta el transporte de energía a zonas internas del núcleo, convirtiendo el frente de cristalización en una barrera que separa una corteza a temperaturas elevadas de un interior frío. En segundo lugar, también es llamativo el hecho de que, al contrario que en los casos anteriores, los frentes estén a mayor profundidad en el sur. Esto ocurre porque el hemisferio sur es el iluminado en el afelio, y por tanto recibe un aporte de energía menor pero durante mucho más



**Figura 5.11:** Fracción de la producción total de monóxido de carbono procedente del lado nocturno, calculada del mismo modo que en el capítulo anterior.

tiempo. Las temperaturas subirán más despacio en el sur, alcanzando con relativa facilidad aquellas en las que la cristalización es significativa pero más difícilmente las temperaturas de sublimación importante de agua. De este modo, una mayor cantidad de la energía recibida por el sur es invertida en cristalizar que en sublimar agua, lo que se traduce en una mayor profundidad del frente de cristalización pero en menor desarrollo de manto. Una vez empezada la cristalización, la exotermicidad del proceso garantiza una continuidad mínima del mismo. Tanto el frente de cristalización como el de sublimación de monóxido de carbono presentan una estructura en bandas latitudinales en lugar de seguir la iluminación del núcleo, lo que sucede al ser procesos internos, salvo en el instante inicial. El efecto es mayor en el caso del frente de sublimación de monóxido de carbono, ya que se encuentra a mayor profundidad. Al avanzar en el paso por el perihelio, el frente de cristalización empieza a mostrar una ligera estructura parecida a la del manto de polvo (Fig. 5.9), encontrándose más cerca de las superficies en las zonas con menor manto, donde hay mayor erosión. El frente de sublimación de monóxido de carbono se encuentra a una distancia variable del de cristalización. Se puede comprobar al comparar ambas escalas de color de la Fig. 5.12 así como los paneles





**Figura 5.12:** A la izquierda: mapas del frente de cristalización, a la derecha: mapas del frente de sublimación del monóxido de carbono. La fila superior presenta los mapas un mes antes del perihelio (el 1 de Marzo de 1997), la fila central los mapas en el perihelio (1 de Abril de 1997) y la fila inferior los mapas un mes tras el perihelio (el 1 de Mayo de 1997)

de la izquierda con los de la derecha que el frente de sublimación libre se encuentra a una distancia del frente de cristalización algo mayor pero similar a la que éste se encuentra de la superficie. Los frentes de cristalización y monóxido de carbono no varían mucho en profundidad a lo largo del paso por el perihelio, encontrándose el máximo entre los 3 y 3.5 m y los 6.5 y 7.5 m respectivamente.

Antes de terminar esta descripción, un aspecto importante que hay que destacar es que, como se puede ver en la Fig. 5.12, en el modelo de referencia (que recordamos es compatible con los datos observacionales) se obtiene que es posible

encontrar hielo amorfo relativamente cerca de la superficie (a menos de 10 cm) en todos los momentos de la órbita. Este resultado podría justificar, como se mencionó en la descripción de las observaciones relacionadas con este cometa, que se hayan encontrado granos de hielo de agua en estado amorfo.

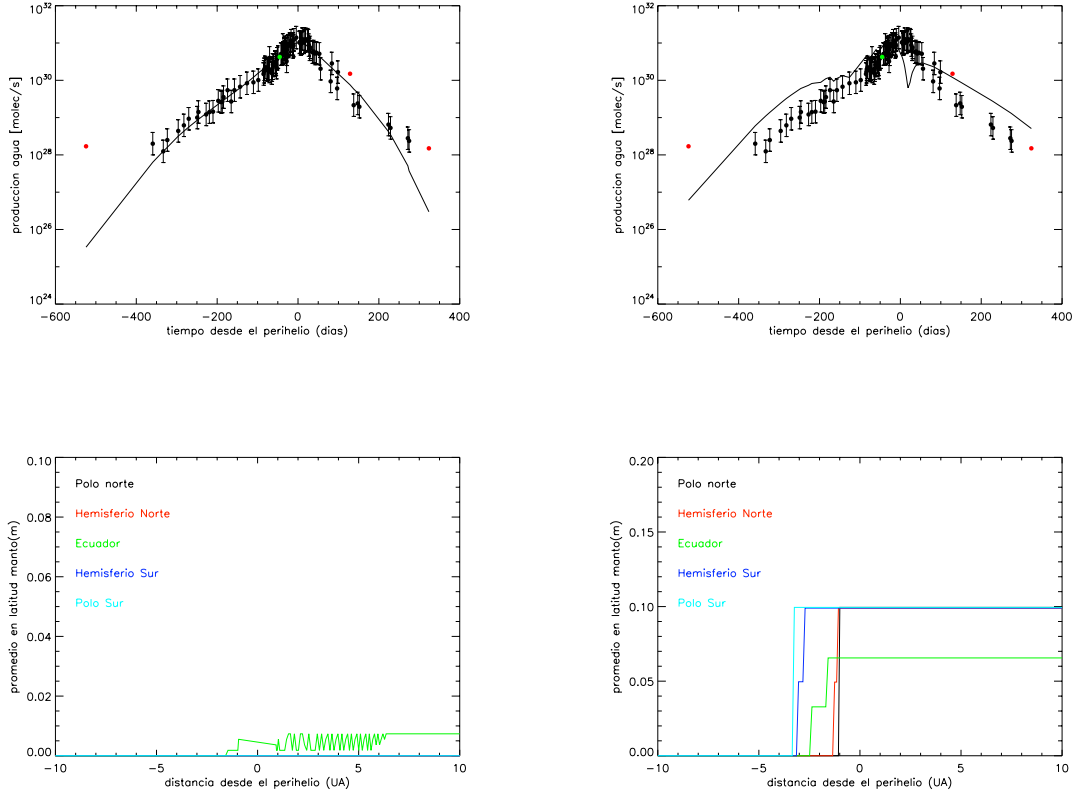
## 5.2.2. Efectos de variaciones en las diferentes magnitudes

A continuación, presentaremos los efectos que se producen al introducir variaciones significativas en las magnitudes que definen el modelo de referencia. En la mayoría de los casos, estos efectos se traducen en unas características distintas del manto de polvo formado en la superficie, lo que a su vez se traduce en perfiles de producción distintos.

### 5.2.2.1. Inercia térmica

Cuando en el modelo de referencia aumentamos la inercia térmica a  $500 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$ , los resultados cambian significativamente. Si consideramos la gráfica de producción de agua (Fig. 5.13, arriba, izquierda) parece que ajusta razonablemente bien los datos, aunque se podría decir que el perfil postperihelio cae demasiado rápido. Sin embargo, la normalización necesaria para que la producción de agua tenga esos valores implicaría que el cometa tiene un radio de 14.52 km, mucho más pequeño que las estimaciones para el mismo. Este resultado se debe a que, como hemos visto en el capítulo 3, la velocidad media de cristalización es sensiblemente más elevada al aumentar la inercia térmica. Esto unido a que la cristalización libera gran cantidad de energía hace que la velocidad medida de cristalización sea también muy elevada y por lo tanto se libera gran cantidad de monóxido de carbono. El monóxido de carbono liberado arrastrará a su vez gran cantidad de polvo (y polvo de gran tamaño también) de modo que no se llega a formar un manto superficial, apenas en el ecuador, como se ve en el panel inferior de la izquierda de la Fig. 5.13. De este modo, la sublimación de agua siempre se produce en la superficie y la sublimación libre de agua de un núcleo de 20 ó 30 km de radio resulta excesiva. Esto está de acuerdo con los resultados de Kührt (2002), cuya estimación de la fracción de área activa del núcleo, que se traduciría en un radio de 13 km, si todo él fuese activo.

Al reducir la inercia térmica (Fig. 5.13, paneles de la derecha), el comportamiento de la simulación es más complejo. La velocidad media de cristalización es menor, lo que favorece a priori el desarrollo de manto. Sin embargo, en la figura 5.13 (panel inferior, derecha) puede verse la evolución del manto de polvo superficial promediada en latitudes, que es sensiblemente más estrecho que en el caso de referencia. Esto sucede porque al tener menor inercia térmica el manto resulta mucho mejor aislante térmico, de modo que es más difícil alcanzar las temperaturas de sublimación de agua debajo del manto y éste interrumpe su desarrollo. El radio derivado para el núcleo sería de 32.05 km, completamente dentro del rango que consideramos aceptable. Sin embargo, el perfil de la simulación es bastante



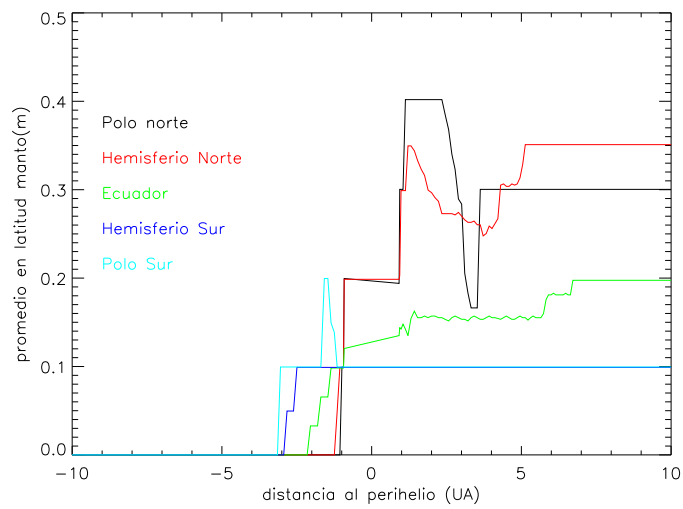
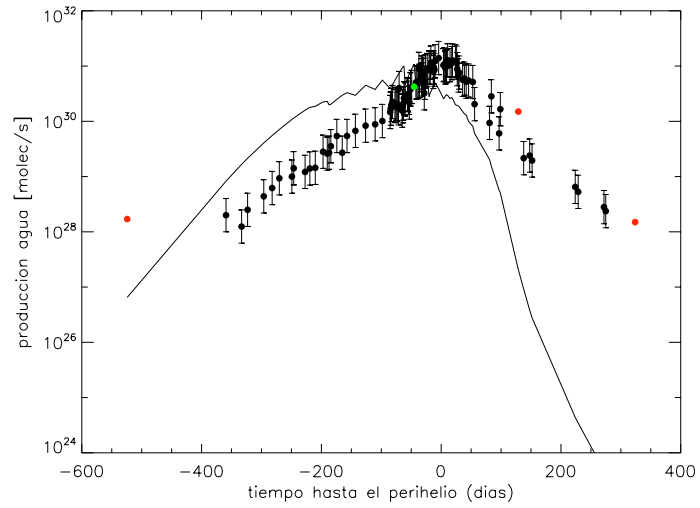
**Figura 5.13:** Producción de agua (arriba) y promedio longitudinal del ancho del manto (abajo) para núcleos con inercia térmica de  $500 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  (izquierda) y  $50 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  (derecha)

distinto al del agua, como se ve en el panel superior a la derecha de la figura Fig. 5.13, particularmente lejos del perihelio, siendo el perfil general más plano que el del modelo de referencia. Además de un peor ajuste, esto provoca que se supere el límite superior unos 300 días posperihelio y por tanto entendemos que una inercia térmica baja no reproduce correctamente el comportamiento del cometa Hale-Bopp. Simulaciones adicionales con una inercia térmica de  $100 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1/2}$  dan resultados mejores, aunque todavía peores que los del modelo de referencia.

### 5.2.2.2. Distribución de polvo. Eficiencia

Variar la distribución de polvo y la eficiencia es una herramienta directa para favorecer o dificultar la formación de un manto de polvo.

En primer lugar vamos a describir lo que ocurre cuando utilizamos la distri-



**Figura 5.14:** En el panel superior, producción de agua de un núcleo con eficiencia 1 y manto desarrollado en ese caso. El resto de los parámetros son como los del modelo de referencia (ver tabla 5.5).

bución de polvo 3 (ver tabla 5.4), que es homogénea con un radio de grano de 1

$\mu\text{m}$ . Esta distribución facilita la expulsión de polvo, ya que el radio de todas las partículas es bastante pequeño. En efecto, apenas se forma manto en el polo sur y nos encontramos en una situación muy parecida a la del caso con inercia térmica elevada. Como en aquel caso, la producción de agua no sigue el perfil observacional, cayendo muy rápido postperihelio y además, al producirse sublimación superficial durante toda la simulación, la producción por metro cuadrado resulta excesiva. Por ello el radio normalizado resulta en este caso de unos 15.2 km, bastante por debajo de lo estimado para Hale-Bopp.

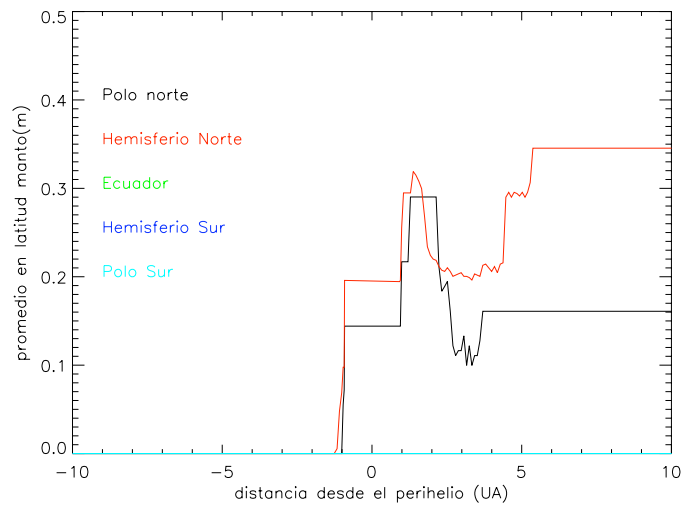
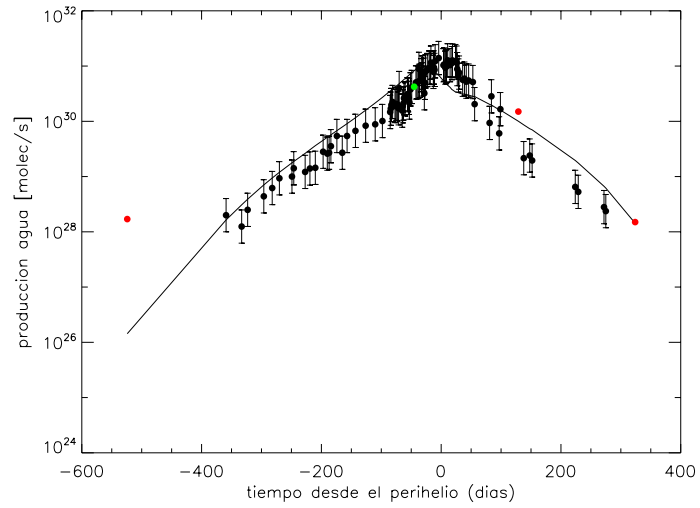
El efecto opuesto, estimular la aparición de manto sin cambiar las características térmicas del sistema, se puede conseguir disminuyendo la eficiencia de arrastre de polvo (que hace que la masa de polvo expulsada sea menor para la misma cantidad de gas producido) o cambiando la distribución de polvo a por ejemplo, la distribución 1 (ver tabla 5.4), que tiene un tamaño máximo de polvo arbitrariamente grande (en este caso, de un metro) para que no pueda ser arrastrado. Como los resultados de ambas simulaciones son similares, describiremos únicamente el caso con eficiencia 1. La producción de agua simulada tiene en este caso un perfil muy distinto al observado, como se puede ver en el panel superior del gráfico 5.14, aumentando mucho más rápido preperihelio y cayendo también mucho más rápido posperihelio. Además, el pico asociado al perihelio en producción aparece antes, al formarse antes el manto aislante en el hemisferio norte. El manto de polvo es ligeramente más ancho que el del modelo de referencia (ver el panel inferior de la Fig. 5.14), aislando térmicamente el hielo de agua y entorpeciendo la expulsión de gas postperihelio. Por todo ello la producción total de agua no es suficiente y el radio normalizado del cometa supera con creces los aceptados, 48.5 km en este caso.

### 5.2.2.3. Razón polvo-hielo

La razón polvo-hielo es una magnitud acoplada con todas las demás que afectan a la evolución de nuestro sistema. Las cantidades netas de polvo y hielo cambian, lo que tiene consecuencias sobre las propiedades térmicas y por tanto sobre la producción.

En primer lugar, trataremos lo que ocurre cuando utilizamos una razón polvo hielo elevada, de 5. El perfil de producción de agua es muy similar al del caso eficiencia 1 en el que el manto era forzado a base de que el gas arrastrase consigo una menor proporción de polvo. También en este caso la producción de agua es muy pequeña y se dispara el radio normalizado del cometa, en este caso hasta los 68.9 km. La diferencia principal es que ahora el manto de polvo es mucho mayor, con un ancho del orden de la decena de metros.

En la Fig. 5.15 presentamos los resultados de nuestras simulaciones cuando disminuimos la razón polvo hielo de nuestro núcleo a 0.5. La producción global de agua resulta bastante aceptable aunque roza el límite superior al final de la simulación. Sin embargo, se confirma que la producción de agua de este modelo es excesiva ya que nos salimos también de los radios aceptados al hacer la nor-



**Figura 5.15:** En el panel superior, producción de agua de un núcleo con una razón polvo hielo de 0.5 y el manto de polvo promediado en latitud para la misma simulación. El resto de los parámetros son como los del modelo de referencia (ver tabla 5.5)

malización de la producción de agua, aunque en este caso es por poco ya que

$R_{norm} = 17,84$  km. Esto se debe a que no se llega a producir manto en el hemisferio sur, de modo que al dejar atrás el perihelio y volver a estar iluminado el sur la sublimación libre de agua desde la superficie resulta excesiva. Además de esto, en el panel superior de la figura 5.15 también se observa que el pico de producción de agua simulado sucede antes del de los datos, debido al rápido desarrollo del manto del norte. Una menor razón polvo-hielo dificultaría en principio la formación de un manto de polvo, ya que la sublimación de todo el hielo implicaría una cantidad de gas mayor que en el caso de referencia y por tanto mayor capacidad de arrastre. Además, la energía liberada en la cristalización es mayor, y hace que las temperaturas por encima del frente de sublimación sean mayores. Es por ello que en el hemisferio sur, que recibe energía del Sol lejos del perihelio, el manto no llega a formarse. Por el contrario, el hemisferio norte recibe una intensa iluminación durante el perihelio que se traduce en una intensa erosión unida a un desarrollo casi instantáneo del manto. El manto que se forma en esta simulación, además, resulta más aislante térmicamente, por tener una cantidad neta de polvo menor, por lo tanto su densidad es menor, lo que a su vez reduce la inercia térmica.

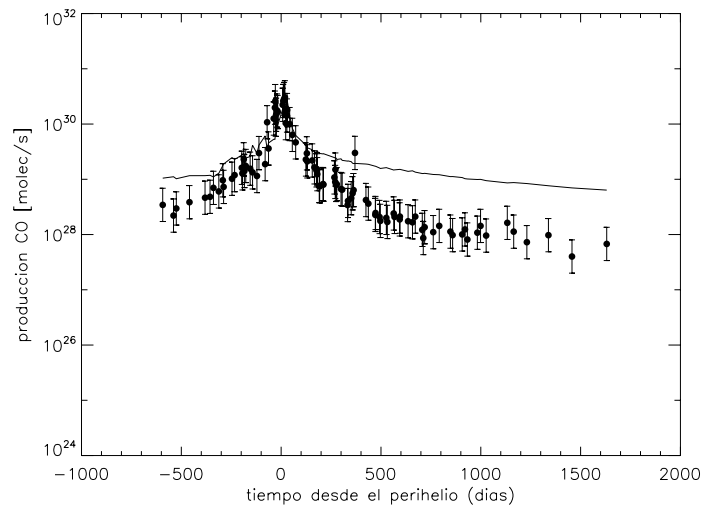
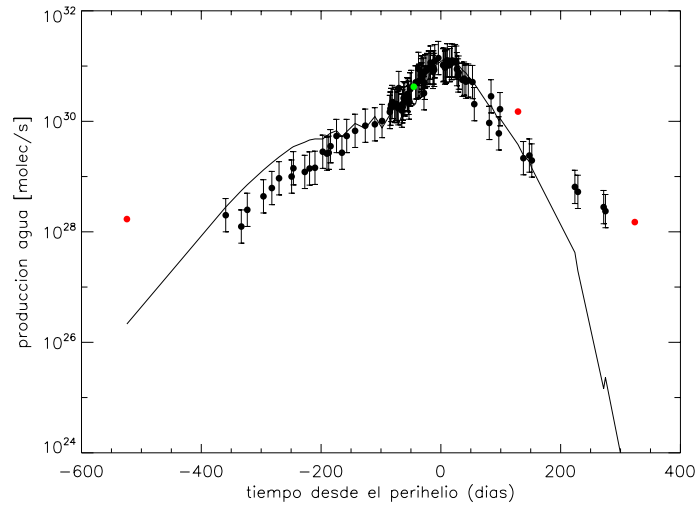
#### 5.2.2.4. Estado del hielo

Como era de esperar, hemos verificado nuestra hipótesis principal, que el núcleo contiene hielo amorfo y que en su interior se encuentra atrapado el monóxido de carbono. Para ilustrar las consecuencias de no suponer esto utilizaremos un caso en el que el hielo de agua está inicialmente ya en estado cristalino y el monóxido de carbono codepositado. En el panel superior de la figura 5.16 se puede ver cómo la producción de agua es bastante buena preperihelio pero cae demasiado posperihelio. Además, no supera el límite inferior de producción de agua cerca del perihelio porque ya no se acumula, como antes, energía en la zona superficial debido a la baja conductividad térmica del hielo amorfo y a la elevada energía liberada en la cristalización.

En cuanto a la producción de monóxido de carbono (Fig. 5.16, panel inferior), tiene un perfil demasiado plano. Si bien en el perihelio su magnitud es la adecuada, al alejarse no disminuye lo suficiente, como los datos indican que debería hacer. Esto sucede porque ya no hay una capa de hielo amorfo aislante entorpeciendo la llegada de energía al frente de monóxido de carbono. Simulaciones adicionales con hielo amorfo y monóxido de carbono libre indican que, en general, ese es el comportamiento de las mismas frente al caso en el que el monóxido de carbono está atrapado, ya que al no tener que formarse por condensación del gas liberado en la cristalización queda generalmente más cerca del frente de cristalización, recibiendo un mayor aporte de energía que en el caso de referencia.

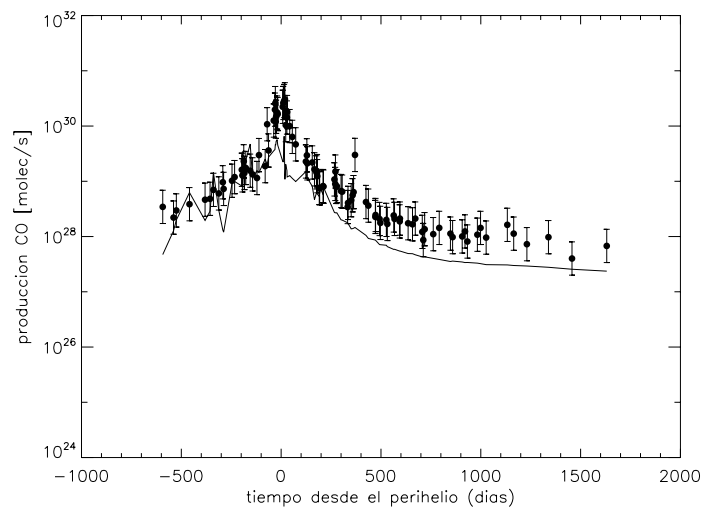
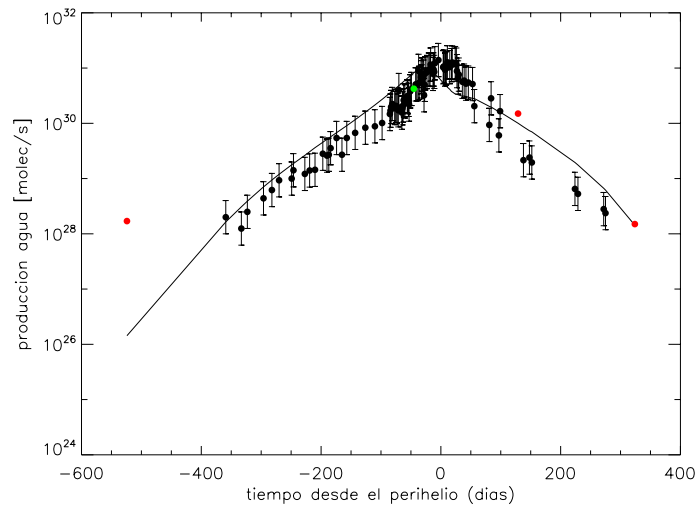
#### 5.2.2.5. Cantidad de monóxido de carbono atrapado

En la figura 5.17 presentamos la producción de agua y monóxido de carbono para un núcleo en el que el monóxido de carbono atrapado en el hielo amorfo es



**Figura 5.16:** En el panel superior, producción de agua de un núcleo con hielo cristalino y el monóxido de carbono codepositado y en el inferior producción de monóxido de carbono para el mismo núcleo. El resto de los parámetros son como los del modelo de referencia (ver tabla 5.5)





**Figura 5.17:** En el panel superior, producción de agua de un núcleo con menor cantidad de monóxido de carbono atrapado en el hielo amorfo y en el inferior producción de monóxido de carbono para el mismo núcleo. El resto de los parámetros son como los del modelo de referencia (ver tabla 5.5)

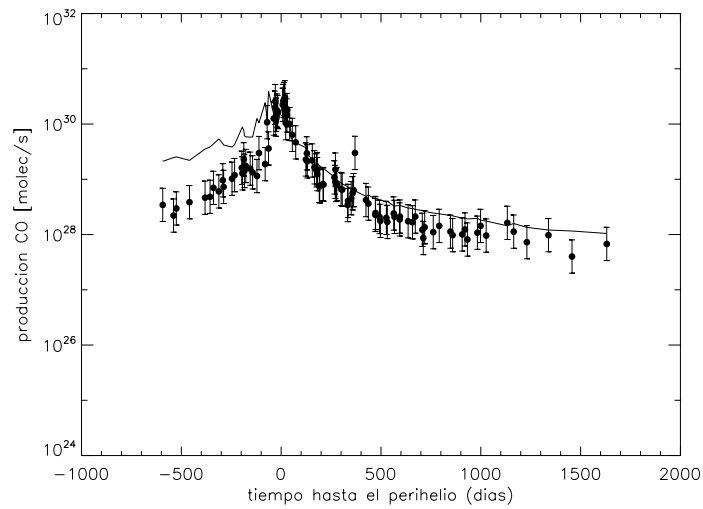
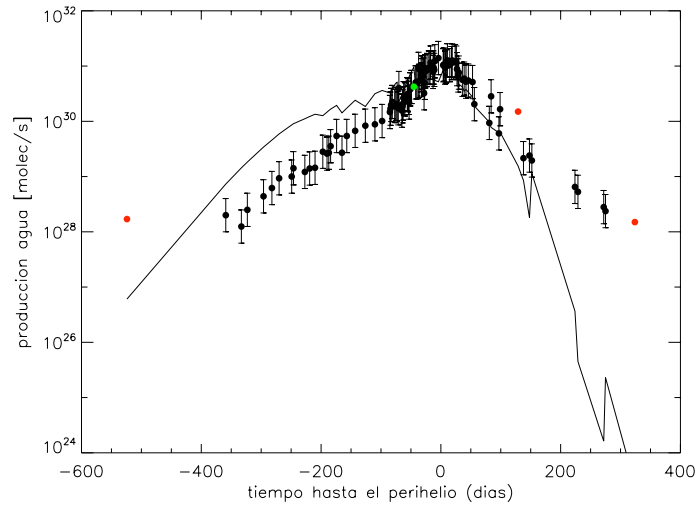
un 15% de la masa del mismo. No hemos realizado simulaciones para núcleos con

mayores cantidades de monóxido de carbono ya que el 20 % del caso de referencia es ya un límite superior de lo aceptable en núcleos cometarios. Como se ve en el panel superior de la Fig. 5.17, el comportamiento para la producción de agua es excelente, de hecho mejor que el del caso que hemos tomado como de referencia y también tendría un radio normalizado dentro de las estimaciones del tamaño del núcleo de Hale-Bopp. El caso de referencia tiene un mayor flujo de monóxido de carbono, que se traduce en un mayor arrastre de polvo y dificulta el desarrollo del manto, favoreciendo una mayor sublimación del agua. Sin embargo, rechazamos este caso frente al de referencia porque la producción de monóxido de carbono resulta demasiado baja postperihelio, encontrándose sistemática y significativamente por debajo de las barras de error. Estas diferencias podrían compensarse con producción distribuida si se expulsase una cantidad significativa de material fuente de monóxido de carbono, pero parece demasiado forzado que la fuente distribuida se active únicamente tras el perihelio. La fuente distribuida más probable para el monóxido de carbono en este caso serían partículas CHON, ya que la expulsión de hielo de monóxido de carbono y no de agua (que se encontraría a menor profundidad) resulta poco razonable.

#### 5.2.2.6. Energía liberada en la cristalización

Finalmente, en la Fig. 5.18 presentamos los perfiles de agua (panel superior) y monóxido de carbono (panel inferior) para un núcleo como el caso de referencia salvo que la energía liberada en la cristalización se ha reducido a la mitad del caso puramente exotérmico. Dada la cantidad de monóxido de carbono atrapado en el hielo amorfo considerada podría suceder algo así si el monóxido de carbono se comportase como hielo al sublimar a la hora de ser liberado. El perfil de agua muestra una caída postperihelio demasiado acusada, lo que unido a la caída similar que se observaba en el núcleo con hielo cristalino (ver Fig. 5.16) nos indica que la energía liberada en la cristalización es necesaria para mantener la producción de agua postperihelio a grandes distancias. El perfil del monóxido de carbono es sistemáticamente más elevado que el caso de referencia y, aunque tal y como estamos representando estas gráficas no se aprecia, es también mucho más regular, pudiendo considerarse una versión integrada o suavizada de la del caso de referencia. Debido a esto, la producción de monóxido de carbono resulta sistemáticamente sobreestimada preperihelio, mientras que posperihelio se mantiene en la zona superior dentro de las barras de error. Aunque reducir la cantidad de monóxido de carbono atrapado mejoraría el perfil de monóxido de carbono, de acuerdo con lo ya visto en secciones anteriores no podría solucionar la caída de la producción de agua posperihelio. Es por ello que consideramos que la energía liberada en la cristalización debe ser mayor de  $4.5 \cdot 10^4 \text{ J kg}^{-1}$  para ser compatible con las observaciones de Hale-Bopp.

Es importante mencionar que hemos realizado pruebas utilizando la misma parametrización para el calor neto liberado en la cristalización de Prialnik et al. (2004) (esto es, contando como energía consumida en la desorción de los volátiles



**Figura 5.18:** En el panel superior, producción de agua de un núcleo en el que la energía liberada en la cristalización es la mitad que en el caso puramente exotérmico. En el panel inferior, producción de monóxido de carbono para el mismo núcleo. El resto de los parámetros son como los del modelo de referencia (ver tabla 5.5)

su calor latente de sublimación) y los resultados no variaron demasiado respecto

a cuando no eran tenidos en cuenta. Esto era de esperar, ya que hemos visto que dicha parametrización da relativamente poco peso a la energía consumida en la desorción de elementos volátiles.

### 5.3. Resumen y conclusiones

Con el estudio realizado se ha mostrado que el modelo presentado en el capítulo 2 puede proporcionar una interpretación de la naturaleza del cometa Hale-Bopp al simular de modo satisfactorio y simultáneo el comportamiento y producciones de agua y del monóxido de carbono determinados observacionalmente. El conjunto de magnitudes que, de acuerdo a nuestras simulaciones, mejor reproduce el comportamiento observacional del cometa Hale-Bopp está resumido en la Tabla 5.5. Del estudio de sensibilidad a las principales magnitudes cometarias realizado y, en relación a las principales cuestiones que constituyen la motivación de esta memoria, encontramos que el modelo reproduce el comportamiento de Hale-Bopp cuando

- El núcleo está constituido por hielo amorfo que contiene en su interior monóxido de carbono atrapado.

- La inercia térmica es moderada, del orden de los  $200 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$ , pudiendo ser aceptables valores a partir de  $100 \text{ J m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$ .

- La razón polvo-hielo debe ser moderada-baja, con valores entre 0.5 y 1.

- La cantidad de monóxido de carbono debe estar entre un 15% y un 20% en masa del hielo amorfo (lo que representaría entre un 7.5 y un 10% del total de la masa cometaria si la razón polvo-hielo es 1). Es importante señalar que las simulaciones realizadas indican que este monóxido de carbono debe estar inicialmente atrapado en el hielo amorfo (sin perjuicio de que, con la evolución, pueda recondensar en zonas relativamente profundas). Este resultado está en línea con la no detección de neón por Cosmovici et al. (2006) lo que sugiere como posibilidad que la temperatura de formación sea suficientemente elevada para no permitir la condensación libre del CO y del gas noble.

- La energía liberada en la cristalización debe ser elevada, favoreciendo la hipótesis de que los volátiles atrapados en el hielo amorfo se comportan como un gas y no como hielo (desde el punto de vista energético).

Hay que decir que estas características por sí solas no son suficientes para reproducir el comportamiento observacional del cometa. De hecho, hemos mostrado que el desarrollo del manto juega un papel fundamental, al menos, en este caso. Así el comportamiento de Hale-Bopp se puede explicar si se desarrolla un manto de polvo en la gran mayoría de su superficie que entorpezca la producción de agua comparada con la que se obtendría en sublimación libre y controle la entrada de energía hacia el interior. Este hecho sugiere una distribución de tamaños relativamente amplia, compatible con algunas de las que hemos descrito en las primeras secciones de este capítulo. En nuestras simulaciones, de las distribuciones utilizadas, la que mejor reproduce el comportamiento del Hale-Bopp es una constituida

por polvo con tamaño máximo suficientemente grande como para quedarse en la superficie pero también suficiente pequeño como para que parte del mismo pueda ser arrastrado (esto es, del orden del milímetro, sin olvidar que se está realizando una caracterización global). Es importante señalar que el manto desarrollado en la simulación que mejor reproduce las observaciones permite, por un lado, la aparición de zonas activas de manera natural y, por otro, deja espacios en la superficie donde el hielo amorfo puede encontrarse relativamente cerca de la superficie. Este resultado sugiere que, por tanto, sería posible tener granos de hielo en estado amorfo en la coma cometaria del Hale-Bopp.

Con respecto a la presencia de fuentes distribuidas tanto para el agua como para el monóxido de carbono, hay que decir que lamentablemente la incertidumbre en el tamaño del núcleo no nos permite confirmar o desmentir su presencia. En el mejor de los casos, analizadas las simulaciones, sólo sería posible concluir que nuestro modelo de referencia, el que mejor reproduce las observaciones, sería compatible con que aproximadamente  $1/3$  de la producción de monóxido de carbono provenga de una fuente distribuida en la rama postperihelio de la órbita. Sin embargo, esa producción desde fuentes distribuidas estaría dentro del error típicamente asociable a las producciones de volátiles por lo que no es posible afirmarlo con rotundidad.

Finalmente hay que mencionar que dado el acoplamiento entre las magnitudes que se incluyen en el modelo existe la posibilidad de que diferentes combinaciones de parámetros cercanos a lo que hemos considerado modelo de referencia puedan dar, también, buenos resultados. En este sentido, el conjunto de parámetros dado debe considerarse una aproximación a las características del núcleo.

Igualmente es necesario mencionar también que el comportamiento de la producción de polvo no ha podido ser simulado junto al de los gases aunque los mejores resultados sugieren una eficiencia (con valor 3) similar al valor medio de la eficiencia observacional. Sin embargo, la información derivada de las observaciones parece indicar que la relación entre el gas y el polvo expulsados en cada momento es altamente variable. Si dicha información es correcta, esto indica que o bien el proceso de arrastre del polvo y la eficiencia tienen unas dependencias que todavía desconocemos o bien hay algún proceso más involucrado en la expulsión de polvo desde el núcleo que no se ha tenido en cuenta. Esta evidente limitación plantea también una interesante cuestión de estudio para el futuro.

## Capítulo 6

# Trabajo futuro. Resumen de los principales resultados y conclusiones generales.

### 6.1. Trabajo futuro

En primer lugar, una línea evidente de trabajo futuro es la mejora del propio modelo. A lo largo de esta memoria ha quedado claro que, a pesar de que hemos conseguido un tratamiento del polvo que trata adecuadamente la formación “natural” de un manto de material refractario y sus características (permeabilidad al flujo, conductividad térmica), el proceso de arrastre y expulsión de material refractario a la coma todavía no está resuelto de modo satisfactorio. Aproximaciones basadas en una proporción directa y constante entre el polvo y el gas expulsado, como las que se utilizan en este modelo y en todos los modelos termofísicos para núcleos cometarios que conocemos, no pueden, por construcción, reproducir adecuadamente las razones entre producciones de polvo y gas detectadas observacionalmente en la coma. Teniendo en cuenta el papel clave de la expulsión de material refractario en la evolución termofísica de los núcleos cometarios, sería interesante estudiar las posibles dependencias del arrastre de polvo en la coma para encontrar una expresión más realista para modelar la expulsión de polvo que las que se utilizan actualmente.

Por otro lado, a lo largo de la memoria se han indicado algunos estudios de tipo teórico que sería conveniente realizar. Estos estudios, como el sugerido de la relación entre la abundancia de compuestos minoritarios en la coma y en el núcleo, persiguen, de manera general, proporcionar información que facilite la interpretación de datos observacionales. Igualmente y también de manera general, la herramienta desarrollada tiene aplicación directa en el estudio de la evolución térmica de los objetos transneptunianos, lo que puede ayudar a definir la composición y estructura superficiales esperables, a la que se puede acceder observacionalmente. Concretamente, sería un estudio interesante evaluar la necesidad

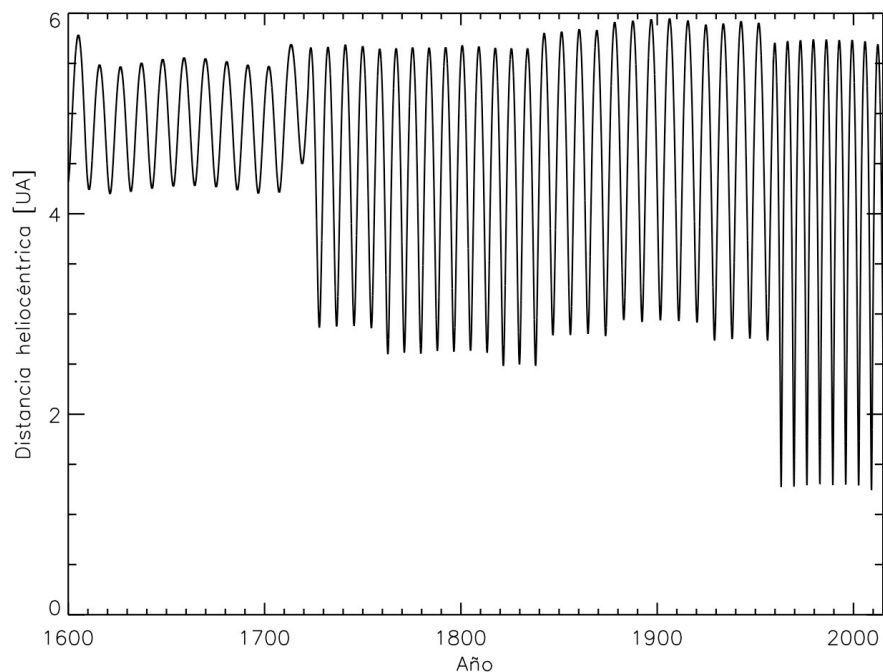
del criovulcanismo (y la consecuente necesidad del hielo con un punto de fusión reducido por la presencia de amoníaco) para explicar la posible cristalinidad de los hielos superficiales.

Además de esos estudios teóricos que podemos llamar puntuales, entendemos que el mayor valor del modelo está en su potencial capacidad para proporcionar una interpretación de hechos observacionales. Así, habiendo cumplido el principal objetivo de esta memoria que era el desarrollo del modelo y mostrada su capacidad para proporcionar una interpretación razonable de las observaciones cometarias, el siguiente paso natural es la aplicación sistemática del modelo desarrollado a distintos cometas, tanto de largo período como cometas de la familia de Júpiter. El objetivo final sería ver si los resultados obtenidos en esta memoria pueden generalizarse así como poder definir, de manera general, las etapas evolutivas cometarias.

En relación con esta última línea de trabajo estaría el avanzar en la comprensión de la naturaleza del cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko, objetivo de la misión Rosetta. El objetivo último sería obtener información que pueda ser útil para las estrategias de observación de la misión así como para la interpretación de los datos que se tomen.

El principal problema que afecta al 67P es que, hasta la fecha, no se dispone de una gran cantidad de información observacional, la mayor parte de la cual se puede encontrar en Lamy et al. (2007). Ello se debe, entre otras cosas, a que 67P no era el objetivo inicial de la misión Rosetta. Se decidió explorar este cometa en 2003, tras un fallo en el lanzador Ariane 5 que hizo retrasar la misión un año y elegir un nuevo objetivo científico. Antes de ser elegido como objetivo de Rosetta, el 67P no era considerado un cometa de especial interés y no se habían realizado observaciones intensivas de él. Tras su elección como objetivo científico principal de Rosetta el problema ha sido que el cometa no ha gozado de buenas condiciones de observabilidad desde la Tierra. En estas circunstancias cobran especial relevancia los modelos termofísicos ya que las simulaciones nos pueden ofrecer información (o al menos pistas) sobre la naturaleza del 67P. En este contexto, los resultados obtenidos en esta memoria adquieren una mayor importancia. La incertidumbre observacional concreta del 67P y la incertidumbre en las principales magnitudes cometarias en general apenas permitirían una estimación del estado actual de este cometa. Con los resultados obtenidos en este trabajo, especialmente la reducción de la incertidumbre en las principales magnitudes cometarias, pensamos que será posible evaluar, con menor ambigüedad, la posible evolución termofísica de este cometa. A ello, como apoyo científico a la misión Rosetta, dedicaremos nuestros esfuerzos en el futuro más inmediato. Lo que se perseguirá es realizar una simulación multiórbita de un núcleo simulando las circunstancias del 67P desde su etapa como Centauro hasta nuestros días. La órbita que utilizaremos en las simulaciones sistemáticas se muestra en la Fig. 6.1.

Ya hemos comenzado a realizar algunas simulaciones preliminares de la posible evolución termofísica de este cometa teniendo en cuenta la poca información observacional disponible (Lamy et al., 2007) y los principales resultados obtenidos en esta memoria, concretamente los parámetros obtenidos a partir de las simula-

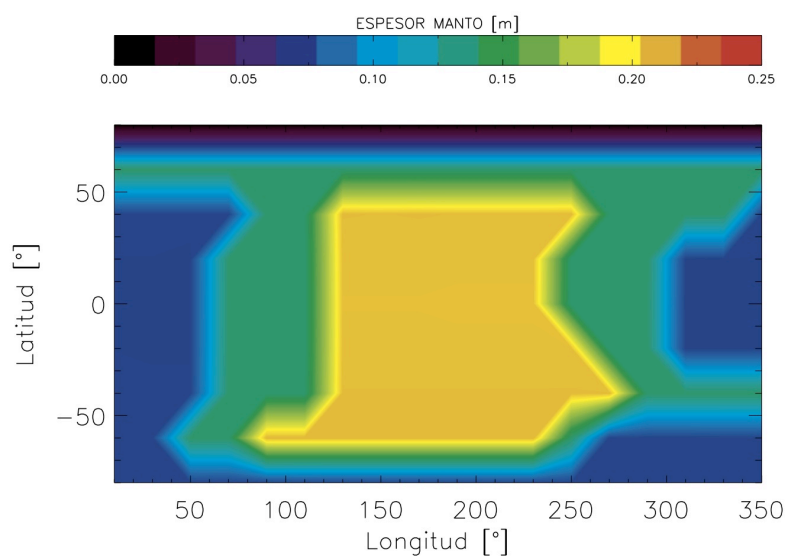


**Figura 6.1:** Evolución temporal de la distancia heliocéntrica del cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko desde el 1/1/1600 (origen en abscisa) hasta nuestros días estimada según el integrador *Horizons* del *Jet Propulsion Laboratory (NASA)*.

ciones del 29P, que se supone comparte origen con el 67P. Los resultados de estas simulaciones, aun preliminares, son interesantes pues muestran que, incluso en cometas muy evolucionados, sería posible encontrar material helado relativamente cerca de la superficie. Las figuras 6.2 y 6.3 muestran algunos de estos resultados preliminares que, en todo caso, hay que tomar con mucha cautela. La Fig. 6.2 muestra el espesor del manto de polvo que se generaría en circunstancias realistas (distribución de tamaños de polvo, erosión, formación de manto, etc.) cuando la orientación del eje de rotación (considerado fijo) es perpendicular al plano orbital. En ella se puede ver que, tras más de 400 años de simulación, incluso en la zona térmicamente más evolucionada (el ecuador), sería posible encontrar hielo de agua (cristalino) a profundidades al alcance de los sensores MUPUS (menos de 20 cm). Por otro lado, en la Fig. 6.3 se muestra la profundidad del frente de cristalización. La simulación indicaría que es posible encontrar hielo amorfo prácticamente en la

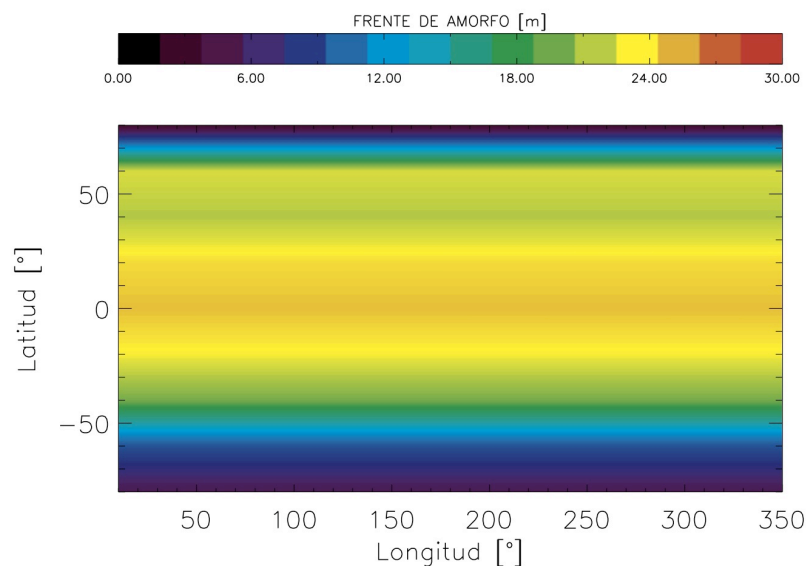


superficie en la región polar. Sin embargo esto es una consecuencia de la orientación del eje de rotación elegida, de modo que sacar conclusiones al respecto sería, como poco, arriesgado. Más probable es que, en las circunstancias simuladas, el material prístino esté bastante profundo, lejos incluso del sistema de anclaje del módulo Philae. Como decimos, estos resultados preliminares no deben considerarse una predicción. El motivo principal es que, en las circunstancias simuladas, el modelo proporciona una producción de polvo muy inferior a la determinada observacionalmente (ver e.g Moreno et al., 2004). Si es posible elevar la producción de polvo del modelo (lo que implicaría una mayor erosión) es probable que la profundidad del frente de amorfo se reduzca considerablemente.



**Figura 6.2:** Espesor del manto de polvo obtenido en las simulaciones preliminares del 67P tras 400 años de simulación con la órbita mostrada en la Fig. 6.1. El eje de rotación es normal al plano orbital y los principales parámetros termofísicos son los correspondientes al 29P descritos en el capítulo 4 de esta memoria (objeto con el que se supone que el 67P comparte origen).

Además de los estudios mencionados y con la idea de aplicar el modelo para interpretar los datos que tomará Rosetta del 67P, se pretende seguir trabajando el desarrollo del propio modelo, incluyendo mejoras como sería ampliar el tratamiento de volátiles minoritarios para incluir una descripción multiespecie.



**Figura 6.3:** Profundidad del frente de cristalización obtenido en las simulaciones preliminares del 67P tras 400 años de simulación con la órbita mostrada en la Fig. 6.1. El eje de rotación es normal al plano orbital y los principales parámetros termofísicos son los correspondientes al 29P descritos en el capítulo 4 de esta memoria (objeto con el que se supone que el 67P comparte origen).

## 6.2. Resumen de la memoria y conclusiones generales

En esta memoria de tesis se ha presentado un modelo para describir la evolución termofísica de un medio poroso helado que tiene su aplicación directa en los cuerpos pequeños helados del Sistema Solar, como cometas y objetos transneptunianos, constituidos por una mezcla de material refractario (polvo) y elementos volátiles. El modelo exige la resolución de las ecuaciones de transporte de masa y energía en el medio y tiene en cuenta los principales procesos físicos que tienen lugar como sublimación, condensación, transiciones de fase y erosión. Dicho modelo puede proporcionar una estimación de las temperaturas superficiales e interiores, la estratificación y diferenciación química esperable en cuerpos evolucionados así como las tasas de producción de polvo y de los principales elementos volátiles.

El modelo desarrollado se ha utilizado para explorar la naturaleza cometaria y para ello se han realizado distintos estudios que parten de la suposición de que el constituyente principal volátil inicial de los núcleos cometarios es el hielo

amorfo. Con esta suposición se han desarrollado 3 estudios con los que se perseguía, principalmente:

- Evaluar los posibles efectos de la presencia de hielo de agua amorfo, como elemento prístino cometario, en la evolución termofísica de los cometas.

- Determinar si el modelo nos puede proporcionar una interpretación de los hechos observacionales relacionados con los cometas 29P/Schwassmann-Wachmann y Hale-Bopp que, además, nos permitiese constreñir las principales magnitudes cometarias sobre las que existe gran incertidumbre: energía liberada en la cristalización, contenido de volátil secundario, inercia térmica y razón polvo-hielo.

Los principales resultados y conclusiones de los distintos estudios han sido detallados en los distintos capítulos de la memoria. Entre éstos destacamos:

- El frente de cristalización puede evolucionar en rachas cuasi-periódicas que se deben a la acumulación de energía en el propio frente ante la imposibilidad de que el calor difunda hacia el interior dado el elevado carácter aislante del hielo amorfo. La periodicidad de las rachas depende de las características del medio, principalmente, inercia térmica y razón polvo-hielo.

- La presencia de hielo amorfo puede explicar la ocurrencia de explosiones de actividad cuasiperiódicas como las observadas en el cometa 29P y el Tempel 1.

- Dependiendo de la erosión que afecta a la superficie cometaria, existen un gran número de circunstancias físicas, compatible con la incertidumbre asociada a las principales magnitudes cometarias, en las que se asegura la supervivencia del hielo amorfo relativamente cerca de la superficie.

El modelo nos permite obtener una interpretación plausible de datos observacionales cometarios. Aceptando como válidas las hipótesis del modelo, los datos observacionales de los cometas 29P y Hale-Bopp resultan compatibles con un núcleo constituido por hielo amorfo de agua albergando un componente volátil en su interior que se libera cuando el agua cristaliza. El ajuste cualitativo y cuantitativo (cuando es posible) de los datos observacionales de esos dos cometas nos permiten constreñir las principales magnitudes cometarias sobre las que existe una gran incertidumbre. Se obtiene compatibilidad entre el modelo y las observaciones cuando:

- El volátil atrapado en el interior del hielo amorfo se comporta, energéticamente, como un gas, consumiendo sólo una pequeña fracción de la energía liberada en la cristalización. Esto resulta en que la cristalización contribuye de manera significativa al inventario energético del núcleo.

- La cantidad de monóxido de carbono contenida en el interior del núcleo es del orden del 15 ó el 20 % en masa del componente volátil.

- La inercia térmica compatible con las observaciones está entre 100 y  $200 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$ .

- La razón polvo-hielo debe ser menor o igual 1.

Ese conjunto de parámetros sería compatible, a su vez, con que las miniexplosiones detectadas en el cometa Tempel 1 sean debidas a la presencia de hielo amorfo

en su interior. Llama la atención que ese conjunto de magnitudes sea compatible, a la vez, con las observaciones de dos cometas cuyo origen, posiblemente, es diferente: el Hale-Bopp presumiblemente formado en la región Júpiter-Saturno y el 29P presumiblemente formado en la región transneptuniana. Las diferencias en la naturaleza de estos dos cometas, que pueden reflejar circunstancias y condiciones de la región de formación, son:

-Mientras que la razón polvo-hielo del 29P que proporciona una interpretación razonable de los hechos observacionales sería, más probablemente, inferior a 0.5, la del Hale-Bopp estaría, más probablemente, entre 0.5 y 1. Si esta diferencia se confirma con el análisis de otros cometas, esa variación de la razón polvo-hielo podría representar un gradiente composicional en la nebulosa solar. En nuestra opinión, más improbable sería que esa posible diferencia en la razón polvo-hielo, si se confirma, se debiese a aspectos relacionados con las distintas evoluciones dinámicas en las diferentes regiones de formación pues eso, posiblemente, implicaría calentamientos que afectarían también al contenido de componentes más volátiles (globalmente similar en ambos casos).

-Aunque ambos cometas muestran un contenido global de monóxido de carbono inicial en torno al 20 % del material volátil, el Hale-Bopp requiere que todo el monóxido de carbono esté atrapado mientras que el 29P requeriría que la mitad del componente más volátil esté condensado libre. Esta diferencia, en principio, podría deberse a un lógico gradiente de temperatura entre la región de Jupiter y la de Neptuno. Esperando una temperatura mayor en la región de formación del cometa Hale-Bopp (Júpiter-Saturno) sería aceptable pensar que allí el monóxido de carbono no podría condensar libre, quedando atrapado en su totalidad. Hay que decir que esta conclusión contrastaría con las evidencias observacionales, mencionadas en la introducción, de que las temperaturas de formación de los distintos tipos de cometas (o la de condensación de los hielos) es similar. Si este resultado derivado de las observaciones se confirma con una estadística más completa, la necesidad de que exista una cantidad condensada libre en el 29P comparada con la ausencia de ella en el cometa Hale-Bopp podría ser debida a aspectos evolutivos (transiciones en distintos estados de amorfo, reestructuración del hielo amorfo, etc.) como consecuencia de la, posiblemente, mayor temperatura del 29P en su región de residencia (el cinturón de Kuiper).

La existencia de hielo amorfo en esos dos cometas, si es confirmada y generalizada, tendría implicaciones sobre las circunstancias de formación de estos cuerpos. Si aceptamos cómo válidos los resultados de Prialnik et al. (1987) sobre el efecto del calentamiento radiogénico sería necesario que tanto el 29P como el Hale-Bopp se hubiesen formado entre 4 y 5 millones de años después que las condrolas encontradas en los meteoritos. Este resultado supone importantes restricciones a los modelos de formación del Sistema Solar (como son descritos, por ejemplo, en Weidenschilling 2004). Alargar las escalas de formación de cuerpos kilométricos en las regiones externas del Sistema Solar favorece escenarios donde el crecimiento estaría controlado por la interacción gravitatoria minimizando el papel desarrollado por el arrastre del gas.

# Bibliografía

- Icy-Hot Mercury's Water Pinned Down in the Dark. *Science*, 336:150–, April 2012.
- M. F. A'Hearn, E. Dwek, y A. T. Tokunaga. Where is the ice in comets. *The Astrophysical Journal, Letters*, 248:L147–L151, September 1981. doi: 10.1086/183644.
- M. F. A'Hearn, D. G. Schleicher, y P. D. Feldman. The discovery of S2 in comet IRAS-Araki-Alcock 1983d. *The Astrophysical Journal, Letters*, 274:L99–L103, November 1983. doi: 10.1086/184158.
- M. F. A'Hearn, R. L. Millis, D. G. Schleicher, D. J. Osip, y P. V. Birch. The ensemble properties of comets: Results from narrowband photometry of 85 comets, 1976-1992. *Icarus*, 118:223–270, December 1995. doi: 10.1006/icar.1995.1190.
- M. F. A'Hearn, C. Arpigny, P. D. Feldman, W. M. Jackson, R. Meier, H. A. Weaver, D. D. Wellnitz, y L. M. Woodney. Formation of S2 in Comets. In *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #32*, volume 32 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 1079, October 2000.
- M. F. A'Hearn, M. J. S. Belton, C. J. Crockett, T. L. Farnham, L. Feaga, O. Groussin, N. Mastrodemos, W. M. Owen, J. M. Sunshine, y Deep Impact Team. Natural Outbursts by Comet Tempel 1. In *American Astronomical Society Meeting Abstracts*, volume 37 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 189.01, December 2005.
- M. F. A'Hearn, M. J. S. Belton, W. A. Delamere, L. M. Feaga, D. Hampton, J. Kissel, K. P. Klaasen, L. A. McFadden, K. J. Meech, H. J. Melosh, P. H. Schultz, J. M. Sunshine, P. C. Thomas, J. Veverka, D. D. Wellnitz, D. K. Yeomans, S. Besse, D. Bodewits, T. J. Bowling, B. T. Carcich, S. M. Collins, T. L. Farnham, O. Groussin, B. Hermalyn, M. S. Kelley, M. S. Kelley, J.-Y. Li, D. J. Lindler, C. M. Lisse, S. A. McLaughlin, F. Merlin, S. Protopapa, J. E. Richardson, y J. L. Williams. EPOXI at Comet Hartley 2. *Science*, 332:1396–, June 2011. doi: 10.1126/science.1204054.
- A. Allouche, P. Verlaque, y J. Pourcin. CO adsorption isotherms on ice by Fourier Transform Infrared Spectroscopy and new insights of the ice surface from Quan-

- tum ab initio investigations. *Journal of Physical Chemistry B*, 102:89–98, January 1998. doi: 10.1021/jp970877t.
- W. J. Altenhoff, J. H. Bieging, B. Butler, H. M. Butner, R. Chini, C. G. T. Haslam, E. Kreysa, R. N. Martin, R. Mauersberger, J. McMullin, D. Muders, W. L. Peters, J. Schmidt, J. B. Schraml, A. Sievers, P. Stumpff, C. Thum, A. von Kap-Herr, H. Wiesemeyer, J. E. Wink, y R. Zylka. Coordinated radio continuum observations of comets Hyakutake and Hale-Bopp from 22 to 860 GHz. *Astronomy & Astrophysics*, 348:1020–1034, August 1999.
- W. J. Altenhoff, F. Bertoldi, K. M. Menten, A. Sievers, C. Thum, y E. Kreysa. Radio continuum observations of Comet C/1999 S4 (LINEAR) before, during, and after break-up of its nucleus. *Astronomy & Astrophysics*, 391:353–360, August 2002. doi: 10.1051/0004-6361:20020783.
- C. A. Angell. Amorphous Water. *Annual Review of Physical Chemistry*, 55:559–583, January 2004. doi: 10.1146/annurev.physchem.55.091602.094156.
- E. Asphaug y W. Benz. Density of comet Shoemaker-Levy 9 deduced by modelling breakup of the parent ‘rubble pile’. *Nature*, 370:120–124, July 1994. doi: 10.1038/370120a0.
- E. Asphaug y W. Benz. Size, Density, and Structure of Comet Shoemaker-Levy 9 Inferred from the Physics of Tidal Breakup. *Icarus*, 121:225–248, June 1996. doi: 10.1006/icar.1996.0083.
- M. E. Bailey, V. V. Emel’Yanenko, G. Hahn, N. W. Harris, K. A. Hughes, K. Muinonen, y J. V. Scotti. Orbital evolution of Comet 1995 O1 Hale-Bopp. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 281:916–924, August 1996.
- M. Banaszekiewicz y H. Rickman. Modeling of Cometary Evolution by Kinetic Theory: Method and First Results. *Earth Moon and Planets*, 72:203–210, February 1996. doi: 10.1007/BF00117518.
- A. Bar-Nun y D. Laufer. First experimental studies of large samples of gas-laden amorphous “cometary” ices. *Icarus*, 161:157–163, January 2003. doi: 10.1016/S0019-1035(02)00016-7.
- A. Bar-Nun y T. Owen. Trapping of Gases in Water Ice and Consequences to Comets and the Atmospheres of the Inner Planets. In B. Schmitt, C. de Bergh, y M. Festou, editors, *Solar System Ices*, volume 227 of *Astrophysics and Space Science Library*, page 353, 1998.
- A. Bar-Nun, G. Herman, D. Laufer, y M. L. Rappaport. Trapping and release of gases by water ice and implications for icy bodies. *Icarus*, 63:317–332, September 1985. doi: 10.1016/0019-1035(85)90048-X.

- A. Bar-Nun, B. Donn, R. J. A. Grim, F. R. Krueger, V. Pirronello, B. Schmitt, y G. Strazzulla. Report of the Working Group on Ice and Related Topics. In E. Bussoletti, C. Fusco, y G. Longo, editors, *Experiments on Cosmic Dust Analogues*, volume 149 of *Astrophysics and Space Science Library*, page 353, 1988.
- A. Bar-Nun, G. Notesco, y T. Owen. Trapping of N<sub>2</sub>, CO and Ar in amorphous ice Application to comets. *Icarus*, 190:655–659, October 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2007.03.021.
- A. Bar-Nun, I. Pat-El, y D. Laufer. How Well Do Experimental Results on Large Samples of Gas-Laden Amorphous Ice Duplicate Deep Impact’s Findings? *Space Science Reviews*, 138:199–205, July 2008. doi: 10.1007/s11214-008-9307-6.
- E. H. Beer, M. Podolak, y D. Prialnik. The contribution of icy grains to the activity of comets. I. Grain lifetime and distribution. *Icarus*, 180:473–486, February 2006. doi: 10.1016/j.icarus.2005.10.018.
- M. J. S. Belton, P. Thomas, J. Veverka, P. Schultz, M. F. A’Hearn, L. Feaga, T. Farnham, O. Groussin, J.-Y. Li, C. Lisse, L. McFadden, J. Sunshine, K. J. Meech, W. A. Delamere, y J. Kissel. The internal structure of Jupiter family cometary nuclei from Deep Impact observations: The talps or layered pile model. *Icarus*, 187:332–344, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.09.005.
- M. J. S. Belton, P. D. Feldman, M. F. A’Hearn, y B. Carcich. Cometary cryovolcanism: Source regions and a model for the UT 2005 June 14 and other mini-outbursts on Comet 9P/Tempel 1. *Icarus*, 198:189–207, November 2008. doi: 10.1016/j.icarus.2008.07.009.
- M. J. S. Belton, P. Thomas, J.-Y. Li, B. Carcich, M. F. A’Hearn, S. McLaughlin, T. Farnham, L. McFadden, Lisse C. M., S. Collins, S. Besse, K. Klaasen, Sunshine J., Meech K. J., y D. Lindler. The complex spin state of 103P/Hartley 2: Kinematics and orientation in space. *Icarus*, *En prensa*, 2012.
- J. L. Bertaux, J. E. Blamont, y M. Festou. Interpretation of Hydrogen Lyman-Alpha Observations of Comets Bennett and Encke. *Astronomy & Astrophysics*, 25:415–430, June 1973.
- J.-P. Bibring, Y. Langevin, F. Poulet, A. Gendrin, B. Gondet, M. Berthé, A. Soufflot, P. Drossart, M. Combes, G. Bellucci, V. Moroz, N. Mangold, B. Schmitt, OMEGA Team, S. Erard, O. Forni, N. Manaud, G. Poulleau, T. Encrenaz, T. Fouchet, R. Melchiorri, F. Altieri, V. Formisano, G. Bonello, S. Fonti, F. Capaccioni, P. Cerroni, A. Coradini, V. Kottsov, N. Ignatiev, D. Titov, L. Zasova, P. Pinet, C. Sotin, E. Hauber, H. Hoffman, R. Jaumann, U. Keller, R. Arvidson, J. Mustard, T. Duxbury, y F. Forget. Perennial water ice identified in the south polar cap of Mars. *Nature*, 428:627–630, April 2004. doi: 10.1038/nature02461.

- N. Biver. Correlation between visual magnitudes and the outgassing rate of CO in comets beyond 3 AU. *International Comet Quarterly*, 23:85–93, July 2001.
- N. Biver, D. Bockelee-Morvan, P. Colom, J. Crovisier, J. K. Davies, W. R. F. Dent, D. Despois, E. Gerard, E. Lellouch, H. Rauer, R. Moreno, y G. Paubert. Evolution of the outgassing of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1) from radio observations. *Science*, 275:1915–1918, March 1997. doi: 10.1126/science.275.5308.1915.
- N. Biver, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, J. K. Davies, H. E. Matthews, J. E. Wink, H. Rauer, P. Colom, W. R. F. Dent, D. Despois, R. Moreno, G. Paubert, D. Jewitt, y M. Senay. Spectroscopic Monitoring of Comet C/1996 B2 (Hyakutake) with the JCMT and IRAM Radio Telescopes. *The Astronomical Journal*, 118:1850–1872, October 1999. doi: 10.1086/301033.
- N. Biver, D. Bockelée-Morvan, P. Colom, J. Crovisier, F. Henry, E. Lellouch, A. Winnberg, L. E. B. Johansson, M. Gunnarsson, H. Rickman, F. Rantakyrö, J. K. Davies, W. R. F. Dent, G. Paubert, R. Moreno, J. Wink, D. Despois, D. J. Benford, M. Gardner, D. C. Lis, D. Mehringer, T. G. Phillips, y H. Rauer. The 1995 2002 Long-Term Monitoring of Comet C/1995 O1 (HALE BOPP) at Radio Wavelength. *Earth Moon and Planets*, 90:5–14, June 2002. doi: 10.1023/A:1021599915018.
- N. Biver, D. Bockelée-Morvan, J. Crovisier, D. C. Lis, R. Moreno, P. Colom, F. Henry, F. Herpin, G. Paubert, y M. Womack. Radio wavelength molecular observations of comets C/1999 T1 (McNaught-Hartley), C/2001 A2 (LINEAR), C/2000 WM<sub>1</sub> (LINEAR) and 153P/Ikeya-Zhang. *Astronomy & Astrophysics*, 449:1255–1270, April 2006. doi: 10.1051/0004-6361:20053849.
- J. Blum y M. Münch. Experimental investigations on aggregate-aggregate collisions in the early solar nebula. *Icarus*, 106:151, November 1993. doi: 10.1006/icar.1993.1163.
- N. T. Bobrovnikoff. Reports of observations 1953-1954: Perkins Observatory-Physical properties of comets. *The Astronomical Journal*, 59:356–358, October 1954. doi: 10.1086/107045.
- D. Bockelée-Morvan. An Overview of Comet Composition. In *IAU Symposium*, volume 280 of *IAU Symposium*, pages 261–274, December 2011. doi: 10.1017/S1743921311025038.
- D. Bockelée-Morvan, F. Henry, N. Biver, J. Boissier, P. Colom, J. Crovisier, D. Despois, R. Moreno, y J. Wink. Interferometric imaging of carbon monoxide in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp): evidence of a strong rotating jet. *Astronomy & Astrophysics*, 505:825–843, October 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200911765.
- D. C. Boice y C. Reylé. The Nature of Diatomic Sulfur in Comets. *Highlights of Astronomy*, 13:501, January 2005.



- T. Y. Brooke, H. A. Weaver, G. Chin, D. Bockelée-Morvan, S. J. Kim, y L.-H. Xu. Spectroscopy of Comet Hale-Bopp in the infrared. *Icarus*, 166:167–187, November 2003. doi: 10.1016/j.icarus.2003.08.008.
- D. E. Brown y S. M. George. H<sub>2</sub>O condensation coefficient and refractive index for vapor-deposited ice from Molecular beam and Optical interference measurements. *Journal of Physical Chemistry*, 100:4988–4995, March 1996. doi: 10.1021/jp952547j.
- M. E. Brown. Pluto and Charon: Formation, Seasons, Composition. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 30:307–345, 2002. doi: 10.1146/annurev.earth.30.090401.095213.
- M. E. Brown y W. M. Calvin. Evidence for Crystalline Water and Ammonia Ices on Pluto’s Satellite Charon. *Science*, 287:107–109, January 2000. doi: 10.1126/science.287.5450.107.
- D. Brownlee, P. Tsou, J. Aléon, C. M. O. ’. Alexander, T. Araki, S. Bajt, G. A. Baratta, R. Bastien, P. Bland, P. Bleuét, J. Borg, J. P. Bradley, A. Brearley, F. Brenker, S. Brennan, J. C. Bridges, N. D. Browning, J. R. Brucato, E. Bullock, M. J. Burchell, H. Busemann, A. Butterworth, M. Chaussidon, A. Chevront, M. Chi, M. J. Cintala, B. C. Clark, S. J. Clemett, G. Cody, L. Colangeli, G. Cooper, P. Cordier, C. Daghljan, Z. Dai, L. D’Hendecourt, Z. Djouadi, G. Dominguez, T. Duxbury, J. P. Dworkin, D. S. Ebel, T. E. Economou, S. Fakra, S. A. J. Fairey, S. Fallon, G. Ferrini, T. Ferroir, H. Fleckenstein, C. Floss, G. Flynn, I. A. Franchi, M. Fries, Z. Gainsforth, J.-P. Gallien, M. Genge, M. K. Gilles, P. Gillet, J. Gilmour, D. P. Glavin, M. Gounelle, M. M. Grady, G. A. Graham, P. G. Grant, S. F. Green, F. Grossemy, L. Grossman, J. N. Grossman, Y. Guan, K. Hagiya, R. Harvey, P. Heck, G. F. Herzog, P. Hoppe, F. Hörz, J. Huth, I. D. Hutcheon, K. Ignatyev, H. Ishii, M. Ito, D. Jacob, C. Jacobsen, S. Jacobsen, S. Jones, D. Joswiak, A. Jurewicz, A. T. Kearsley, L. P. Keller, H. Khodja, A. L. D. Kilcoyne, J. Kissel, A. Krot, F. Langenhorst, A. Lanzirotti, L. Le, L. A. Leshin, J. Leitner, L. Lemelle, H. Leroux, M.-C. Liu, K. Luening, I. Lyon, G. MacPherson, M. A. Marcus, K. Marhas, B. Marty, G. Matrajt, K. McKeegan, A. Meibom, V. Mennella, K. Messenger, S. Messenger, T. Mikouchi, S. Mostefaoui, T. Nakamura, T. Nakano, M. Newville, L. R. Nittler, I. Ohnishi, K. Ohsumi, K. Okudaira, D. A. Papanastassiou, R. Palma, M. E. Palumbo, R. O. Pepin, D. Perkins, M. Perronnet, P. Pianetta, W. Rao, F. J. M. Rietmeijer, F. Robert, D. Rost, A. Rotundi, R. Ryan, S. A. Sandford, C. S. Schwandt, T. H. See, D. Schlutter, J. Sheffield-Parker, A. Simionovici, S. Simon, I. Sitnitsky, C. J. Snead, M. K. Spencer, F. J. Stadermann, A. Steele, T. Stephan, R. Stroud, J. Susini, S. R. Sutton, Y. Suzuki, M. Taheri, S. Taylor, N. Teslich, K. Tomeoka, N. Tomioka, A. Toppani, J. M. Trigo-Rodríguez, D. Troadec, A. Tsuchiyama, A. J. Tuzzolino, T. Tyliczszak, K. Uesugi, M. Velbel, J. Vellenga, E. Vicenzi, L. Vincze, J. Warren, I. Weber, M. Weisberg, A. J.

- Westphal, S. Wirick, D. Wooden, B. Wopenka, P. Wozniakiewicz, I. Wright, H. Yabuta, H. Yano, E. D. Young, R. N. Zare, T. Zega, K. Ziegler, L. Zimmerman, E. Zinner, y M. Zolensky. Comet 81P/Wild 2 Under a Microscope. *Science*, 314:1711–, December 2006. doi: 10.1126/science.1135840.
- E. Bussoletti, L. Colangeli, J. J. Lopez Moreno, E. Epifani, V. Mennella, E. Palomba, P. Palumbo, A. Rotundi, S. Vergara, F. Girela, M. Herranz, J. M. Jeronimo, A. C. Lopez-Jimenez, A. Molina, F. Moreno, I. Olivares, R. Rodrigo, J. F. Rodriguez-Gomez, J. Sanchez, J. A. M. McDonnell, M. Leese, P. Lamy, S. Perruchot, J. F. Crifo, M. Fulle, J. M. Perrin, F. Angrilli, E. Benini, L. Casini, G. Cherubini, A. Coradini, F. Giovane, E. Grün, B. Gustafson, C. Maag, y P. R. Weissmann. The GIADA Experiment for Rosetta Mission to Comet 46P/Wirtanen: Design and Performances. *Advances in Space Research*, 24: 1149–1158, January 1999. doi: 10.1016/S0273-1177(99)00695-X.
- H. Cabot, A. Enzian, J. Klinger, y S. Majolet. Complementary studies on the unexpected activity of comet Schwassmann-Wachmann 1. *Planetary Space Science*, 44:1015–1020, September 1996. doi: 10.1016/0032-0633(95)00135-2.
- H. Campins, G. H. Rieke, y M. J. Lebofsky. Ice in Comet Bowell. *Nature*, 301: 405, February 1983. doi: 10.1038/301405a0.
- M. T. Capria. Sublimation Mechanisms of Comet Nuclei. *Earth Moon and Planets*, 89:161–178, October 2000. doi: 10.1023/A:1021502605024.
- M. T. Capria, A. Coradini, y M. C. de Sanctis. C/1995 O1 Hale-Bopp: Short and Long Distance activity from a Theoretical Model. *Earth Moon and Planets*, 90: 217–225, June 2002. doi: 10.1023/A:1021549425922.
- J. M. Castro Marín, V. J. G. Brown, A. C. López Jiménez, J. Rodríguez Gómez, y R. Rodrigo. Mechanism controller system for the optical spectroscopic and infrared remote imaging system instrument on board the Rosetta space mission. *Review of Scientific Instruments*, 72:2423–2427, May 2001. doi: 10.1063/1.1366632.
- C. Cavazzoni, G. L. Chiarotti, S. Scandolo, E. Tosatti, M. Bernasconi, y M. Parrinello. Superionic and Metallic States of Water and Ammonia at Giant Planet Conditions. *Science*, 283:44, January 1999. doi: 10.1126/science.283.5398.44.
- Y.-J. Choi, M. Cohen, R. Merk, y D. Prialnik. Long-Term Evolution of Objects in the Kuiper Belt Zone-Effects of Insolation and Radiogenic Heating. *Icarus*, 160:300–312, December 2002. doi: 10.1006/icar.2002.6976.
- M. Cohen, D. Prialnik, y M. Podolak. A quasi-3D model for the evolution of shape and temperature distribution of comet nuclei-application to Comet 46P/Wirtanen. , 8:179–189, March 2003. doi: 10.1016/S1384-1076(02)00223-3.

- L. Colangeli, J. R. Brucato, A. Bar-Nun, R. L. Hudson, y M. H. Moore. Laboratory experiments on cometary materials. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 695–717, 2004.
- L. Colangeli, J. J. Lopez-Moreno, P. Palumbo, J. Rodriguez, M. Cosi, V. Della Corte, F. Esposito, M. Fulle, M. Herranz, J. M. Jeronimo, A. Lopez-Jimenez, E. M. Epifani, R. Morales, F. Moreno, E. Palomba, y A. Rotundi. The Grain Impact Analyser and Dust Accumulator (GIADA) Experiment for the Rosetta Mission: Design, Performances and First Results. *Space Science Reviews*, 128: 803–821, February 2007. doi: 10.1007/s11214-006-9038-5.
- M. P. Collings, J. W. Dever, H. J. Fraser, M. R. S. McCoustra, y D. A. Williams. Carbon Monoxide Entrapment in Interstellar Ice Analogs. *The Astrophysical Journal*, 583:1058–1062, February 2003. doi: 10.1086/345389.
- M. P. Collings, M. A. Anderson, R. Chen, J. W. Dever, S. Viti, D. A. Williams, y M. R. S. McCoustra. A laboratory survey of the thermal desorption of astrophysically relevant molecules. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 354:1133–1140, November 2004. doi: 10.1111/j.1365-2966.2004.08272.x.
- P. Colom, J. Crovisier, D. Bockelee-Morvan, D. Despois, y G. Paubert. Formaldehyde in comets. I - Microwave observations of P/Brorsen-Metcalf (1989 X), Austin (1990 V) and Levy (1990 XX). *Astronomy & Astrophysics*, 264:270–281, October 1992.
- P. Colom, E. Gérard, J. Crovisier, D. Bockelé-Morvan, N. Biver, y H. Rauer. Observations of the OH Radical in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) with the Nançay Radio Telescope. *Earth Moon and Planets*, 78:37–43, July 1997. doi: 10.1023/A:1006206924786.
- J. E. Colwell y B. M. Jakosky. The evolution of topography on a comet. *Icarus*, 72:128–134, October 1987. doi: 10.1016/0019-1035(87)90124-2.
- J. E. Colwell, B. M. Jakosky, B. J. Sandor, y S. A. Stern. Evolution of topography on comets. II - Icy craters and trenches. *Icarus*, 85:205–215, May 1990. doi: 10.1016/0019-1035(90)90111-L.
- M. Combi. Hale-Bopp: What Makes a Big Comet Different? Coma Dynamics: Observations and Theory. *Earth Moon and Planets*, 89:73–90, October 2000. doi: 10.1023/A:1021534117319.
- J. C. Cook, S. J. Desch, y S. Wyckoff. Visible and Near Infrared Spectra of Comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. In *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #37*, volume 37 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 645, August 2005.

- C. B. Cosmovici, V. Bratina, G. Schwarz, G. Tozzi, M. J. Mumma, y R. Stalio. Comet Hale-Bopp (C/1995 O1): UVSTAR-FUV Spectroscopy from the Space Shuttle. , 301:135–143, January 2006. doi: 10.1007/s10509-006-0180-z.
- H. Cottin y N. Fray. Distributed Sources in Comets. *Space Science Reviews*, 138: 179–197, July 2008. doi: 10.1007/s11214-008-9399-z.
- J. J. Cowan y M. F. A’Hearn. Vaporization of comet nuclei - Light curves and life times. *Moon and Planets*, 21:155–171, October 1979. doi: 10.1007/BF00897085.
- J. Crovisier. Water in comets: observations and models. *Highlights of Astronomy*, 12:73–75, 2002.
- J. Crovisier y T. Encrenaz. *Comet Science*. March 2000.
- J. Crovisier, N. Biver, D. Bockelee-Morvan, P. Colom, L. Jorda, E. Lellouch, G. Paubert, y D. Despois. Carbon monoxide outgassing from Comet P/Schwassmann-Wachmann 1. *Icarus*, 115:213–216, May 1995. doi: 10.1006/icar.1995.1091.
- J. Crovisier, K. Leech, D. Bockelée-Morvan, E. Lellouch, T. Y. Brooke, M. S. Hanner, B. Altieri, H. U. Keller, y T. Lim. The Spectrum of Comet Hale-Bopp as seen by ISO. In P. Cox & M. Kessler, editor, *The Universe as Seen by ISO*, volume 427 of *ESA Special Publication*, page 137, March 1999.
- J. Crovisier, D. Bockelée-Morvan, P. Colom, N. Biver, D. Despois, D. C. Lis, y Team for target-of-opportunity radio observations of comets. The composition of ices in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) from radio spectroscopy. Further results and upper limits on undetected species. *Astronomy & Astrophysics*, 418:1141–1157, May 2004. doi: 10.1051/0004-6361:20035688.
- D. P. Cruikshank y R. H. Brown. The nucleus of comet P/Schwassmann-Wachmann 1. *Icarus*, 56:377–380, December 1983. doi: 10.1016/0019-1035(83)90158-6.
- D. P. Cruikshank, B. Schmitt, T. L. Roush, T. C. Owen, E. Quirico, T. R. Geballe, C. de Bergh, M. J. Bartholomew, C. M. Dalle Ore, S. Douté, y R. Meier. Water Ice on Triton. *Icarus*, 147:309–316, September 2000. doi: 10.1006/icar.2000.6451.
- B. Davidsson, P. J. Gutiérrez, y Otros. . *En prensa*, 2012.
- B. J. R. Davidsson y P. J. Gutiérrez. Estimating the nucleus density of Comet 19P/Borrelly. *Icarus*, 168:392–408, April 2004. doi: 10.1016/j.icarus.2003.11.009.
- B. J. R. Davidsson y P. J. Gutiérrez. Nucleus properties of Comet 67P/Churyumov Gerasimenko estimated from non-gravitational force modeling. *Icarus*, 176:453–477, August 2005. doi: 10.1016/j.icarus.2005.02.006.

- B. J. R. Davidsson y P. J. Gutiérrez. Non-gravitational force modeling of Comet 81P/Wild 2. I. A nucleus bulk density estimate. *Icarus*, 180:224–242, January 2006. doi: 10.1016/j.icarus.2005.07.023.
- B. J. R. Davidsson y Y. V. Skorov. On the Light-Absorbing Surface Layer of Cometary NucleiII. Thermal Modeling. *Icarus*, 159:239–258, September 2002. doi: 10.1006/icar.2002.6912.
- B. J. R. Davidsson, P. J. Gutiérrez, y H. Rickman. Nucleus properties of Comet 9P/Tempel 1 estimated from non-gravitational force modeling. *Icarus*, 187:306–320, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.07.022.
- B. J. R. Davidsson, P. J. Gutiérrez, y H. Rickman. Physical properties of morphological units on Comet 9P/Tempel 1 derived from near-IR Deep Impact spectra. *Icarus*, 201:335–357, May 2009. doi: 10.1016/j.icarus.2008.12.039.
- J. K. Davies, T. L. Roush, D. P. Cruikshank, M. J. Bartholomew, T. R. Geballe, T. Owen, y C. de Bergh. The Detection of Water Ice in Comet Hale-Bopp. *Icarus*, 127:238–245, May 1997. doi: 10.1006/icar.1996.5673.
- M. C. de Sanctis, F. Capaccioni, M. T. Capria, A. Coradini, C. Federico, R. Orosei, y M. Salomone. Models of P/Wirtanen nucleus: active regions versus non-active regions. *Planetary Space Science*, 47:855–872, June 1999.
- N. dello Russo, M. A. DiSanti, M. J. Mumma, K. Magee-Sauer, y T. W. Rettig. Carbonyl Sulfide in Comets C/1996 B2 (Hyakutake) and C/1995 O1 (Hale-Bopp): Evidence for an Extended Source in Hale-Bopp. *Icarus*, 135:377–388, October 1998. doi: 10.1006/icar.1998.5990.
- N. Dello Russo, M. J. Mumma, M. A. DiSanti, K. Magee-Sauer, R. Novak, y T. W. Rettig. Water Production and Release in Comet C/1995 O1 Hale-Bopp. *Icarus*, 143:324–337, February 2000. doi: 10.1006/icar.1999.6268.
- A. Delsemme. Vaporisation Theory and Non-Gravitational Forces in Comets. In *Symposium on the Origin of the Solar System*, page 305, 1972.
- A. H. Delsemme y P. Swings. Hydrates de gaz dans les noyaux cométaires et les grains interstellaires. *Annales d'Astrophysique*, 15:1, January 1952.
- S. J. Desch, J. C. Cook, T. C. Doggett, y S. B. Porter. Thermal evolution of Kuiper belt objects, with implications for cryovolcanism. *Icarus*, 202:694–714, August 2009. doi: 10.1016/j.icarus.2009.03.009.
- M. A. DiSanti, M. J. Mumma, N. Dello Russo, K. Magee-Sauer, R. Novak, y T. W. Rettig. Identification of two sources of carbon monoxide in comet Hale-Bopp. *Nature*, 399:662–665, June 1999. doi: 10.1038/21378.

- M. A. DiSanti, M. J. Mumma, N. Dello Russo, y K. Magee-Sauer. Carbon Monoxide Production and Excitation in Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp): Isolation of Native and Distributed CO Sources. *Icarus*, 153:361–390, October 2001. doi: 10.1006/icar.2001.6695.
- M. A. DiSanti, M. J. Mumma, N. Dello Russo, K. Magee-Sauer, y D. M. Griep. Evidence for a dominant native source of carbon monoxide in Comet C/1996 B2 (Hyakutake). *Journal of Geophysical Research (Planets)*, 108:5061, June 2003. doi: 10.1029/2002JE001961.
- J. S. Dohnanyi. Interplanetary objects in review: Statistics of their masses and dynamics. *Icarus*, 17:1–48, August 1972. doi: 10.1016/0019-1035(72)90044-9.
- L. Dones, P. R. Weissman, H. F. Levison, y M. J. Duncan. Oort cloud formation and dynamics. In M. C. Festou, H. U. Keller, y H. A. Weaver, editors, *Comets II*, pages 153–174, 2004.
- B. Donn. The origin and structure of icy cometary nuclei. *Icarus*, 2:396–402, 1963. doi: 10.1016/0019-1035(63)90068-X.
- B. Donn. The accumulation and structure of comets. In R. L. Newburn, Jr., M. Neugebauer, y J. Rahe, editors, *IAU Colloq. 116: Comets in the post-Halley era*, volume 167 of *Astrophysics and Space Science Library*, pages 335–359, 1991.
- B. Donn y H. C. Urey. On the Mechanism of Comet Outburst and the Chemical Composition of Comets. *Astrophysical Journal*, 123:339, March 1956. doi: 10.1086/146167.
- M. Drury. The measurement of thermal diffusivity of rock cores. *Tectonophysics*, 103:321–333, March 1984. doi: 10.1016/0040-1951(84)90094-5.
- P. Eberhardt. Comet Halley’s Gas Composition and Extended Sources: Results from the Neutral Mass Spectrometer on Giotto. *Space Science Reviews*, 90: 45–52, October 1999. doi: 10.1023/A:1005221309219.
- K. E. Edgeworth. The origin and evolution of the Solar System. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 109:600–609, 1949.
- P. Ehrenfreund y O. Botta. From Interstellar Matter to Comets: A Laboratory View. *Highlights of Astronomy*, 13:488, January 2005.
- P. Ehrenfreund, S. B. Charnley, y D. Wooden. From interstellar material to comet particles and molecules. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 115–133, 2004.
- E. W. Elst, O. Pizarro, C. Pollas, J. Ticha, M. Tichy, Z. Moravec, W. Offutt, y B. G. Marsden. Comet P/1996 N2 (Elst-Pizarro). *IAU Circulars*, 6456:1, August 1996.

- C. Emerich, J. M. Lamarre, V. I. Moroz, M. Combes, N. F. Sanko, Y. V. Nikolsky, F. Rocard, R. Gispert, N. Coron, J. P. Bibring, T. Encrenaz, y J. Crovisier. Temperature and Size of the Nucleus of Comet p/ Halley Deduced from IKS Infrared VEGA-1 Measurements. *Astronomy & Astrophysics*, 187:839, November 1987.
- T. Encrenaz. Water in the Solar System. *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*, 46:57–87, September 2008. doi: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145229.
- A. Enzian. On the Prediction of CO Outgassing from Comets Hale-Bopp and Wirtanen. *Space Science Reviews*, 90:131–139, October 1999. doi: 10.1023/A:1005293913762.
- A. Enzian, H. Cabot, y J. Klinger. A 2 1/2 D thermodynamic model of cometary nuclei. I. Application to the activity of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Astronomy & Astrophysics*, 319:995–1006, March 1997.
- S. Espinasse, J. Klinger, C. Ritz, y B. Schmidt. A method of estimating temperature profiles and chemical differentiation in the near surface layers of porous comet nuclei: First results for comet P/Churyumov-Gerasimenko. In J. J. Hunt y T. D. Guyenne, editors, *Physics and Mechanics of Cometary Materials*, volume 302 of *ESA Special Publication*, pages 185–190, December 1989.
- S. Espinasse, J. Klinger, C. Ritz, y B. Schmitt. Modeling of the thermal behavior and of the chemical differentiation of cometary nuclei. *Icarus*, 92:350–365, August 1991. doi: 10.1016/0019-1035(91)90058-2.
- M. Famá, M. J. Loeffler, U. Raut, y R. A. Baragiola. Radiation-induced amorphization of crystalline ice. *Icarus*, 207:314–319, May 2010. doi: 10.1016/j.icarus.2009.11.001.
- F. P. Fanale y J. R. Salvail. An idealized short-period comet model - Surface insolation, H<sub>2</sub>O flux, dust flux, and mantle evolution. *Icarus*, 60:476–511, December 1984. doi: 10.1016/0019-1035(84)90157-X.
- F. P. Fanale y J. R. Salvail. The influence of CO ice on the activity and the near-surface differentiation of comet nuclei. *Icarus*, 84:403–413, April 1990. doi: 10.1016/0019-1035(90)90046-C.
- T. L. Farnham y A. L. Cochran. A McDonald Observatory Study of Comet 19P/Borrelly: Placing the Deep Space 1 Observations into a Broader Context. *Icarus*, 160:398–418, December 2002. doi: 10.1006/icar.2002.6969.
- T. L. Farnham, D. D. Wellnitz, D. L. Hampton, J.-Y. Li, J. M. Sunshine, O. Groussin, L. A. McFadden, C. J. Crockett, M. F. A’Hearn, M. J. S. Belton, P. Schultz, y C. M. Lisse. Dust coma morphology in the Deep Im-

- pact images of Comet 9P/Tempel 1. *Icarus*, 187:26–40, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.10.036.
- P. D. Feldman y W. H. Brune. Carbon production in comet West 1975n. *The Astrophysical Journal, Letters*, 209:L45–L48, October 1976. doi: 10.1086/182263.
- J. A. Fernandez. On the existence of a comet belt beyond Neptune. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 192:481–491, August 1980.
- J. A. Fernández. Collisions of Comets with Meteoroids. In C. I. Lagerkvist, H. Rickman, y B. A. Lindblad, editors, *Asteroids, Comets, Meteors III*, page 309, 1990.
- YR Fernandez. The nucleus of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1): Size and activity. *EARTH MOON AND PLANETS*, 89(1-4):3–25, 2002. ISSN 0167-9295. IAU Colloquium No 186 on Cometary Science after Hale-Bopp, CANARY ISL, SPAIN, JAN 21-25, 2002.
- M. C. Festou. On the Existence of Distributed Sources in Comet Comae. *Space Science Reviews*, 90:53–67, October 1999. doi: 10.1023/A:1005225426057.
- M. C. Festou, H. Rickman, y R. M. West. Comets. I - Concepts and observations. *Astronomy & Astrophysics*, 4:363–447, April 1993. doi: 10.1007/BF00872944.
- M. C. Festou, M. Gunnarsson, H. Rickman, A. Winnberg, y G. Tancredi. The Activity of Comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1 Monitored through Its CO J=2–1 Radio Line. *Icarus*, 150:140–150, March 2001. doi: 10.1006/icar.2000.6553.
- M. C. Festou, H. U. Keller, y H. A. Weaver, editors. *Oort cloud formation and dynamics*. 2004.
- V. S. Filonenko y K. I. Churyumov. The Visual Brightness Behavior of Comet 9P/Tempel 1 During 1972-2005. In H. U. Käufel y C. Sterken, editors, *Deep Impact as a World Observatory Event: Synergies in Space, Time, and Wavelength*, page 73, 2009. doi: 10.1007/978-3-540-76959-0<sub>8</sub>.
- M. L. Finson y R. F. Probstein. A theory of dust comets. II. Results for Comet Arend-Roland. *The Astrophysical Journal*, 154:353–380, October 1968. doi: 10.1086/149762.
- K. R. Flammer, D. A. Mendis, y H. L. F. Houppis. On the Outgassing Profile of Comet Hale-Bopp. *The Astrophysical Journal*, 494:822, February 1998. doi: 10.1086/305237.
- G. J. Flynn, P. Bleuet, J. Borg, J. P. Bradley, F. E. Brenker, S. Brennan, J. Bridges, D. E. Brownlee, E. S. Bullock, M. Burghammer, B. C. Clark, Z. R. Dai, C. P. Daghljan, Z. Djouadi, S. Fakra, T. Ferroir, C. Floss, I. A. Franchi, Z. Gainsforth,



- J.-P. Gallien, P. Gillet, P. G. Grant, G. A. Graham, S. F. Green, F. Grossemy, P. R. Heck, G. F. Herzog, P. Hoppe, F. Hörz, J. Huth, K. Ignatyev, H. A. Ishii, K. Janssens, D. Joswiak, A. T. Kearsley, H. Khodja, A. Lanzirotti, J. Leitner, L. Lemelle, H. Leroux, K. Luening, G. J. MacPherson, K. K. Marhas, M. A. Marcus, G. Matrajt, T. Nakamura, K. Nakamura-Messenger, T. Nakano, M. Newville, D. A. Papanastassiou, P. Pianetta, W. Rao, C. Riekel, F. J. M. Rietmeijer, D. Rost, C. S. Schwandt, T. H. See, J. Sheffield-Parker, A. Simionovici, I. Sitnitsky, C. J. Snead, F. J. Stadermann, T. Stephan, R. M. Stroud, J. Susini, Y. Suzuki, S. R. Sutton, S. Taylor, N. Teslich, D. Troadec, P. Tsou, A. Tsuchiyama, K. Uesugi, B. Vekemans, E. P. Vicenzi, L. Vincze, A. J. Westphal, P. Wozniakiewicz, E. Zinner, y M. E. Zolensky. Elemental Compositions of Comet 81P/Wild 2 Samples Collected by Stardust. *Science*, 314:1731–, December 2006. doi: 10.1126/science.1136141.
- M. Fulle. A new approach to the Finson-Probst method of interpreting cometary dust tails. *Astronomy & Astrophysics*, 171:327–335, January 1987.
- M. Fulle. Dust from short-period Comet P/Schwassmann-Wachmann 1 and replenishment of the interplanetary dust cloud. , 359:42–44, September 1992. doi: 10.1038/359042a0.
- M. Fulle. Motion of cometary dust. In M. C. Festou, H. U. Keller, y H. A. Weaver, editors, *Comets II*, pages 565–575, 2004.
- M. Fulle, G. Cremonese, y C. Böhm. The Preperihelion Dust Environment of C/1995 O1 Hale-Bopp from 13 to 4 AU. *Astronomical Journal*, 116:1470–1477, September 1998. doi: 10.1086/300505.
- M. Fulle, A. C. Lvasseur-Regourd, N. McBride, y E. Hadamcik. In Situ Dust Measurements From within the Coma of 1P/Halley: First-Order Approximation with a Dust Dynamical Model. *Astronomical Journal*, 119:1968–1977, April 2000. doi: 10.1086/301285.
- M. Fulle, L. Colangeli, J. Agarwal, A. Aronica, V. Della Corte, F. Esposito, E. Grün, M. Ishiguro, R. Ligustri, J. J. Lopez Moreno, E. Mazzotta Epifani, G. Milani, F. Moreno, P. Palumbo, J. Rodríguez Gómez, y A. Rotundi. Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko: the GIADA dust environment model of the Rosetta mission target. *Astronomy & Astrophysics*, 522:A63, November 2010. doi: 10.1051/0004-6361/201014928.
- O. Gálvez, I. K. Ortega, B. Maté, M. A. Moreno, B. Martín-Llorente, V. J. Herrero, R. Escibano, y P. J. Gutiérrez. A study of the interaction of CO<sub>2</sub> with water ice. *Astronomy & Astrophysics*, 472:691–698, September 2007. doi: 10.1051/0004-6361:20077421.
- D. Gautier y F. Hersant. Formation and Composition of Planetesimals. *Space Science Reviews*, 116:25–52, January 2005. doi: 10.1007/s11214-005-1946-2.

- N. Giovambattista, H. Eugene Stanley, y F. Sciortino. Phase diagram of amorphous solid water: Low-density, high-density, and very-high-density amorphous ices. , 72(3):031510, September 2005. doi: 10.1103/PhysRevE.72.031510.
- M. González, P. J. Gutiérrez, L. M. Lara, y R. Rodrigo. Evolution of the crystallization front in cometary models. Effect of the net energy released during crystallization. *Astronomy & Astrophysics*, 486:331–340, July 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20077454.
- M. González, P. J. Gutiérrez, y L. M. Lara. Thermophysical Modelling of Comet Hale-Bopp. *LPI Contributions*, 1667:6167, May 2012.
- N. Gortsas, E. Kührt, U. Motschmann, y H. U. Keller. Thermal model of water and CO activity of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Icarus*, 212:858–866, April 2011. doi: 10.1016/j.icarus.2011.01.017.
- J. M. Greenberg. What are Comets Made of - Very Dirty Snowballs. In S. V. M. Clube y B. McInnes, editors, *Interstellar Comets Workshop*, page 24, April 1982.
- J. M. Greenberg. Making a comet nucleus. *Astronomy & Astrophysics*, 330:375–380, February 1998.
- R. J. A. Grim y J. M. Greenberg. Photoprocessing of H<sub>2</sub>S in interstellar grain mantles as an explanation for S<sub>2</sub> in comets. *Astronomy & Astrophysics*, 181:155–168, July 1987.
- P. Gronkowski. The source of energy of the comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1 outburst activity: the test of the summary. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 360:1153–1161, July 2005. doi: 10.1111/j.1365-2966.2005.09121.x.
- P. Gronkowski. The search for a cometary outbursts mechanism: a comparison of various theories. *Astronomische Nachrichten*, 328:126, February 2007. doi: 10.1002/asna.200610657.
- O. Groussin y P. Lamy. Activity on the surface of the nucleus of comet 46P/Wirtanen. *Astronomy & Astrophysics*, 412:879–891, December 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20031496.
- O. Groussin, M. F. A’Hearn, J.-Y. Li, P. C. Thomas, J. M. Sunshine, C. M. Lisse, K. J. Meech, T. L. Farnham, L. M. Feaga, y W. A. Delamere. Surface temperature of the nucleus of Comet 9P/Tempel 1. *Icarus*, 187:16–25, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.08.030.
- E. Grün, M. S. Hanner, S. B. Peschke, T. Müller, H. Boehnhardt, T. Y. Brooke, H. Campins, J. Crovisier, C. Delahodde, I. Heinrichsen, H. U. Keller, R. F. Knacke, H. Krüger, P. Lamy, C. Leinert, D. Lemke, C. M. Lisse, M. Müller, D. J. Osip, M. Solc, M. Stickel, M. Sykes, V. Vanysek, y J. Zarnecki. Broadband infrared photometry of comet Hale-Bopp with ISOPHOT. *Astronomy & Astrophysics*, 377:1098–1118, October 2001. doi: 10.1051/0004-6361:20011139.

- A. Guilbert-Lepoutre. Survival of Amorphous Water Ice on Centaurs. *The Astronomical Journal*, 144:97, October 2012. doi: 10.1088/0004-6256/144/4/97.
- M. Gunnarsson. Icy grains as a source of CO in comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Astronomy & Astrophysics*, 398:353–361, January 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20021610.
- M. Gunnarsson, H. Rickman, M. C. Festou, A. Winnberg, y G. Tancredi. An Extended CO Source around Comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Icarus*, 157:309–322, June 2002. doi: 10.1006/icar.2002.6839.
- M. Gunnarsson, D. Bockelée-Morvan, A. Winnberg, H. Rickman, J. Crovisier, N. Biver, P. Colom, J. K. Davies, D. Despois, F. Henry, L. E. B. Johansson, R. Moreno, G. Paubert, y F. T. Rantakyö. Production and kinematics of CO in comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) at large post-perihelion distances. *Astronomy & Astrophysics*, 402:383–393, April 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20030178.
- M. Gunnarsson, D. Bockelée-Morvan, N. Biver, J. Crovisier, y H. Rickman. Mapping the carbon monoxide coma of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Astronomy & Astrophysics*, 484:537–546, June 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20078069.
- P. J. Gutiérrez. *Modelo tridimensional de ncleos cometarios: Produccin de agua y evolucion del estado rotacional*. PhD thesis, Universidad de Granada, 2001.
- P. J. Gutiérrez, J. L. Ortiz, R. Rodrigo, y J. J. López-Moreno. A study of water production and temperatures of rotating irregularly shaped cometary nuclei. *Astronomy & Astrophysics*, 355:809–817, March 2000.
- M. S. Hanner. Comet Cernis - Icy grains at last? *The Astrophysical Journal, Letters*, 277:L75–L78, February 1984a. doi: 10.1086/184207.
- M. S. Hanner. A comparison of the dust properties in recent periodic comets. *Advances in Space Research*, 4:189–196, 1984b. doi: 10.1016/0273-1177(84)90025-5.
- M. S. Hanner. Stardust in Comets. In *American Astronomical Society Meeting Abstracts #206*, volume 37 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 471, May 2005.
- M. S. Hanner, J. A. Hackwell, R. W. Russell, y D. K. Lynch. Silicate emission feature in the spectrum of comet Mueller 1993a. *Icarus*, 112:490–495, December 1994. doi: 10.1006/icar.1994.1200.
- D. E. Harker, D. H. Wooden, C. E. Woodward, y C. M. Lisse. Grain Properties of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp). *The Astrophysical Journal*, 580:579–597, November 2002. doi: 10.1086/343091.
- J. K. Harmon, M. C. Nolan, S. J. Ostro, y D. B. Campbell. Radar studies of comet nuclei and grain comae. In M. C. Festou, H. U. Keller, y H. A. Weaver, editors, *Comets II*, pages 265–279, 2004.

- J. Helbert, H. Rauer, D. C. Boice, y W. F. Huebner. The chemistry of C<sub>2</sub> and C<sub>3</sub> in the coma of Comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) at heliocentric distances  $r_h \geq 2.9AU$ . *Astronomy & Astrophysics*, 442 : 1107 – 1120, November 2005. doi : 10.1051/0004 – 6361 : 20041571.
- G. Herman y M. Podolak. Numerical simulation of comet nuclei. I - Water-ice comets. *Icarus*, 61:252–277, February 1985. doi: 10.1016/0019-1035(85)90107-1.
- J. Horner y P. S. Lykawka. Planetary Trojans - the main source of short period comets? *International Journal of Astrobiology*, 9:227–234, October 2010. doi: 10.1017/S1473550410000212.
- J. Horner, N. W. Evans, M. E. Bailey, y D. J. Asher. The populations of comet-like bodies in the Solar system. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 343:1057–1066, August 2003. doi: 10.1046/j.1365-8711.2003.06714.x.
- H. L. F. Houppis, D. A. Mendis, y W.-H. Ip. The chemical differentiation of the cometary nucleus - The process and its consequences. *The Astrophysical Journal*, 295:654–667, August 1985. doi: 10.1086/163409.
- W. F. Huebner y J. Benkhoff. On the Relationship of Chemical Abundances in the Nucleus to Those in the Coma. *Earth Moon and Planets*, 77:217–222, May 1997. doi: 10.1023/A:1006299217208.
- W. F. Huebner, J. Benkhoff, M.-T. Capria, A. Coradini, C. de Sanctis, R. Orosei, y D. Prialnik, editors. *Heat and Gas Diffusion in Comet Nuclei*, June 2006.
- D. W. Hughes. Cometary outbursts - A review. , 31:69–94, March 1990.
- N. Iro, D. Gautier, F. Hersant, D. Bockelée-Morvan, y J. I. Lunine. An interpretation of the nitrogen deficiency in comets. *Icarus*, 161:511–532, February 2003. doi: 10.1016/S0019-1035(02)00038-6.
- P. Jenniskens y D. F. Blake. Structural Transitions in Amorphous Water Ice and Astrophysical Implications. *Science*, 265:753–756, August 1994. doi: 10.1126/science.11539186.
- E. K. Jessberger, A. Christoforidis, y J. Kissel. Aspects of the major element composition of Halley’s dust. *Nature*, 332:691–695, April 1988. doi: 10.1038/332691a0.
- D. Jewitt. The persistent coma of Comet P/Schwassmann-Wachmann 1. *The Astrophysical Journal*, 351:277–286, March 1990. doi: 10.1086/168463.
- D. Jewitt. The Active Centaurs. , 137:4296–4312, May 2009. doi: 10.1088/0004-6256/137/5/4296.
- D. Jewitt. Icy Bodies in the New Solar System. In J. A. Fernández, D. Lazzaro, D. Prialnik, y R. Schulz, editors, *IAU Symposium*, volume 263 of *IAU Symposium*, pages 3–16, 2010. doi: 10.1017/S1743921310001420.

- D. Jewitt y P. Kalas. Thermal Observations of Centaur 1997 CU26. , 499:L103, May 1998. doi: 10.1086/311356.
- D. Jewitt y J. Luu. Discovery of the candidate Kuiper belt object 1992 QB1. *Nature*, 362:730–732, April 1993. doi: 10.1038/362730a0.
- D. Jewitt y H. Matthews. Particulate Mass Loss from Comet Hale-Bopp. *The Astronomical Journal*, 117:1056–1062, February 1999. doi: 10.1086/300743.
- D. C. Jewitt y J. Luu. Crystalline water ice on the Kuiper belt object (50000) Quaoar. *Nature*, 432:731–733, December 2004. doi: 10.1038/nature03111.
- L. Jorda, K. Rembor, J. Lecacheux, P. Colom, F. Colas, E. Frappa, y L. M. Lara. The Rotational Parameters Of Hale-Bopp (C/1995 O1) From Observations Of The Dust Jets At PIC DU Midi Observatory. *Earth Moon and Planets*, 77:167–180, May 1997. doi: 10.1023/A:1006234813574.
- S. M. Jorda. *The chemical and physical properties of the hydroxide, cyanide and carbon jets in comet Hale-Bopp (1995 O1)*. PhD thesis, University of Florida, 1995.
- P. G. Kamoun, D. B. Campbell, S. J. Ostro, G. H. Pettengill, y I. I. Shapiro. Comet Encke - Radar detection of nucleus. *Science*, 216:293–295, April 1982. doi: 10.1126/science.216.4543.293.
- H. Kawakita, J.-i. Watanabe, T. Ootsubo, R. Nakamura, T. Fuse, N. Takato, S. Sasaki, y T. Sasaki. Evidence of Icy Grains in Comet C/2002 T7 (LINEAR) at 3.52 AU. *The Astrophysical Journal, Letters*, 601:L191–L194, February 2004. doi: 10.1086/382073.
- H. Kawakita, N. Dello Russo, R. Furusho, T. Fuse, J.-i. Watanabe, D. C. Boice, K. Sadakane, N. Arimoto, M. Ohkubo, y T. Ohnishi. Ortho-to-Para Ratios of Water and Ammonia in Comet C/2001 Q4 (NEAT): Comparison of Nuclear Spin Temperatures of Water, Ammonia, and Methane. *The Astrophysical Journal*, 643: 1337–1344, June 2006. doi: 10.1086/503185.
- H. U. Keller, C. Arpigny, C. Barbieri, R. M. Bonnet, S. Cazes, M. Coradini, C. B. Cosmovici, W. A. Delamere, W. F. Huebner, D. W. Hughes, C. Jamar, D. Malaise, H. J. Reitsema, H. U. Schmidt, W. K. H. Schmidt, P. Seige, F. L. Whipple, y K. Wilhelm. First Halley multicolour camera imaging results from Giotto. *Nature*, 321:320–326, May 1986. doi: 10.1038/321320a0.
- H. U. Keller, W. A. Delamere, H. J. Reitsema, W. F. Huebner, y H. U. Schmidt. Comet P/Halley's nucleus and its activity. *Astronomy & Astrophysics*, 187:807–823, November 1987.
- H. U. Keller, D. Britt, B. J. Buratti, y N. Thomas. In situ observations of cometary nuclei. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 211–222, 2004.

- H. U. Keller, C. Barbieri, P. Lamy, H. Rickman, R. Rodrigo, K.-P. Wenzel, H. Sierks, M. F. A'Hearn, F. Angrilli, M. Angulo, M. E. Bailey, P. Barthol, M. A. Barucci, J.-L. Bertaux, G. Bianchini, J.-L. Boit, V. Brown, J. A. Burns, I. Büttner, J. M. Castro, G. Cremonese, W. Curdt, V. da Deppo, S. Debei, M. de Cecco, K. Dohlen, S. Fornasier, M. Fulle, D. Germerott, F. Gliem, G. P. Guizzo, S. F. Hviid, W.-H. Ip, L. Jorda, D. Koschny, J. R. Kramm, E. Kührt, M. Küppers, L. M. Lara, A. Llebaria, A. López, A. López-Jimenez, J. López-Moreno, R. Meller, H. Michalik, M. D. Michelena, R. Müller, G. Naletto, A. Origné, G. Parzianello, M. Pertile, C. Quintana, R. Ragazzoni, P. Ramous, K.-U. Reiche, M. Reina, J. Rodríguez, G. Rousset, L. Sabau, A. Sanz, J.-P. Sivan, K. Stöckner, J. Tabero, U. Telljohann, N. Thomas, V. Timon, G. Tomasch, T. Wittrock, y M. Zaccariotto. OSIRIS The Scientific Camera System Onboard Rosetta. *Space Science Reviews*, 128:433–506, February 2007. doi: 10.1007/s11214-006-9128-4.
- T. Keller y T. Spohn. Theoretical aspects and interpretation of thermal measurements concerning the subsurface investigation of a cometary nucleus. *Planetary & Space Science*, 50:929–937, August 2002. doi: 10.1016/S0032-0633(02)00068-5.
- M. R. Kidger. Dust Activity in Comet Hale-Bopp. *Earth Moon and Planets*, 79: 79–102, September 1997. doi: 10.1023/A:1006277015025.
- J. Klinger. Influence of a phase transition of ice on the heat and mass balance of comets. *Science*, 209:634–641, August 1980.
- J. Klinger. Some consequences of a phase transition of water ice on the heat balance of comet nuclei. *Icarus*, 47:320–324, September 1981. doi: 10.1016/0019-1035(81)90179-2.
- J. Klinger, A.-C. Levasseur-Regourd, N. Bouziani, y A. Enzian. Towards a model of cometary nuclei for engineering studies for future space missions to comets. *Planetary Space Science*, 44:637–653, July 1996. doi: 10.1016/0032-0633(96)00067-0.
- L. Kolokolova, L. Lara, R. Schultz, J. Stuewe, y G.-P. Tozzi. Color of an ensemble of particles with a wide power-law size distribution: application to observations of Comet Hale-Bopp at 3 AU. , 79:861, 2003. doi: 10.1016/S0022-4073(02)00324-2.
- P. P. Korsun, O. V. Ivanova, y V. L. Afanasiev. C/2002 VQ94 (LINEAR) and 29P/Schwassmann Wachmann 1 CO<sup>+</sup> and N<sub>2</sub><sup>+</sup> rich comets. *Icarus*, 198:465–471, December 2008. doi: 10.1016/j.icarus.2008.08.010.
- K. J. Kossacki y S. Szutowicz. Comet 9P/Tempel 1: Sublimation beneath the dust cover. *Icarus*, 195:705–724, June 2008. doi: 10.1016/j.icarus.2007.12.014.
- K. J. Kossacki, S. L. Szutowicz, y J. Leliwa-Kopystyński. Comet 46P/Wirtanen: Evolution of the Subsurface Layer. *Icarus*, 142:202–218, November 1999. doi: 10.1006/icar.1999.6196.

- A. Kouchi y S.-i. Sirono. Crystallization heat of impure amorphous H<sub>2</sub>O ice. *Geophysics Research Letters*, 28:827–830, March 2001. doi: 10.1029/2000GL011350.
- A. Kouchi, J. M. Greenberg, T. Yamamoto, y T. Mukai. Extremely low thermal conductivity of amorphous ice - Relevance to comet evolution. *The Astrophysical Journal, Letters*, 388:L73–L76, April 1992. doi: 10.1086/186333.
- Y.-J. Kuan, M.-L. Pen, H.-C. Huang, J. M. Veal, y L. M. Woodney. An Interferometric Study of CO and CS in Comet Hale-Bopp (C/1995O1). In R. Norris & F. Stootman, editor, *Bioastronomy 2002: Life Among the Stars*, volume 213 of *IAU Symposium*, page 189, June 2004.
- E. Kührt. H<sub>2</sub>O-Activity of Comet Hale-Bopp. , 90:75–82, October 1999. doi: 10.1023/A:1005229526966.
- E. Kührt. From Hale Bopp's Activity to Properties of its Nucleus. *Earth Moon and Planets*, 90:61–65, June 2002. doi: 10.1023/A:1021560200906.
- E. Kührt y H. U. Keller. The formation of cometary surface crusts. *Icarus*, 109: 121–132, May 1994. doi: 10.1006/icar.1994.1080.
- G. P. Kuiper. On the Origin of the Solar System. In J. A. Hynek, editor, *50th Anniversary of the Yerkes Observatory and Half a Century of Progress in Astrophysics*, page 357, 1951.
- M. Küppers, I. Bertini, S. Fornasier, P. J. Gutierrez, S. F. Hviid, L. Jorda, H. U. Keller, J. Knollenberg, D. Koschny, R. Kramm, L.-M. Lara, H. Sierks, N. Thomas, C. Barbieri, P. Lamy, H. Rickman, R. Rodrigo, M. F. A'Hearn, F. Angrilli, M. Bailey, P. Barthol, M. A. Barucci, J.-L. Bertaux, J. A. Burns, G. Cremonese, W. Curdt, M. De Cecco, S. Debei, M. Fulle, F. Gliem, W. H. Ip, E. Huhrt, A. Llebaria, J. J. Lopez Moreno, F. Marzari, G. Naletto, L. Sabau, A. Sanz Andres, J. P. Sivan, G. Tondello, y K.-P. Wenzel. A large dust/ice ratio in the nucleus of comet 9P/Tempel 1. *Nature*, 437:987–990, October 2005. doi: 10.1038/nature04236.
- P. L. Lamy, I. Toth, H. Weaver, L. Jorda, y M. Kaasalainen. The Nucleus of Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko, the New Target of the Rosetta Mission. In *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts #35*, volume 35 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 970, May 2003.
- P. L. Lamy, I. Toth, B. J. R. Davidsson, O. Groussin, P. Gutiérrez, L. Jorda, M. Kaasalainen, y S. C. Lowry. A Portrait of the Nucleus of Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Space Science Reviews*, 128:23–66, February 2007. doi: 10.1007/s11214-007-9146-x.
- J. Lasue, M. C. de Sanctis, A. Coradini, G. Magni, M. T. Capria, D. Turrini, y A. C. Levasseur-Regourd. Quasi-3-D model to describe topographic effects on non-spherical comet nucleus evolution. *Planetary Space Science*, 56:1977–1991, December 2008. doi: 10.1016/j.pss.2008.08.020.

- J. Lasue, A. C. Levasseur-Regourd, E. Hadamcik, y G. Alcouffe. Cometary dust properties retrieved from polarization observations: Application to C/1995 O1 Hale Bopp and 1P/Halley. *Icarus*, 199:129–144, January 2009. doi: 10.1016/j.icarus.2008.09.008.
- S. M. Lederer, H. Campins, D. J. Osip, y D. G. Schleicher. Gaseous Jets in Comet Hale-Bopp (1995 O1). *Earth Moon and Planets*, 78:131–136, July 1997. doi: 10.1023/A:1006280908373.
- E. Lellouch, J. Crovisier, T. Lim, D. Bockelee-Morvan, K. Leech, M. S. Hanner, B. Altieri, B. Schmitt, F. Trotta, y H. U. Keller. Evidence for water ice and estimate of dust production rate in comet Hale-Bopp at 2.9 AU from the Sun. *Astronomy & Astrophysics*, 339:L9–L12, November 1998.
- G. Leto, O. Gomis, y G. Strazzulla. The reflectance spectrum of water ice: Is the 1.65  $\mu\text{m}$  peak a good temperature probe?. *Memorie della Societa Astronomica Italiana Supplementi*, 6:57, 2005.
- J. S. Lewis. *Physics and chemistry of the solar system*. 1995.
- J.-Y. Li, M. F. A’Hearn, M. J. S. Belton, C. J. Crockett, T. L. Farnham, C. M. Lisse, L. A. McFadden, K. J. Meech, J. M. Sunshine, P. C. Thomas, y J. Veverka. Deep Impact photometry of Comet 9P/Tempel 1. *Icarus*, 187:41–55, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.09.018.
- J. Licandro, L. R. Bellot Rubio, R. Casas, A. Gómez, M. R. Kidger, N. Sabalisk, P. Santos-Sanz, M. Serra-Ricart, R. Torres-Chico, A. Oscoz, L. Jorda, y G. Denicolo. The Spin Axis Position of C/1995 O1 (Hale-Bopp). *Earth Moon and Planets*, 77:199–206, May 1997. doi: 10.1023/A:1006291015391.
- J. Licandro, L. R. Bellot Rubio, H. Boehnhardt, R. Casas, B. Goetz, A. Gomez, L. Jorda, M. R. Kidger, D. Osip, N. Sabalisk, P. Santos, M. Serr-Ricart, G. P. Tozzi, y R. West. The Rotation Period of C/1995 O1 (Hale-Bopp). *The Astrophysical Journal, Letters*, 501:L221, July 1998. doi: 10.1086/311465.
- J. Licandro, H. Campins, G. P. Tozzi, J. de León, N. Pinilla-Alonso, H. Boehnhardt, y O. R. Hainaut. Testing the comet nature of main belt comets. The spectra of 133P/Elst-Pizarro and 176P/LINEAR. *Astronomy & Astrophysics*, 532:A65, August 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201117018.
- D. C. Lis, J. Keene, K. Young, T. G. Phillips, D. Bockelee-Morvan, J. Crovisier, P. Schilke, P. F. Goldsmith, y E. A. Bergin. Spectroscopic Observations of Comet C/1996 B2 (Hyakutake) with the Caltech Submillimeter Observatory. *Icarus*, 130: 355–372, December 1997. doi: 10.1006/icar.1997.5833.
- J. I. Lunine. Origin of Water Ice in the Solar System. In Lauretta, D. S. & McSween, H. Y., editor, *Meteorites and the Early Solar System II*, pages 309–319, 2006.



- J. T. T. Mäkinen, J.-L. Bertaux, M. R. Combi, y E. Quémerais. Water Production of Comet C/1999 S4 (LINEAR) Observed with the SWAN Instrument. *Science*, 292:1326–1329, May 2001. doi: 10.1126/science.1060858.
- C Manca, C Martin, A Allouche, y P Roubin. Experimental and theoretical reinvestigation of CO adsorption on amorphous ice. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, 105(51):12861–12869, DEC 27 2001. ISSN 1520-6106. doi: 10.1021/jp013100f.
- U. Marboeuf, O. Mousis, J.-M. Petit, B. Schmitt, A. L. Cochran, y H. A. Weaver. On the stability of clathrate hydrates in comets 67P/Churyumov-Gerasimenko and 46P/Wirtanen. *Astronomy & Astrophysics*, 525:A144, January 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201015438.
- U. Marboeuf, B. Schmitt, J.-M. Petit, O. Mousis, y N. Fray. A cometary nucleus model taking into account all phase changes of water ice: amorphous, crystalline, and clathrate. *Astronomy & Astrophysics*, 542:A82, June 2012. doi: 10.1051/0004-6361/201118176.
- B. G. Marsden. Comets and Nongravitational Forces. II. *Astronomical Journal*, 74: 720, June 1969. doi: 10.1086/110848.
- B. G. Marsden. IAU Circular 6224. 1995.
- B. G. Marsden, Z. Sekanina, y E. Everhart. New osculating orbits for 110 comets and analysis of original orbits for 200 comets. *The Astronomical Journal*, 83:64–71, January 1978. doi: 10.1086/112177.
- R. M. E. Mastrapa y R. H. Brown. Ion irradiation of crystalline H<sub>2</sub>O ice: Effect on the 1.65- $\mu$ m band. *Icarus*, 183:207–214, July 2006. doi: 10.1016/j.icarus.2006.02.006.
- J. Matzel, H. A. Ishii, D. Joswiak, I. Hutcheon, J. Bradley, D. Brownlee, P. Weber, E. Ramon, J. I. Simon, N. Teslich, G. Matrajt, K. D. McKeegan, y G. MacPherson. Mg Isotope Measurements of a Stardust CAI: No Evidence of <sup>26</sup>Al. *Meteoritics and Planetary Science Supplement*, 72:5373, September 2009.
- E. P. Mazets, R. Z. Sagdeev, R. L. Aptekar, S. V. Golenetskii, Y. A. Guryan, A. V. Dyachkov, V. N. Ilyinskii, V. N. Panov, G. G. Petrov, A. V. Savvin, I. A. Sokolov, D. D. Frederiks, N. G. Khavenson, V. D. Shapiro, y V. I. Shevchenko. Dust in Comet p/ Halley from VEGA Observations. *Astronomy & Astrophysics*, 187:699, November 1987.
- D. W. McCarthy, S. R. Stolovy, H. Campins, S. Larson, N. H. Samarasinha, y S. D. Kern. Comet Hale Bopp in outburst: Imaging the dynamics of icy particles with HST/NICMOS. *Icarus*, 189:184–195, July 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2007.01.019.
- J. A. M. McDonnell, G. C. Evans, S. T. Evans, W. M. Alexander, W. M. Burton, J. G. Firth, E. Bussoletti, R. J. L. Grard, M. S. Hanner, y Z. Sekanina. The

- dust distribution within the inner coma of comet P/Halley 1982i - Encounter by Giotto's impact detectors. *Astronomy & Astrophysics*, 187:719–741, November 1987.
- K. J. Meech y J. Svoren. Using cometary activity to trace the physical and chemical evolution of cometary nuclei. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 317–335, 2004.
- K. J. Meech, M. J. S. Belton, B. E. A. Mueller, M. W. Dicksion, y H. R. Li. Nucleus properties of P/Schwassmann-Wachmann 1. *The Astronomical Journal*, 106:1222–1236, September 1993. doi: 10.1086/116721.
- K. J. Meech, J. Pittichová, A. Bar-Nun, G. Notesco, D. Laufer, O. R. Hainaut, S. C. Lowry, D. K. Yeomans, y M. Pitts. Activity of comets at large heliocentric distances pre-perihelion. *Icarus*, 201:719–739, June 2009. doi: 10.1016/j.icarus.2008.12.045.
- R. Meier, P. Eberhardt, D. Krankowsky, y R. R. Hodges. The extended formaldehyde source in comet P/Halley. *Astronomy & Astrophysics*, 277:677, October 1993.
- D. A. Mendis y G. D. Brin. Monochromatic brightness variations of comets. II - Core-mantle model. *Moon*, 17:359–372, December 1977. doi: 10.1007/BF00562645.
- R. Merk y D. Prialnik. Early Thermal and Structural Evolution of Small Bodies in the Trans-Neptunian Zone. *Earth Moon and Planets*, 92:359–374, June 2003. doi: 10.1023/B:MOON.0000031952.89891.a4.
- R. Merk y D. Prialnik. Combined modeling of thermal evolution and accretion of trans-neptunian objects Occurrence of high temperatures and liquid water. *Icarus*, 183:283–295, August 2006. doi: 10.1016/j.icarus.2006.02.011.
- R. Miles. A novel mechanism for outbursts of Comet 17P/Holmes and other short-period comets. *ArXiv e-prints*, December 2007.
- M. Min, J. W. Hovenier, A. de Koter, L. B. F. M. Waters, y C. Dominik. The composition and size distribution of the dust in the coma of Comet Hale Bopp. *Icarus*, 179:158–173, December 2005. doi: 10.1016/j.icarus.2005.05.015.
- M. H. Moore, R. F. Ferrante, R. L. Hudson, J. A. Nuth, III, y B. Donn. Infrared spectra of crystalline phase ices condensed on silicate smokes at T less than 20 K. *The Astrophysical Journal, Letters*, 428:L81–L84, June 1994. doi: 10.1086/187398.
- F. Moreno. The Dust Environment of Comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1 From Dust Tail Modeling of 2004 Near-Perihelion Observations. *The Astrophysical Journals*, 183:33–45, July 2009. doi: 10.1088/0067-0049/183/1/33.
- F. Moreno, L. M. Lara, O. Muñoz, J. J. López-Moreno, y A. Molina. Dust in Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Astrophysical Journal*, 613:1263–1269, October 2004. doi: 10.1086/423268.

- F. Moreno, J. Licandro, J. L. Ortiz, L. M. Lara, V. Alí-Lagoa, O. Vaduvescu, N. Morales, A. Molina, y Z.-Y. Lin. (596) Scheila in Outburst: A Probable Collision Event in the Main Asteroid Belt. *The Astrophysical Journal*, 738:130, September 2011. doi: 10.1088/0004-637X/738/2/130.
- M. J. Mumma y S. B. Charnley. The Chemical Composition of Comets Emerging Taxonomies and Natal Heritage. *Annual Review of Astronomy & Astrophysics*, 49:471–524, September 2011. doi: 10.1146/annurev-astro-081309-130811.
- G. Natesco y A. Bar-Nun. A 25 K temperature of formation for the submicron ice grains which formed comets. *Icarus*, 175:546–550, June 2005. doi: 10.1016/j.icarus.2004.12.001.
- G. Natesco, A. Bar-Nun, y T. Owen. Gas trapping in water ice at very low deposition rates and implications for comets. *Icarus*, 162:183–189, March 2003. doi: 10.1016/S0019-1035(02)00059-3.
- J. H. Oort. The structure of the cloud of comets surrounding the Solar System and a hypothesis concerning its origin. , 11:91–110, January 1950.
- T. Ootsubo, H. Kawakita, S. Hamada, H. Kobayashi, M. Yamaguchi, F. Usui, T. Nakagawa, M. Ueno, M. Ishiguro, T. Sekiguchi, J.-i. Watanabe, I. Sakon, T. Shimonishi, y T. Onaka. AKARI Near-infrared Spectroscopic Survey for CO<sub>2</sub> in 18 Comets. *The Astrophysical Journal*, 752:15, June 2012. doi: 10.1088/0004-637X/752/1/15.
- E. J. Öpic. Note on Stellar Perturbations of Nearby Parabolic Orbits. In *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences*, volume 67 of *Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences*, pages 169–182, 1932.
- R. Orosei, F. Capaccioni, M. T. Capria, A. Coradini, S. Espinasse, C. Federico, M. Salomone, y G. H. Schwehm. Gas and dust emission from a dusty porous comet. *Astronomy & Astrophysics*, 301:613, September 1995.
- L. Paganini, M. J. Mumma, G. L. Villanueva, M. A. DiSanti, B. P. Bonev, M. Lippi, y H. Boehnhardt. The Chemical Composition of CO-rich Comet C/2009 P1 (Garradd) AT  $R_h = 2.4$  and 2.0 AU before Perihelion. *The Astrophysical Journal, Letters*, 748:L13, March 2012. doi: 10.1088/2041-8205/748/1/L13.
- D. A. Paige, S. E. Wood, y A. R. Vasavada. The thermal stability of water ice at the poles of Mercury. *Science*, 258:643–646, October 1992. doi: 10.1126/science.258.5082.643.
- M. D. Paton, G. Kargl, A. J. Ball, S. F. Green, A. Hagermann, N. I. Kömle, M. Thiel, y J. C. Zarnecki. Computer modelling of a penetrator thermal sensor. *Advances in Space Research*, 46:337–345, August 2010. doi: 10.1016/j.asr.2010.03.007.

- S. J. Peale. On the density of Halley's comet. *Icarus*, 82:36–49, November 1989. doi: 10.1016/0019-1035(89)90021-3.
- S. B. Porter, S. J. Desch, y J. C. Cook. Micrometeorite Annealing of Outer Planet Icy Satellite Surfaces. In *Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts*, volume 39 of *Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts*, page 2102, March 2008.
- D. Prialnik. Crystallization, sublimation, and gas release in the interior of a porous comet nucleus. *The Astrophysical Journal*, 388:196–202, March 1992. doi: 10.1086/171143.
- D. Prialnik. A Model for the Distant Activity of Comet Hale-Bopp. *Astrophysical Journal*, 478:L107, April 1997a. doi: 10.1086/310561.
- D. Prialnik. Modelling Gas and Dust Release from Comet Hale-Bopp. *Earth Moon and Planets*, 77:223–230, May 1997b. doi: 10.1023/A:1006224000795.
- D. Prialnik y A. Bar-Nun. Gas release in comet nuclei. *The Astrophysical Journal*, 363:274–282, November 1990. doi: 10.1086/169339.
- D. Prialnik y A. Bar-Nun. Crystallization of amorphous ice as the cause of Comet P/Halley's outburst at 14 AU. *Astronomy & Astrophysics*, 258:L9–L12, May 1992.
- D. Prialnik y E. D. Rosenberg. Can ice survive in main-belt comets? Long-term evolution models of comet 133P/Elst-Pizarro. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 399:L79–L83, October 2009. doi: 10.1111/j.1745-3933.2009.00727.x.
- D. Prialnik, A. Bar-Nun, y M. Podolak. Radiogenic heating of comets by Al-26 and implications for their time of formation. *The Astrophysical Journal*, 319:993–1002, August 1987. doi: 10.1086/165516.
- D. Prialnik, J. Benkhoff, y M. Podolak. Modeling the structure and activity of comet nuclei. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 359–387, 2004.
- D. Prialnik, M. F. A'Hearn, y K. J. Meech. A mechanism for short-lived cometary outbursts at sunrise as observed by Deep Impact on 9P/Tempel 1. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 388:L20–L23, July 2008. doi: 10.1111/j.1745-3933.2008.00491.x.
- D. Prialnik, G. Sarid, E. D. Rosenberg, y R. Merk. Thermal and Chemical Evolution of Comet Nuclei and Kuiper Belt Objects. In Balsiger, H., Altwegg, K., Huebner, W., Owen, T., & Schulz, R., editor, *Origin and Early Evolution of Comet Nuclei*, page 147, 2009. doi: 10.1007/978-0-387-85455-7\_9.

- D. Prialnik, G. Sarid, y K. J. Meech. Survival of ice in Main Belt Comets. In *AAS/Division for Planetary Sciences Meeting Abstracts 42*, volume 42 of *Bulletin of the American Astronomical Society*, page 959, October 2010.
- Louise M. Prockter. Ice in the solar system. *JOHNS HOPKINS APL TECHNICAL DIGEST*, 26(2):175–188, 2005. ISSN 0270-5214.
- H. Rauer, C. Arpigny, H. Boehnhardt, F. Colas, J. Crovisier, L. Jorda, M. Küppers, J. Manfroid, K. Rembor, y N. Thomas. Optical observations of comet Hale-Bopp (C/1995 O1) at large heliocentric distances before perihelion. *Science*, 275:1909–1912, March 1997. doi: 10.1126/science.275.5308.1909.
- J. E. Richardson y H. J. Melosh. Modeling the Ballistic Behavior of Solid Ejecta from the Deep Impact Cratering Event. In S. Mackwell & E. Stansbery, editor, *37th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, volume 37 of *Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts*, page 1836, March 2006.
- N. Richter. Helligkeitsschwankungen der Kometen und Sonnentätigkeit. I Erster Schwassmann-Wachmannscher Komet (1925 II). *Astronomische Nachrichten*, 271: 207, 1941.
- E. Roemer. An Outburst of Comet Schwassmann-Wachmann 1. *Publicatios of the Astronomical Society of the Pacific*, 70:272, June 1958. doi: 10.1086/127223.
- E. D. Rosenberg y D. Prialnik. The effect of internal inhomogeneity on the activity of comet nuclei - Application to Comet 67P/Churyumov-Gerasimenko. *Icarus*, 209:753–765, October 2010. doi: 10.1016/j.icarus.2010.03.037.
- R. Z. Sagdeev, P. E. Elyasberg, y V. I. Moroz. Is the nucleus of Comet Halley a low density body? *Nature*, 331:240–242, January 1988. doi: 10.1038/331240a0.
- R. Z. Sagdeev, E. N. Evlanov, M. N. Fomenkova, O. F. Prilutskii, y B. V. Zubkov. Small-size dust particles near Halley’s Comet. *Advances in Space Research*, 9: 263–267, 1989. doi: 10.1016/0273-1177(89)90272-X.
- M.C. De Sanctis, M.T. Capria, y A. Coradini. Models of p/borrelly: Activity and dust mantle formation. *Advances in Space Research*, 31(12):2519 – 2525, 2003. ISSN 0273-1177. doi: 10.1016/S0273-1177(03)00573-8. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0273117703005738>.  
 ;ce:title; Interpretation of the Remote and In-Situ Observations of Small Bodies; /ce:title;.
- S. A. Sandford y L. J. Allamandola. The physical and infrared spectral properties of CO<sub>2</sub> in astrophysical ice analogs. *The Astrophysical Journal*, 355:357–372, May 1990. doi: 10.1086/168770.
- G. C. Sanzovo, P. D. Singh, y W. F. Huebner. Dust colors, dust release rates, and dust-to-gas ratios in the comae of six comets. *Astronomy & Astrophysicss*, 120: 301–311, December 1996.

- D. G. Schleicher y A. N. Bair. Compositional Taxonomy of Comets and the Unique Cases of 96P/Machholz 1 and 73P/Schwassmann-Wachmann 3. *LPI Contributions*, 1405:8174, 2008.
- D. G. Schleicher, S. M. Lederer, R. L. Millis, y T. L. Farnham. Photometric behavior of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1) before perihelion. *Science*, 275:1913–1915, March 1997. doi: 10.1126/science.275.5308.1913.
- B. Schmitt, S. Espinasse, R. J. A. Grim, J. M. Greenberg, y J. Klinger. Laboratory studies of cometary ice analogues. In J. J. Hunt & T. D. Guyenne, editor, *Physics and Mechanics of Cometary Materials*, volume 302 of *ESA Special Publication*, pages 65–69, December 1989.
- B. Schmitt, S. Espinasse, y J. Klinger. A possible mechanism for outbursts of comet P/Halley at large heliocentric distances. *Meteoritics*, 26:392, December 1991.
- W. A. Schutte. Probing the nature of grain surface- and photo-chemistry by laboratory simulation. *Highlights of Astronomy*, 12:61–64, 2002.
- Z. Sekanina. Gas and dust emission from comets and life spans of active areas on their rotating nuclei. *The Astronomical Journal*, 100:1293–1314, October 1990. doi: 10.1086/115598.
- Z. Sekanina. A Determination of The Nuclear Size of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1). *Earth Moon and Planets*, 77:147–153, May 1997. doi: 10.1023/A:1006270428595.
- Z. Sekanina. Modeling Dust Halos in Comet Hale-Bopp (1995 O1): Existence of Two Active Nuclei Unequivocally Implied. *The Astrophysical Journal, Letters*, 509:L133–L136, December 1998. doi: 10.1086/311774.
- M. C. Senay y D. Jewitt. Coma formation driven by carbon monoxide release from comet Schwassmann-Wachmann 1. *Nature*, 371:229–231, September 1994. doi: 10.1038/371229a0.
- Y. Shinnaka, H. Kawakita, H. Kobayashi, E. Jehin, J. Manfroid, D. Hutsemékers, y C. Arpigny. Ortho-to-para Abundance Ratio (OPR) of Ammonia in 15 Comets: OPRs of Ammonia Versus  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  Ratios in CN. *The Astrophysical Journal*, 729: 81, March 2011. doi: 10.1088/0004-637X/729/2/81.
- P. D. Singh, A. A. de Almeida, y W. F. Huebner. Dust release rates and dust-to-gas mass ratios of eight comets. *The Astronomical Journal*, 104:848–858, August 1992. doi: 10.1086/116279.
- S. Sirono y T. Yamamoto. Internal evolution of an icy planetesimal: the evolution of the temperature, chemical composition and mechanical properties. *Advances in Space Research*, 23:1299–1308, 1999. doi: 10.1016/S0273-1177(99)00041-1.

- S.-i. Sirono y J. M. Greenberg. Do Cometesimal Collisions Lead to Bound Rubble Piles or to Aggregates Held Together by Gravity? *Icarus*, 145:230–238, May 2000. doi: 10.1006/icar.2000.6337.
- Y. Skorov y J. Blum. Dust release and tensile strength of the non-volatile layer of cometary nuclei. *Icarus*, 221:1–11, September 2012. doi: 10.1016/j.icarus.2012.01.012.
- Y. V. Skorov y H. Rickman. Gas flow and dust acceleration in a cometary Knudsen layer. *Planetary Space Science*, 47:935–949, August 1999. doi: 10.1016/S0032-0633(99)00008-2.
- M. A. Slade, B. J. Butler, y D. O. Muhleman. Mercury radar imaging - Evidence for polar ice. *Science*, 258:635–640, October 1992. doi: 10.1126/science.258.5082.635.
- R. Smoluchowski. Amorphous ice and the behavior of cometary nuclei. *The Astronomical Journal, Letters*, 244:L31–L34, February 1981. doi: 10.1086/183473.
- L. A. Soderblom, D. T. Britt, R. H. Brown, B. J. Buratti, R. L. Kirk, T. C. Owen, y R. V. Yelle. Short-wavelength infrared (1.3–2.6  $\mu\text{m}$ ) observations of the nucleus of Comet 19P/Borrelly. *Icarus*, 167:100–112, January 2004. doi: 10.1016/j.icarus.2003.08.019.
- J. C. Solem. Cometary breakup calculations based on a gravitationally-bound agglomeration model: the density and size of Shoemaker-Levy 9. *Astronomy & Astrophysics*, 302:596, October 1995.
- T. Spohn, K. Seifert, A. Hagermann, J. Knollenberg, A. J. Ball, M. Banaszekiewicz, J. Benkhoff, S. Gadowski, W. Gregorczyk, J. Grygorczuk, M. Hlond, G. Kargl, E. Kührt, N. Kömle, J. Krasowski, W. Marczewski, y J. C. Zarnecki. Mupus A Thermal and Mechanical Properties Probe for the Rosetta Lander Philae. *Space Science Reviews*, 128:339–362, February 2007. doi: 10.1007/s11214-006-9081-2.
- R. E. Squires y D. B. Beard. Physical and Orbital Behavior of Comets. *The Astrophysical Journal*, 133:657, March 1961. doi: 10.1086/147068.
- M. Sremčević, J. Schmidt, H. Salo, M. Seiß, F. Spahn, y N. Albers. A belt of moonlets in Saturn's A ring. , 449:1019–1021, October 2007. doi: 10.1038/nature06224.
- J. A. Stansberry, J. Van Cleve, W. T. Reach, D. P. Cruikshank, J. P. Emery, Y. R. Fernandez, V. S. Meadows, K. Y. L. Su, K. Misselt, G. H. Rieke, E. T. Young, M. W. Werner, C. W. Engelbracht, K. D. Gordon, D. C. Hines, D. M. Kelly, J. E. Morrison, y J. Muzerolle. Spitzer Observations of the Dust Coma and Nucleus of 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *The Astrophysical Journals*, 154:463–468, September 2004. doi: 10.1086/422473.
- J. M. Sunshine, M. F. A'Hearn, O. Groussin, J.-Y. Li, M. J. S. Belton, W. A. Delamere, J. Kissel, K. P. Klaasen, L. A. McFadden, K. J. Meech, H. J. Melosh,

- P. H. Schultz, P. C. Thomas, J. Veverka, D. K. Yeomans, I. C. Busko, M. Desnoyer, T. L. Farnham, L. M. Feaga, D. L. Hampton, D. J. Lindler, C. M. Lisse, y D. D. Wellnitz. Exposed Water Ice Deposits on the Surface of Comet 9P/Tempel 1. *Science*, 311:1453–1455, March 2006. doi: 10.1126/science.1123632.
- J. M. Sunshine, O. Groussin, P. H. Schultz, M. F. A’Hearn, L. M. Feaga, T. L. Farnham, y K. P. Klaasen. The distribution of water ice in the interior of Comet Tempel 1. *Icarus*, 190:284–294, October 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2007.04.024.
- P. Swings, C. T. Elvey, y H. W. Babcock. The Spectrum of Comet Cunningham, 1940C. *The Astrophysical Journal*, 94:320, September 1941. doi: 10.1086/144336.
- G. M. Szabó, L. L. Kiss, y K. Sárneczky. Cometary Activity at 25.7 AU: Hale-Bopp 11 Years after Perihelion. *The Astrophysical Journal, Letters*, 677:L121–L124, April 2008. doi: 10.1086/588095.
- G. M. Szabó, K. Sárneczky, y L. L. Kiss. Frozen to death? Detection of comet Hale-Bopp at 30.7 AU. *Astronomy & Astrophysics*, 531:A11, July 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201116793.
- G. Tancredi, H. Rickman, y J. M. Greenberg. Thermochemistry of cometary nuclei. 1: The Jupiter family case. *Astronomy & Astrophysics*, 286:659–682, June 1994.
- N. Thomas. The nuclei of Jupiter family comets: A critical review of our present knowledge. *Planetary Space Science*, 57:1106–1117, August 2009. doi: 10.1016/j.pss.2009.03.006.
- N. Thomas y H. U. Keller. Comet P/Halley’s dust production rate at Giotto encounter derived from Halley Multicolour Camera observations. *Astronomy & Astrophysics*, 249:258–268, September 1991.
- N. Thomas, H. U. Keller, E. Arijs, C. Barbieri, M. Grande, P. Lamy, H. Rickman, R. Rodrigo, K.-P. Wenzel, M. F. A’Hearn, F. Angrilli, M. Bailey, M. A. Barucci, J.-L. Bertaux, K. Brieß, J. A. Burns, G. Cremonese, W. Curdt, H. Deceuninck, R. Emery, M. Festou, M. Fulle, W.-H. Ip, L. Jorda, A. Korth, D. Koschny, J.-R. Kramm, E. Kührt, L. M. Lara, A. Llebaria, J. J. Lopez-Moreno, F. Marzari, D. Moreau, C. Muller, C. Murray, G. Naletto, D. Nevejans, R. Ragazzoni, L. Sabau, A. Sanz, J.-P. Sivan, y G. Tondello. OSIRIS-the optical, spectroscopic and infrared remote imaging system for the Rosetta Orbiter. *Advances in Space Research*, 21:1505–1515, 1998. doi: 10.1016/S0273-1177(97)00943-5.
- P. Thomas, M. F. A’Hearn, M. J. S. Belton, D. Brownlee, B. Carcich, B. Hermalyn, K. Klaasen, S. Sackett, P. H. Schultz, J. Veverka, Bhaskaran, y et al. The nucleus of Comet 9P/Tempel 1: Shape and geology from two flybys. *Icarus, En prensa*, 2012.



- P. C. Thomas, J. Veverka, M. J. S. Belton, A. Hidy, M. F. A'Hearn, T. L. Farnham, O. Groussin, J.-Y. Li, L. A. McFadden, J. Sunshine, D. Wellnitz, C. Lisse, P. Schultz, K. J. Meech, y W. A. Delamere. The shape, topography, and geology of Tempel 1 from Deep Impact observations. *Icarus*, 187:4–15, March 2007. doi: 10.1016/j.icarus.2006.12.013.
- J. M. Trigo-Rodríguez, E. García-Melendo, B. J. R. Davidsson, A. Sánchez, D. Rodríguez, J. Lacruz, J. A. de Los Reyes, y S. Pastor. Outburst activity in comets. I. Continuous monitoring of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Astronomy & Astrophysics*, 485:599–606, July 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20078666.
- J. M. Trigo-Rodríguez, D. A. García-Hernández, A. Sánchez, J. Lacruz, B. J. R. Davidsson, D. Rodríguez, S. Pastor, y J. A. de Los Reyes. Outburst activity in comets - II. A multiband photometric monitoring of comet 29P/Schwassmann-Wachmann 1. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 409:1682–1690, December 2010. doi: 10.1111/j.1365-2966.2010.17425.x.
- R. Vasundhara. A photometric-dynamic model to simulate coma and jets from a comet. Application to comet Hale-Bopp (C/1995 O1). *Astronomy & Astrophysics*, 382:342–358, January 2002. doi: 10.1051/0004-6361:20011592.
- R. Vasundhara y P. Chakraborty. Modeling of Jets from Comet Hale-Bopp (C/1995 O1): Observations from the Vainu Bappu Observatory. *Icarus*, 140:221–230, July 1999. doi: 10.1006/icar.1999.6105.
- K. Watson, B. C. Murray, y H. Brown. The stability of volatiles in the solar system. *Icarus*, 1:317–327, 1963. doi: 10.1016/0019-1035(62)90030-1.
- H. A. Weaver y P. L. Lamy. Estimating the Size of Hale-Bopp's Nucleus. *Earth Moon and Planets*, 79:17–33, September 1997. doi: 10.1023/A:1006220930046.
- H. A. Weaver, P. D. Feldman, M. F. A'Hearn, y C. Arpigny. The activity and size of the nucleus of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1). *Science*, 275:1900–1904, March 1997. doi: 10.1126/science.275.5308.1900.
- H. A. Weaver, P. D. Feldman, M. F. A'Hearn, C. Arpigny, J. C. Brandt, y S. A. Stern. Post-Perihelion HST Observations of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1). *Icarus*, 141: 1–12, September 1999. doi: 10.1006/icar.1999.6159.
- S. J. Weidenschilling. The Origin of Comets in the Solar Nebula: A Unified Model. *Icarus*, 127:290–306, June 1997. doi: 10.1006/icar.1997.5712.
- S. J. Weidenschilling. From icy grains to comets. In Festou, M. C., Keller, H. U., & Weaver, H. A., editor, *Comets II*, pages 97–104, 2004.
- M. Weiler, H. Rauer, J. Knollenberg, L. Jorda, y J. Helbert. The dust activity of comet C/1995 O1 (Hale-Bopp) between 3 AU and 13 AU from the Sun. *Astronomy & Astrophysics*, 403:313–322, May 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20030289.

- P. R. Weissman. Are cometary nuclei primordial rubble piles? *Nature*, 320:242–244, March 1986. doi: 10.1038/320242a0.
- R. M. West, O. Hainaut, y A. Smette. Post-perihelion observations of P/Halley. III - an outburst at R = 14.3 AU. *Astronomy & Astrophysics*, 246:L77–L80, June 1991.
- F. L. Whipple. A comet model. I. The acceleration of Comet Encke. *The Astrophysical Journal*, 111:375–394, March 1950. doi: 10.1086/145272.
- F. L. Whipple. A Comet Model. II. Physical Relations for Comets and Meteors. *The Astrophysical Journal*, 113:464, May 1951. doi: 10.1086/145416.
- F. L. Whipple. Rotation and outbursts of comet P/Schwassmann-Wachmann 1. *The Astronomical Journal*, 85:305–313, March 1980. doi: 10.1086/112676.
- C. Whitney. Comet outbursts. *The Astrophysical Journal*, 122:190–195, July 1955. doi: 10.1086/146069.
- J. Wink, D. Bockelée-Morvan, D. Despois, P. Colom, N. Biver, J. Crovisier, E. Gérard, E. Lellouch, J. K. Davies, W. R. F. Dent, y L. Jorda. Evidences for extended sources and temporal modulations in molecular observations of C/1995 O1 (Hale-Bopp) at the IRAM interferometer. *Earth Moon and Planets*, 78:63–63, July 1997. doi: 10.1023/A:1006263026604.
- D. H. Wooden, D. E. Harker, y C. E. Woodward. High Silicate Crystalline-to-Amorphous Ratios in Comets C/2001 Q4 (NEAT) and Hale-Bopp. In A. Krot, E. Scott, K. Keil, & B. Reipurth, editor, *Workshop on Chondrites and the Protoplanetary Disk*, page 9100, November 2004.
- T. N. Woods, P. D. Feldman, y G. J. Rottman. Ultraviolet Observations of Comet Hale-Bopp (C/1995 O1) by the UARS SOLSTICE. *Icarus*, 144:182–186, March 2000. doi: 10.1006/icar.1999.6262.
- Y. Yue y C. A. Angell. Clarifying the glass-transition behaviour of water by comparison with hyperquenched inorganic glasses. *Nature*, 427:717–720, February 2004. doi: 10.1038/nature02295.
- M. E. Zolensky, T. J. Zega, H. Yano, S. Wirick, A. J. Westphal, M. K. Weisberg, I. Weber, J. L. Warren, M. A. Velbel, A. Tsuchiyama, P. Tsou, A. Toppani, N. Tomioka, K. Tomeoka, N. Teslich, M. Taheri, J. Susini, R. Stroud, T. Stephan, F. J. Stadermann, C. J. Snead, S. B. Simon, A. Simionovici, T. H. See, F. Robert, F. J. M. Rietmeijer, W. Rao, M. C. Perronnet, D. A. Papanastassiou, K. Okudaira, K. Ohsumi, I. Ohnishi, K. Nakamura-Messenger, T. Nakamura, S. Mostefaoui, T. Mikouchi, A. Meibom, G. Matrajt, M. A. Marcus, H. Leroux, L. Lemelle, L. Le, A. Lanzirrotti, F. Langenhorst, A. N. Krot, L. P. Keller, A. T. Kearsley, D. Joswiak, D. Jacob, H. Ishii, R. Harvey, K. Hagiya, L. Grossman, J. N. Grossman, G. A.

Graham, M. Gounelle, P. Gillet, M. J. Genge, G. Flynn, T. Ferroir, S. Fallon, D. S. Ebel, Z. R. Dai, P. Cordier, B. Clark, M. Chi, A. L. Butterworth, D. E. Brownlee, J. C. Bridges, S. Brennan, A. Brearley, J. P. Bradley, P. Bleuet, P. A. Bland, y R. Bastien. Mineralogy and Petrology of Comet 81P/Wild 2 Nucleus Samples. *Science*, 314:1735–, December 2006. doi: 10.1126/science.1135842.