

LA POLS DE L'UNIVERS

UNA BRUTÍCIA IMPRESCINDIBLE
PER A LA QUÍMICA ...I LA VIDA

Albert Rimola
Departament de Química
UAB



SANT
ALBERT
2020



11 de novembre del 2020

**NÚVOLS DE MATÈRIA EN FASE GAS I
PARTÍCULES SÒLIDES (GRANS DE POLS)**



Pil·lars de la Creació



Nebulosa Cap de Cavall

Diversitat i Complexitat Molecular

2 àtoms	3 àtoms	4 àtoms	5 àtoms	6 àtoms	7 àtoms	8 àtoms	9 àtoms	10 àtoms	11 àtoms	12 àtoms	> 12 àtoms
H ₂	AINC	c-C ₃ H	C ₅	C ₅ H	C ₆ H	C ₇ H	C ₈ H	(CH ₃) ₂ CO	C ₂ H ₅ OCHO	C ₆ H ₆ ⁺	HC ₁₁ N
AlF	AIOH	i-C ₃ H	C ₅ H	C ₅ N	C ₆ H ⁺	CH ₃ C ₂ N	C ₈ H ⁺	(CH ₂ OH) ₂	CH ₃ C ₆ H	n-C ₃ H ₇ CN	C ₁₁ N
AlCl	C ₃	C ₃ N	C ₄ H ⁺	C ₅ N ⁻	CH ₃ C ₂ H ₂	HC(O)OCH₃	C ₃ H ₆	CH ₃ C ₅ N	HC ₉ N	C ₂ H ₅ OCH ₃	C ₁₄ H ₁₀
AlO	C ₂ H	C ₃ N ⁻	C ₂ Si	C ₂ H ₄	CH ₃ NH ₂	HC(O)OCH ₃	(CH ₃) ₂ O	CH ₃ CH ₂ CHO			C ₇₀
C ₂	C ₂ O	C ₃ O	i-C ₃ H ₂	CH ₃ CN	CH ₂ CHCN	CH ₃ COOH	CH ₃ C ₂ H				C ₆₀
CH	C ₂ P	C ₃ S	c-C ₃ H ₂	CH ₃ NC	c-C ₂ H ₄ O	CH ₂ CCHCN	CH ₃ CH ₂ OH				
CH ⁺	C ₂ S	C ₂ H ₂	CH ₄	CH ₃ OH	H ₂ CCHOH	CH ₂ CHCHO					
CF ⁺	CH ₂	CH ₃	H ₂ C ₂ N	CH ₃ SH	HC ₅ N	CH ₂ OHCHO					
CN	CN ₂	HCCN	H ₂ C ₂ O	i-H ₂ C ₄	CH ₃ CHO	H ₂ C ₆					
CN ⁺	CO ₂	HCNH ⁺	H ₂ CNH	c-H ₂ C ₃ O	CH₃CHO	i-HC ₆ H					
CN ⁻	CO ₂ ⁺	HCNO	H ₂ COH ⁺	i-HC ₄ H		NH ₂ CH ₂ CN					
CO	CS ₂	HNCO	H ₂ NCN	i-HC ₄ N							
CO ⁺	FeCN	HNCS	HCCCN	HC ₃ NH ⁺							
CP	H ₃ ⁺	HOCN	HCCNC	HC ₂ CHO							
CS	H ₃ D ⁺	HOCO ⁺	HCCOH	H ₂ CCNH							
CSi	HD ₂ ⁺	HSCN	HC(O)CN								
FeO	H ₂ C ⁺	H ₂ CO	HNC ₃								
HD	H₂O	H ₂ CN	SiH ₄								
HCl	H ₂ O	H ₂ CS									
HF	HDO	H ₂ O									
KCl	H ₂ S	H₃O⁺									
NH	H ₂ S ⁺	PH ₃									
N ₂ ⁺	HCN	c-SiC ₃									
NO	HCO										
NS	HCO ⁺										
NaCl	HCP										
O ₂	HCS ⁺										
OH[·]	HOC ⁺										
OH	HNC										
PN	HNO										
PO	KCN										
S ₂	MgCN										
SH	MgNC										
SH ⁺	N ₂ H ⁺										
SO	N ₂ O										
SO ⁺	NH ₂										
SiH	NaCN										
SiN	OCN⁻										
SiO	OCS										
SiS	SO ₂										
	c-SiC ₂										
	SiCN										
	SiNC										

HC(O)OCH₃

CH₃CH₂OH

CH₃CHO

NH₂CHO

Molècules Orgàniques Complexes (COMs)



"Interstellar pub crawl!"

Cadenes de C lineals Ful·lerens i derivats

RADIOTELESCOPIS



ALMA
Atacama Large Millimeter Array

> 200 espècies moleculars detectades EN FASE GAS

(interestel·lars, circumstel·lars, extragalàctiques, i exoplanetàries)

McGuire, *Astrophys. J. Supp. Ser.*, 2018, 239, 17

Grans de Pols

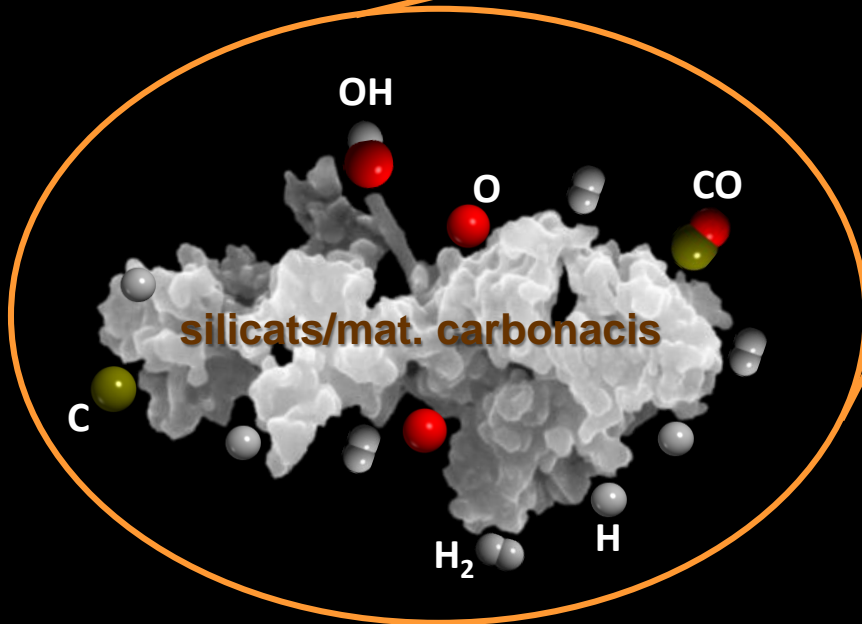
Tielens, Rev. Mod. Phys., 2013, 85, 1021
van Dishoeck, Faraday Discuss., 2014, 168, 9



Núvols
Interestel·lars

Núvols
difusos

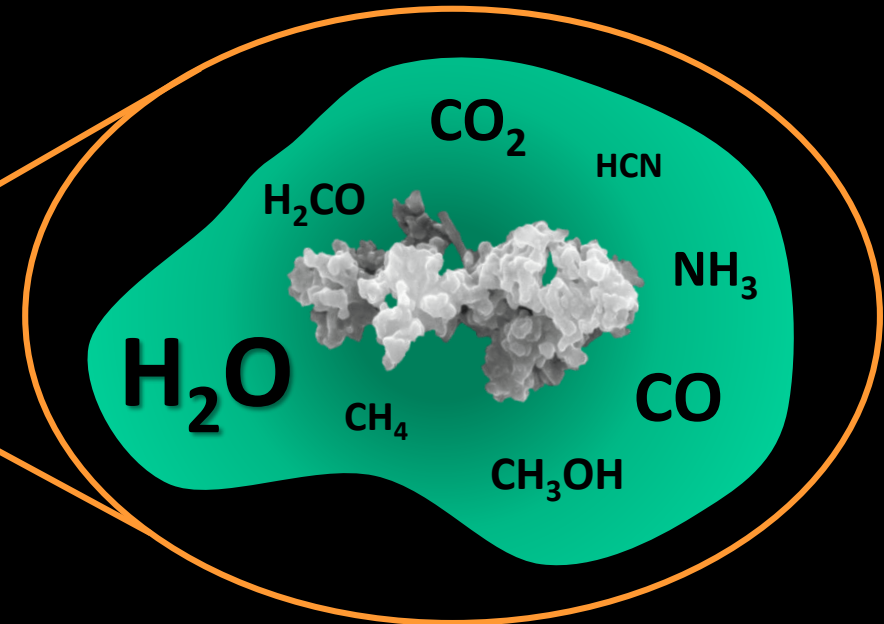
$n \approx 10^2 \text{ cm}^{-3}$
 $T \approx 80 - 100 \text{ K}$



Grans de pols "nuus"

Núvols
densos

$n \approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$
 $T \approx 10 - 30 \text{ K}$

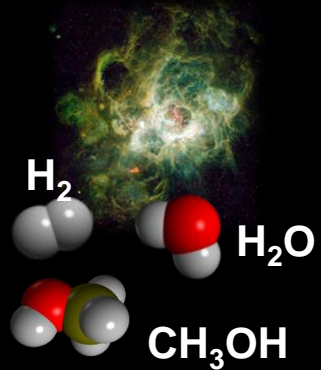


Grans de pols recoberts
per mantells de gels

Celestial Valentine
W5 star-forming region
Font: NASA's Spitzer Space Telescope

Formació d'un Sistema Solar i Evolució Química

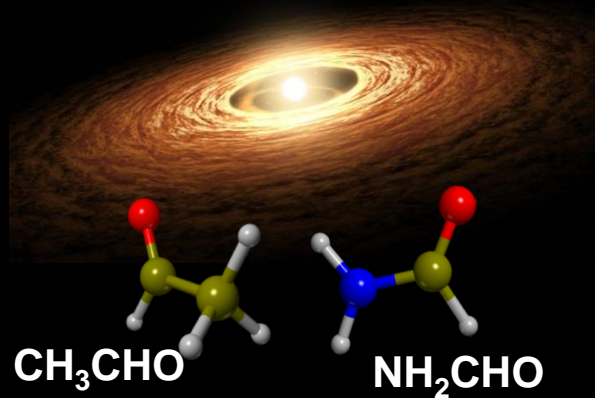
PRESTEL·LAR



Molècules simples

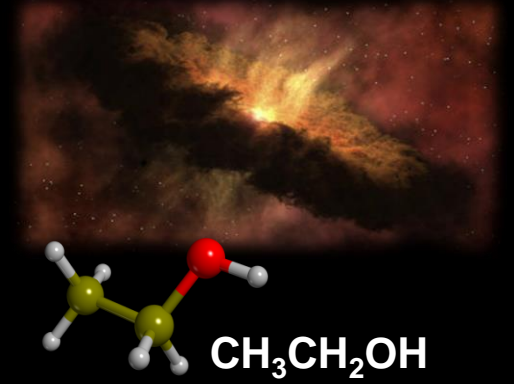


PROTOESTEL·LAR



COMs

DISC PROTOPLANETARI



Molècules simples i COMs



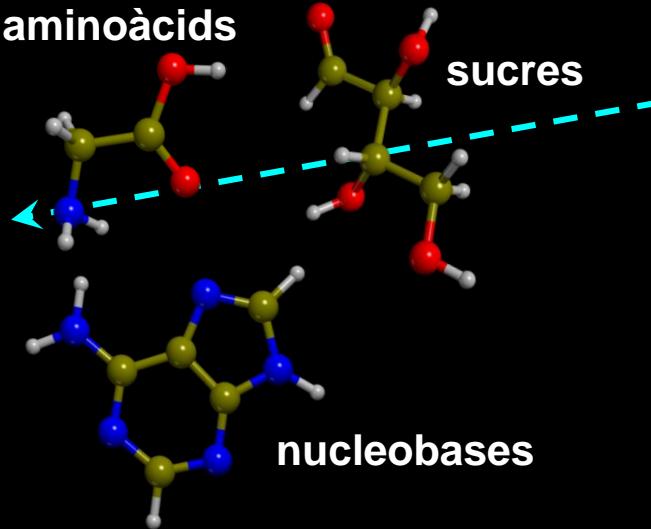
cometes i meteorits



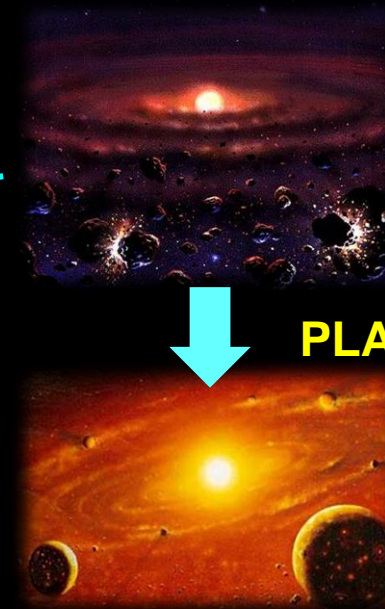
Alta complexitat molecular

aminoàcids

sucres

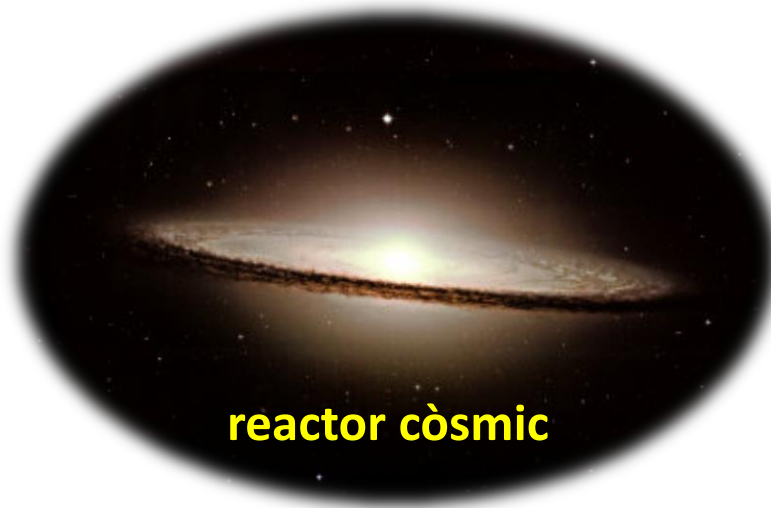
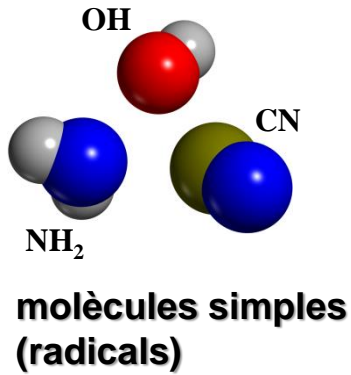
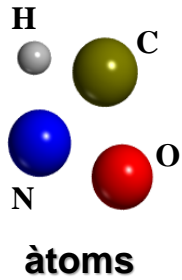


FORMACIÓ DE
PLANETESSIMALS I
PLANETES

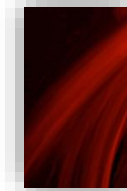


L'Univers com un Gran Reactor Químic

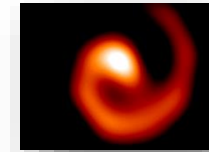
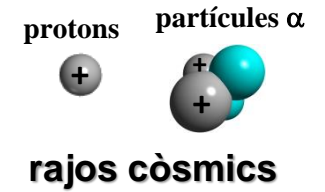
REACTIUS



FONT D'ENERGIA

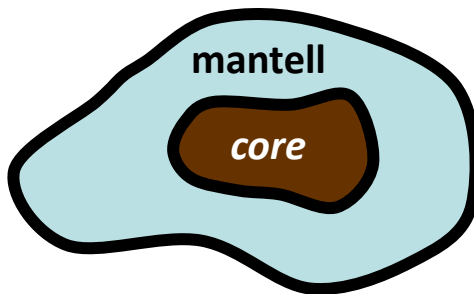


UV



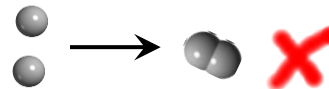
temperatura

GRANS DE POLS

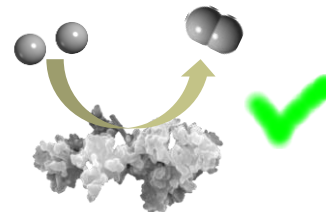


“Ajudant” de les reaccions

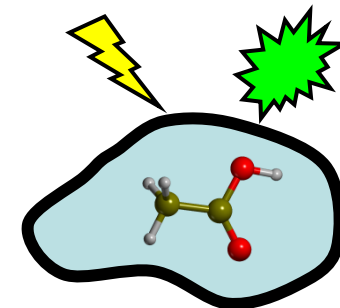
reacció en
fase gas



reacció en les
superfícies dels
grans de pols

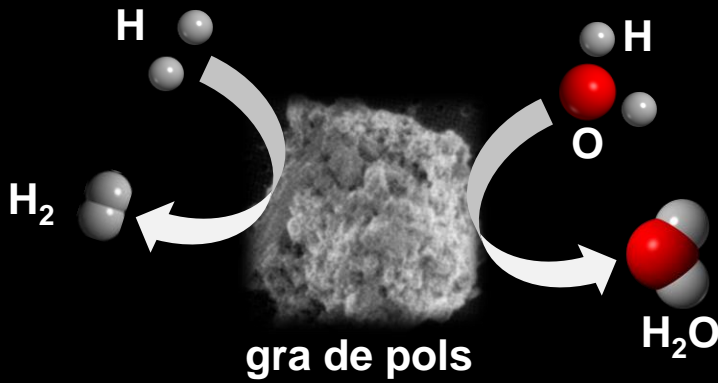


“Protector” dels productes



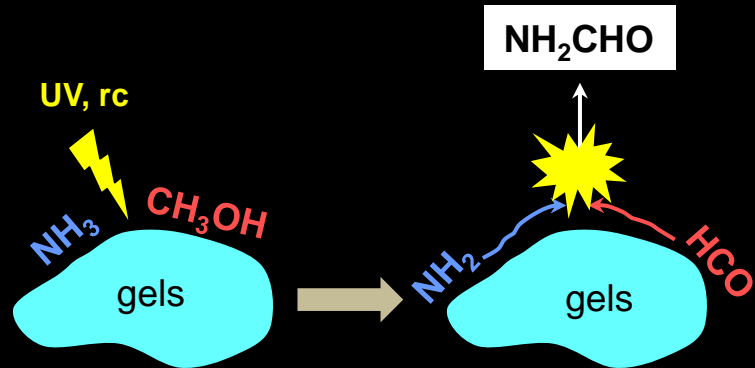
Formació d'un Sistema Solar i Evolució Química. Presència dels Grans de Pols

PRESTEL-LAR



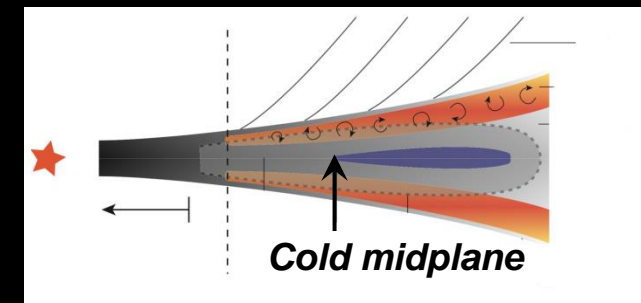
Molècules simples:
 H_2 , H_2O , NH_3 , CO_2 , CH_3OH ...

PROTOESTEL-LAR



COMs:
 NH_2CHO , CH_3CHO , CH_3OCH_3 ...

DISC PROTOPLANETARI



Un pas més enllà en la complexitat molecular

Detecció de molts compostos orgànics d'elevada complexitat molecular: alcohols, àcids carboxílics, aldehids, cetones, nitrils, alifàtics, aromàtics, aminoàcids, sucres i nucleobases

meteorits



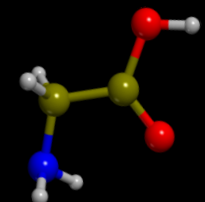
cometes



FORMACIÓ DE PLANETESSIMALS I PLANETES

Presència de molts minerals (alguns amb propietats catalítiques): TiO_2 , FeS , aluminosilcats, grans metàl·lics,...

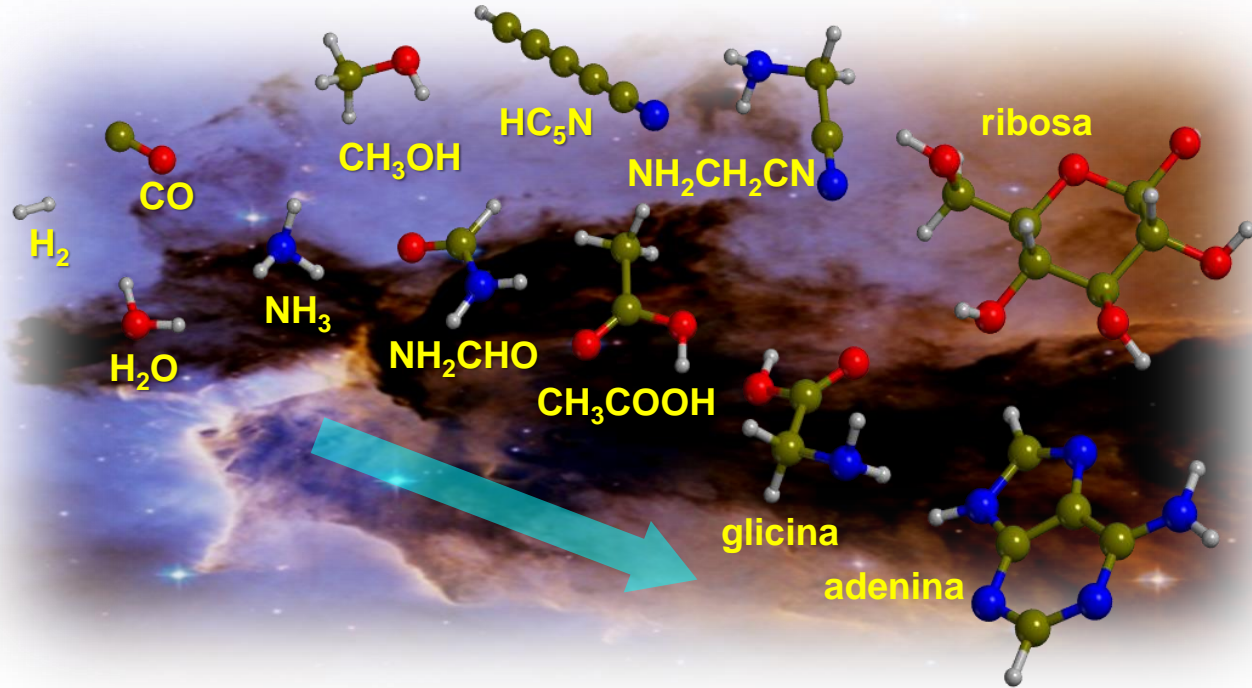
- Roques + gels
- Detecció de molècules orgàniques (**glicina!**)



Wild 2 (Stardust)
 67P (Rosetta)

Per què estudiar la Química de l'Univers?

1. Per entendre les etapes fonamentals implicades en l'evolució molecular existent en l'Univers:



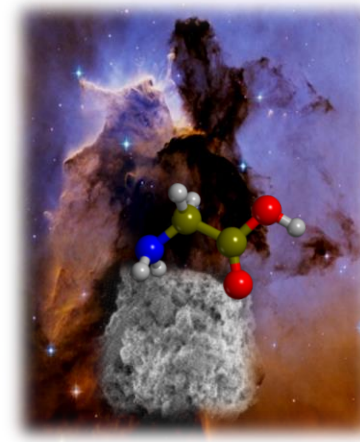
- Formació de sistemes solars i planetaris
- Química extragalàctica
- Atmosferes planetàries i exoplanetes
- Exploracions i missions espacials
- ...

2. L'Astroquímica està connectada amb processos de química prebiòtica i, en última instància, en l'origen de la vida.

Aparició de sistemes moleculars

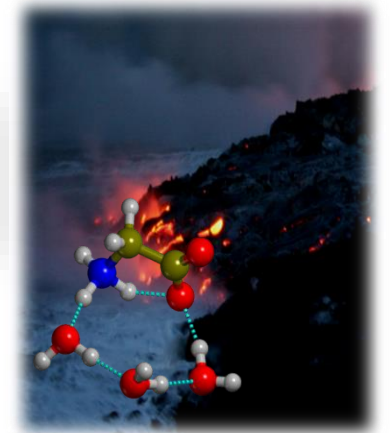
Aparició de sistemes macro-moleculars

Aparició de sistemes autoreplicatius



Espai profund

Alliberament exogènic

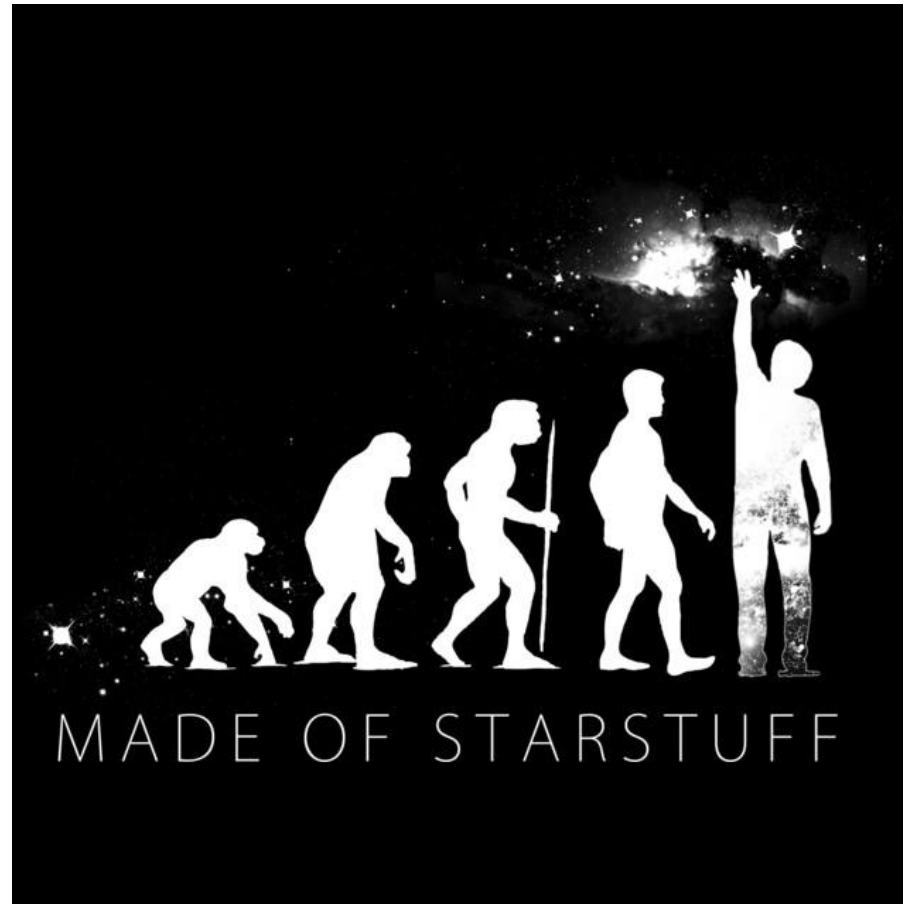


Terra primordial

Per què estudiar la Química de l'Univers?

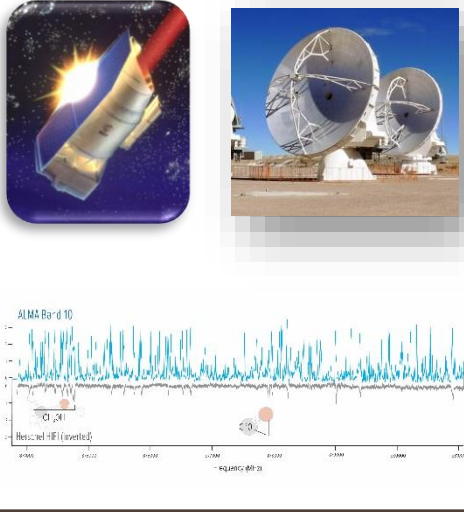
“The Cosmos is also within us. We are made of star stuff”

Carl Sagan

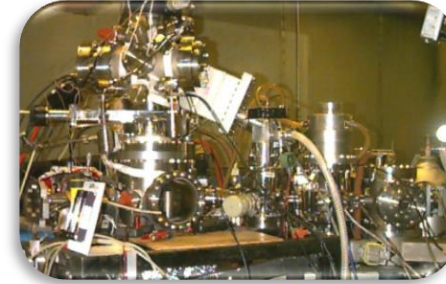


Astroquímica. Un Camp Interdisciplinari

Mesures Observacionals

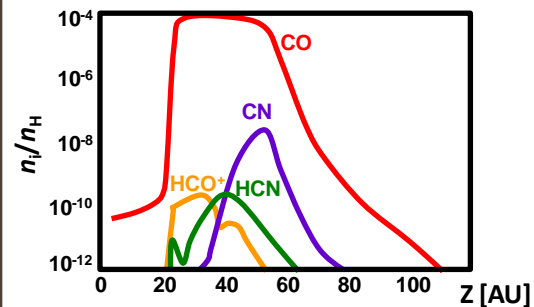


Experiments al Laboratori



ASTROQUÍMICA

Models Astroquímics



Astroquímica. Mesures Observacionals I. Molècules en Fase Gas

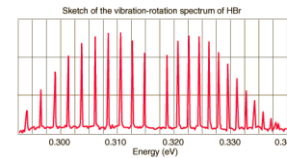
- Observacions astronòmiques basades en l'**espectroscòpia d'emissió** de transicions **rotovibracionals** d'espècies moleculars **en fase gas** presents en l'objecte astrofísic que s'observa.
- Mesures espectroscòpiques del rang de les **ràdiofreqüències** (mm i sub-mm)



Bases de dades

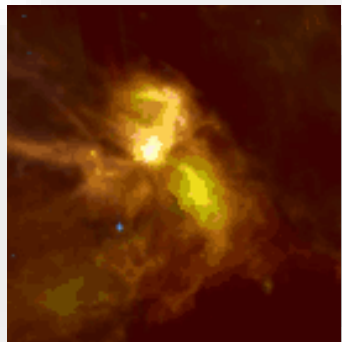


Experiments

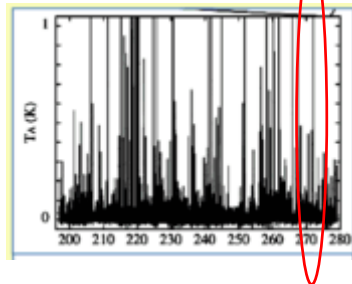


Eina:
Telescopis

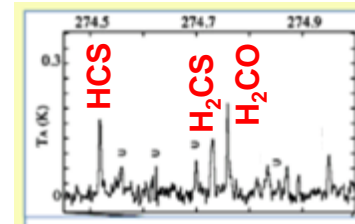
Eina:
Dades espectroscòpiques



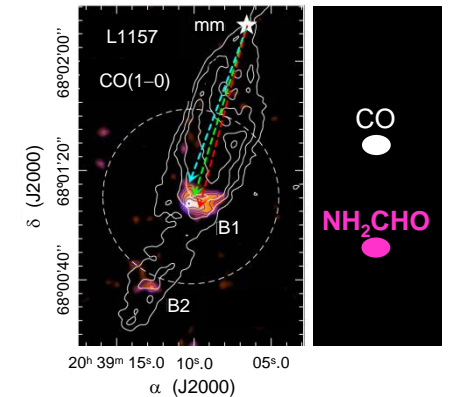
**Objecte astrofísic
(font d'emissió)**



Espectre de la font



**Identificació de les
espècies moleculars**

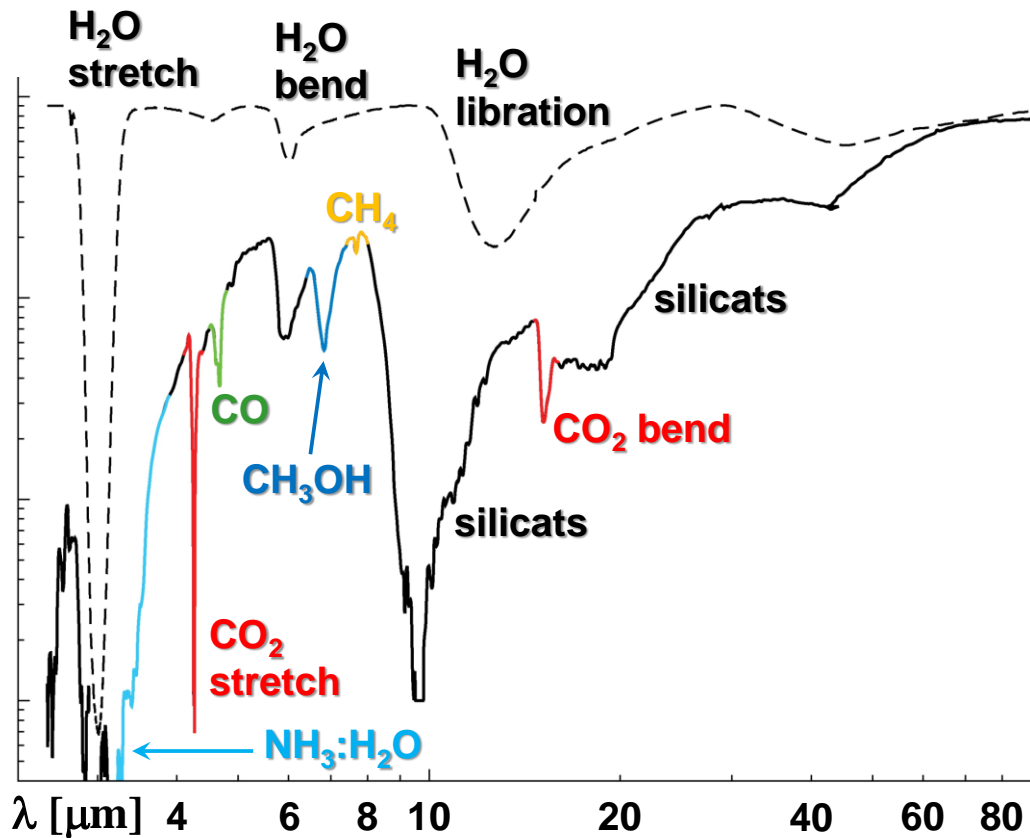


**Mapeig del NH₂CHO en
la protoestrella L1157**

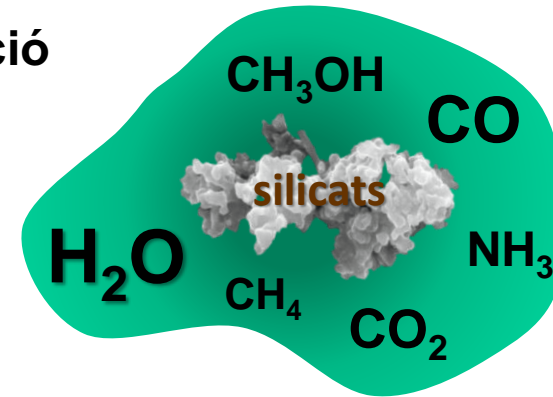
Codella, ..., Rimola... *Astron. Astrophys.*, 2017, 605, L3

Astroquímica. Mesures Observacionals II. Grans de Pols

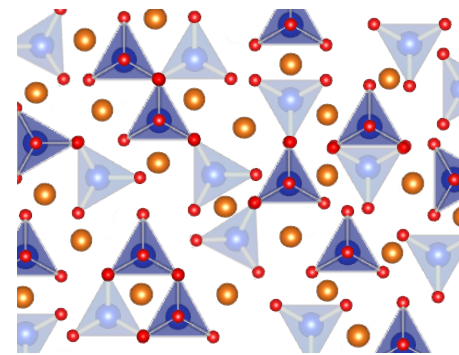
- Observacions astronòmiques basades en l'**espectroscòpia d'emissió** de transicions **vibracionals** de components **sòlids** presents en l'objecte astrofísic que s'observa.
- Mesures espectroscòpiques del rang de l'**infraroig** (3 – 200 μm , 50 – 4000 cm^{-1})



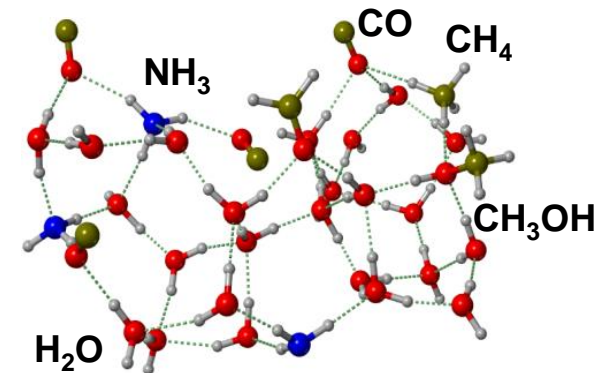
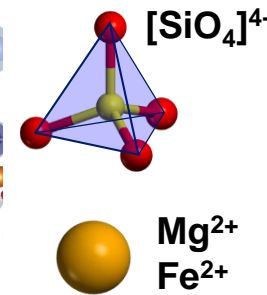
➤ Composició Química



➤ Estat estructural: AMORF



silicats (Mg_2SiO_4)

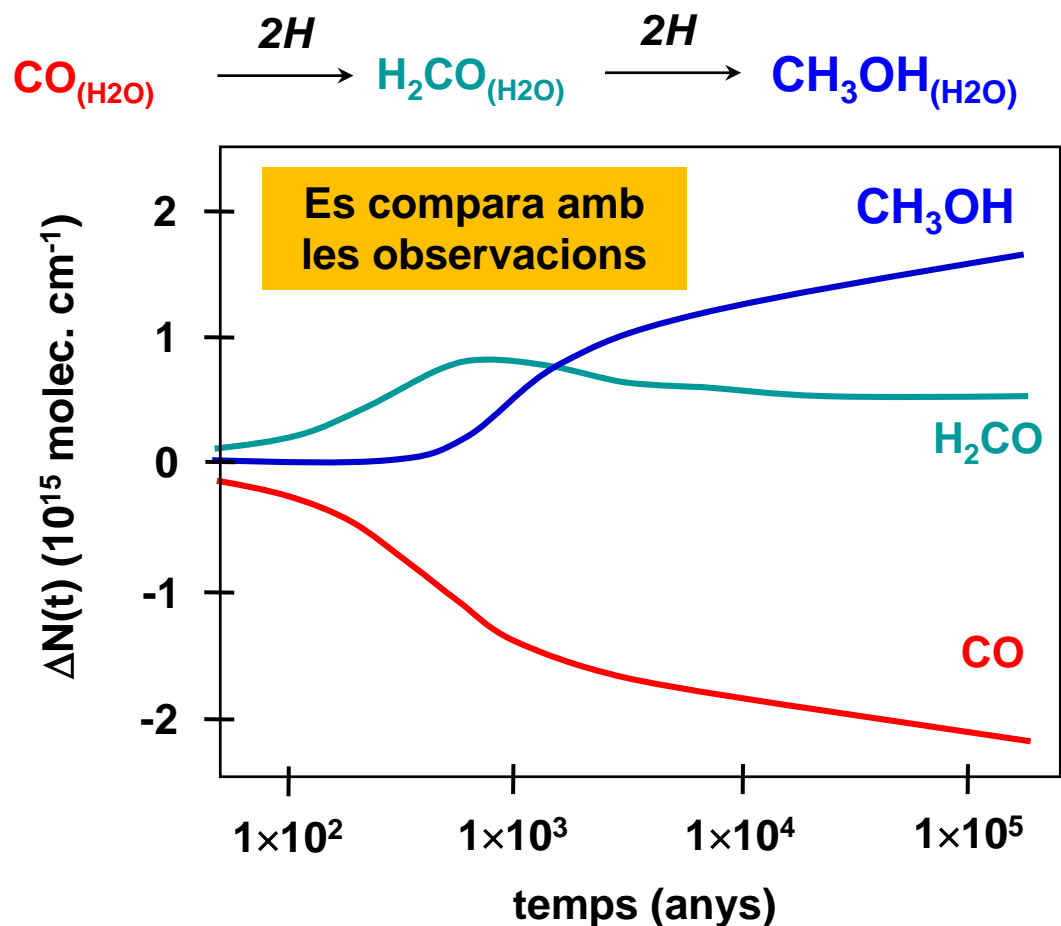


mantell de gel

Astroquímica. Models Astroquímics

- **Equacions diferencials**, la finalitat de les quals és **reproduir les dades observacionals**, amb l'objectiu final d'entendre els **processos físics i químics** que operen en la regió observada.

Predicció de les **abundàncies** de **CO**, **H₂CO** and **CH₃OH** en funció del temps considerant la **hidrogenació del CO** en un mantell de **gel d'H₂O**



Tipus de models:

- Equacions cinètiques
- Simulacions Monte Carlo
- *Master Equations*

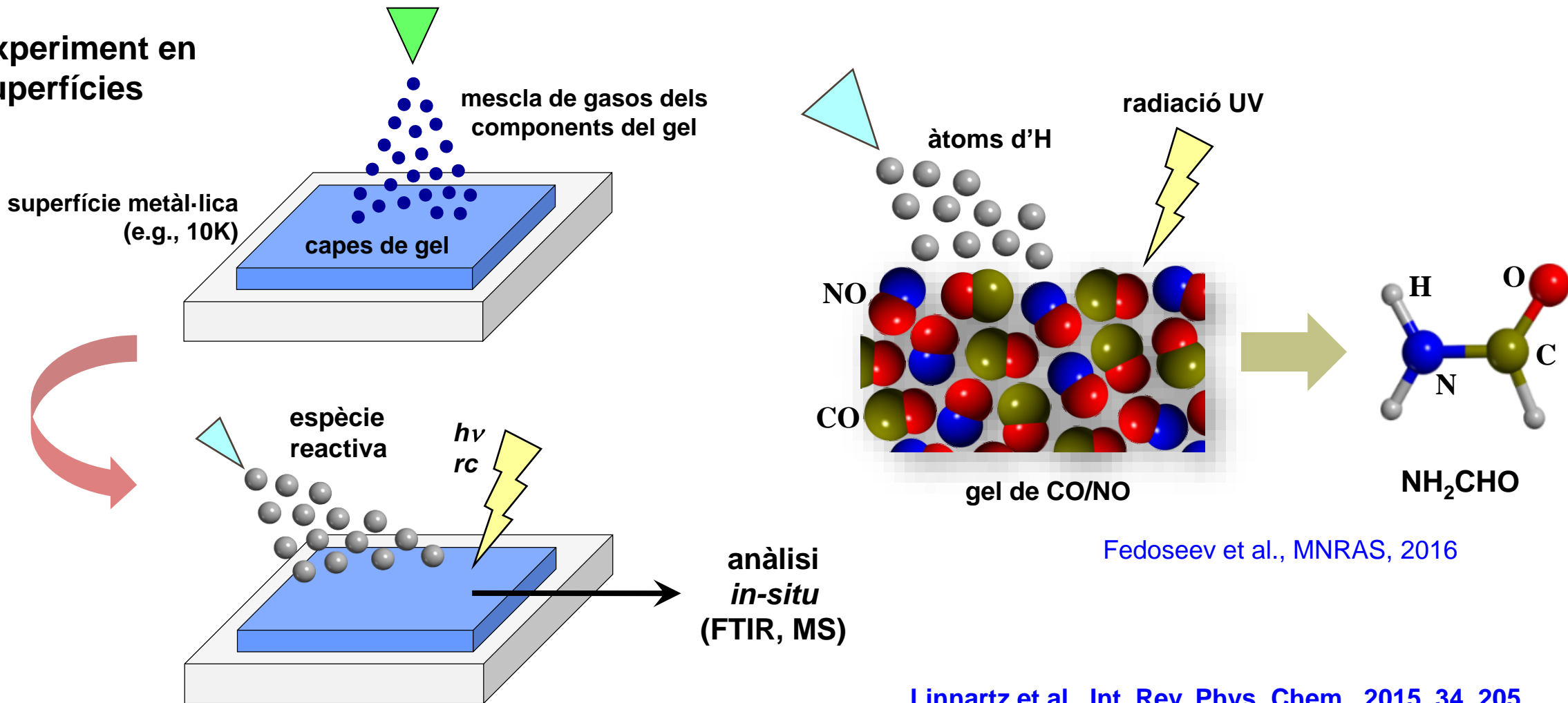
Necessiten dades inicials (*inputs*):

- **Paràmetres físics:** temperatures, abundàncies inicials, dimensions dels grans,
- **Paràmetres energètics:** energies d'activació, energies d'adsorció/desorció

Astroquímica. Experiments al Laboratori

- **Experiments terrestres** l'objectiu dels quals és estudiar **reaccions d'interès astroquímic** simulant les condicions del medi de l'objecte astrofísic (**molt baixes temperatures i pressions**).
- Permeten conèixer quins **productes es formen** a partir d'uns reactius determinats.

➤ Experiment en superfícies



Astroquímica dels Grans de Pols. Limitacions

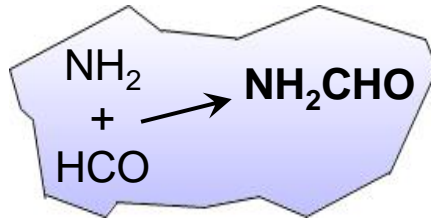
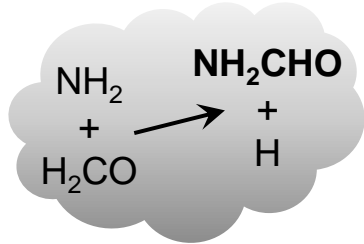
Mesures Observacionals

➤ Limitació:

No tenim informació de com es formen les molècules detectades

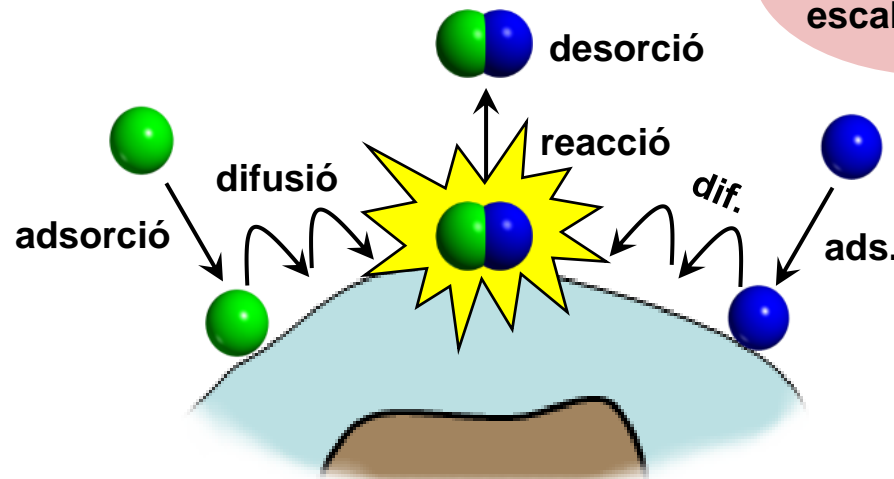
En fase gas

En les superfícies dels grans de pols



Etaques elementals en Química de superfícies

1. Adsorció
2. Difusió
3. Reacció
4. Desorció



en el cosmos són processos a escala atòmica

Models Astroquímics

➤ Limitació:

Incerteses dels paràmetres input



Incerteses en les prediccions

(Estimacions numèriques, valors en fase gas, valors presuposats)

Experiments al laboratori

➤ Limitacions:

- No tenim informació dels mecanismes de les reaccions
- Incapacitat de reproduir les condicions reals dels entorns astrofísics
 - Anàlegs dels grans de pols
 - Fluxos àtoms H/fotons UV

Tenim informació macroscòpica
Falta informació atomística



La Química dels grans de pols no està plenament entesa

Quines reaccions requereixen la presència del grans de pols i per què?

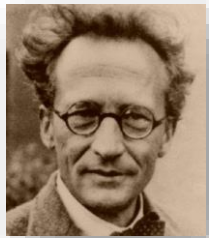
Informació a Escala Atòmica. Ús de la Química Computacional

Química Computacional: Branca de la Química que utilitza **simulacions moleculars** per solucionar **problemes químics**.

Integra l'ús de mètodes de la **Química Teòrica** i tècniques de **modelització molecular** que permeten calcular l'**estructura i propietats** de sistemes químics (moleculars, biològics, materials) amb el fi d'obtenir-ne **informació a escala atòmica**.

➤ **Química Quàntica:** Ús de la **mecànica quàntica** en sistemes químics.

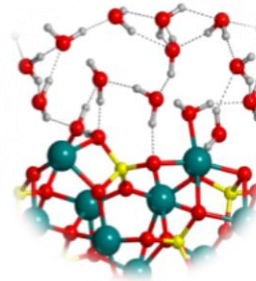
Resolució de l'**equació d'Scrödinger electrònica**



"If we can solve this equation we can know everything about the system"

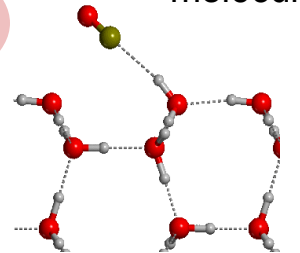
POTENCIALITATS

Estructura dels grans de pols

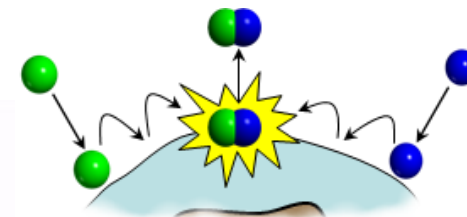


Informació atomística:
estructural, energètica i
dinàmica

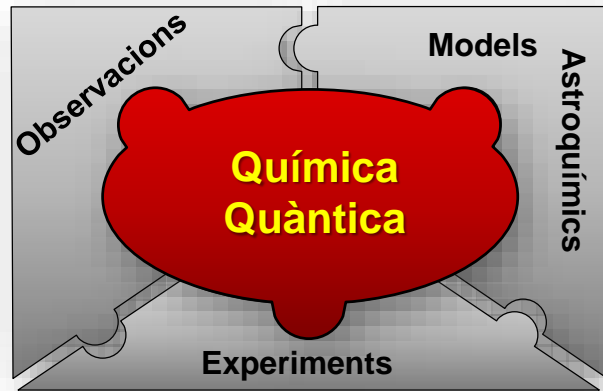
Adsorció de molècules



Processos de difusió



ERC-QUANTUMGRAIN

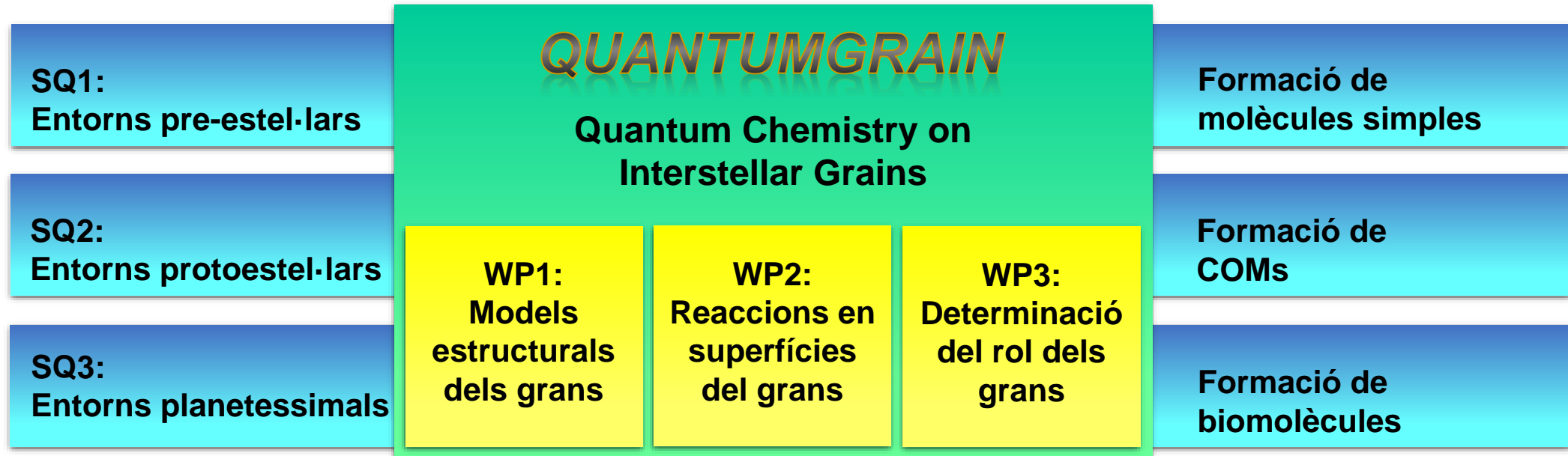


- Interpretar
- Predir
- Proveir
- Guiar



OBJECTIU

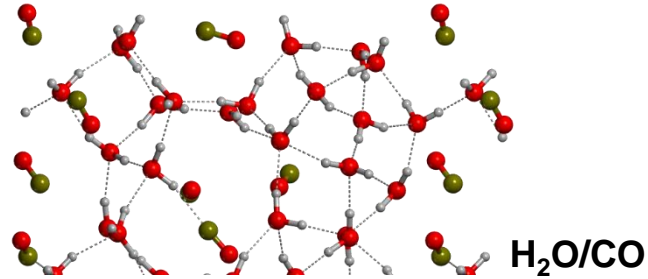
**Desvelar
definitivament la
Química en els
grans de pols**



WP1: Models estructurals dels grans

- Generar models estructurals atomístics (i realístics) representatius dels grans de pols

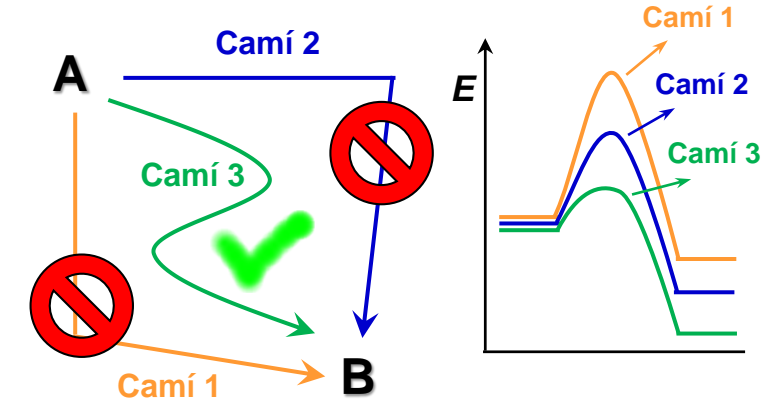
- Silicats
- Gels "bruts"
- Minerals



WP2: Reaccions en superfícies dels grans

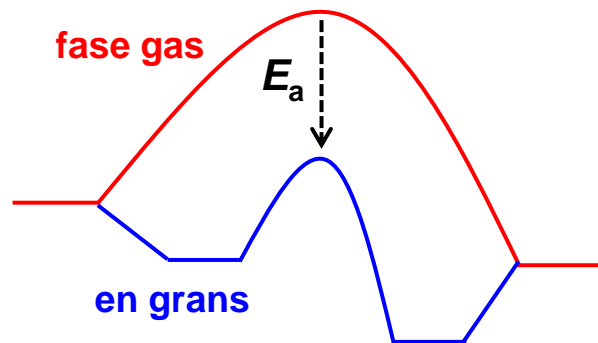
- Caracteritzar perfils d'energia per a la formació de:

- Molècules simples
- COMs
- Biomolècules



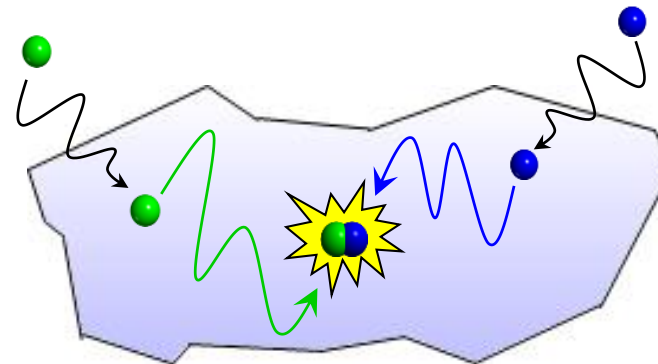
WP3: Determinació del rol dels grans

- Catalitzador químic?



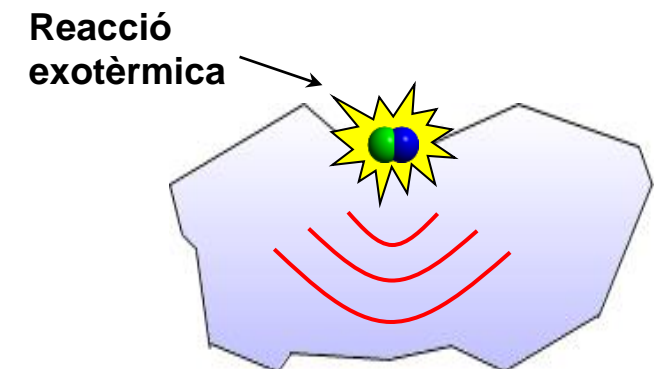
Reducció de l'energia d'activació (E_a)

- Concentrador dels reactius?



Retenció + difusió

- Tercer Cos?

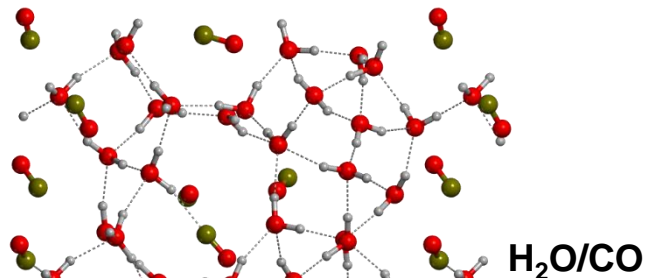


Dissipació de l'energia

WP1: Models estructurals dels grans

- Generar models estructurals atomístics (i realístics) representatius dels grans de pols

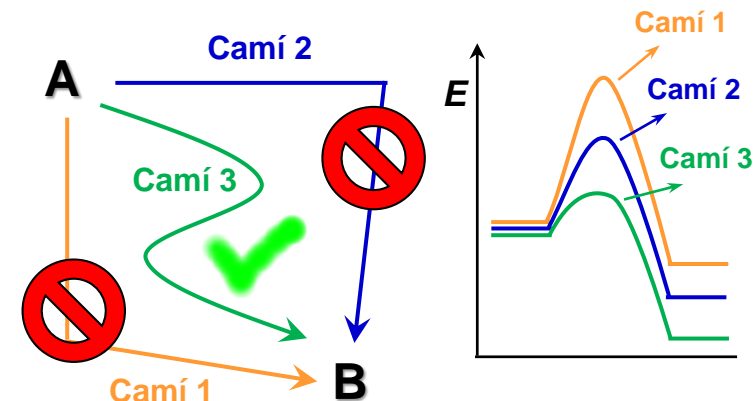
- Silicats
- Gels "bruts"
- Minerals



WP2: Reaccions en superfícies dels grans

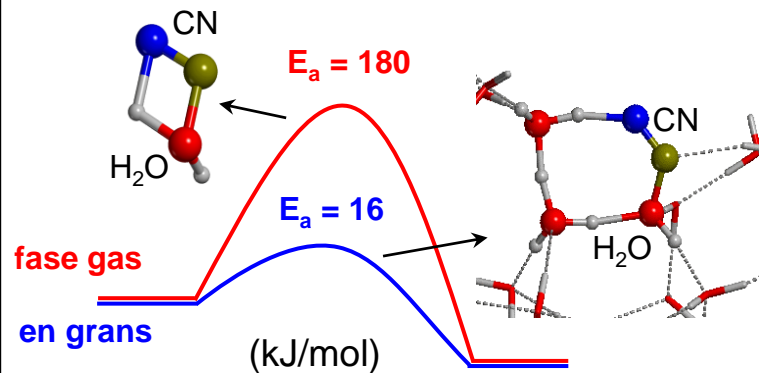
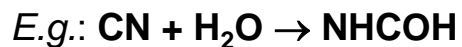
- Caracteritzar perfils d'energia per a la formació de:

- Molècules simples
- COMs
- Biomolècules



WP3: Determinació del rol dels grans

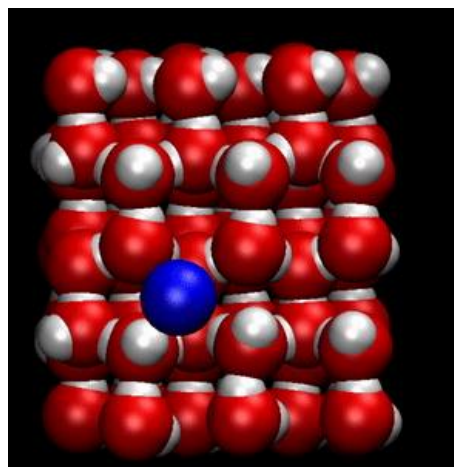
- Catalitzador químic?



- Concentrador dels reactius?

E.g.: difusió del N en gel d'H₂O

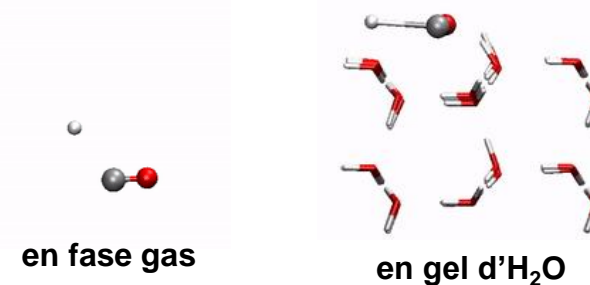
Simulació de Dinàmica Molecular



- Tercer Cos?



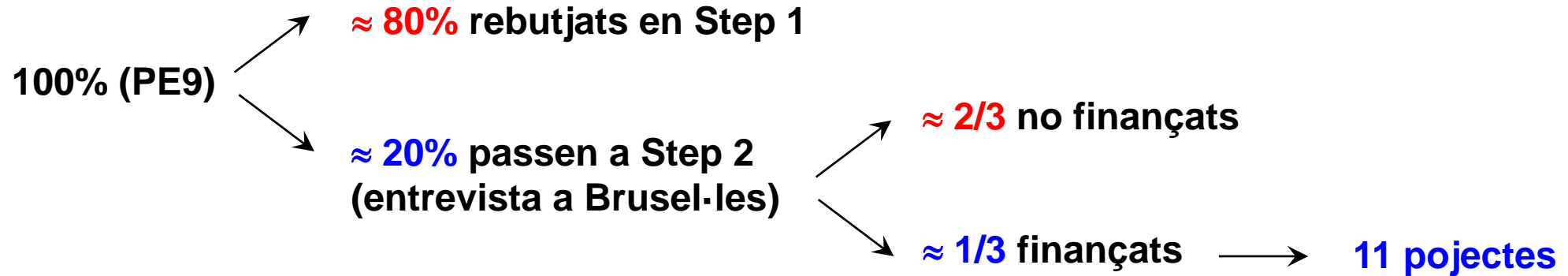
Simulacions de Dinàmica Molecular



ERC-QUANTUMGRAIN

- Quantum Chemistry on Interstellar Grains (QUANTUMGRAIN). Grant Agreement number 865657

- ERC-2019-COG - PE9 (Universe Sciences)



- 5 anys (01/09/2020 – 31/08/2025)

- 1,890,731.25 €

- Personal
- Supercomputació (CSUC)
- Viatges
- Altres despeses: Open Access, workshop,...

ERC-QUANTUMGRAIN. Moments d'estrès, moments de tristor, moments d'alegria

Europa / Funding & Tenders Portal notification

Dear Proposal Participant,

The following proposal has been submitted to the Participant Portal Submission System:

Submitted by : Albert RIMOLA (albert.rimola@uab.cat)
Proposal acronym : QUANTUMGRAIN
Proposal ID : 865657 (internal reference number: SEP-210576401)
Call : **ERC-2019-COG**
Type of action : ERC-COG
Topic : **ERC-2019-COG**
Call closure : 2019-02-07 17:00:00
Date of submission : 2019-02-07 11:23:12

ERC-2019-COG – Step 2 results - Proposal N° 865657 - QUANTUMGRAIN - Panel PE9 - PI name: RIMOLA

E

ERC-2019-COG-APPLICANTS@ec.europa.eu

Dv. 15/11/2019 10:48

Per a: Albert Rimola Gibert

Dear Applicant,

Following the Step 2 panel meetings of the ERC-2019-COG call, the review panels have concluded their work and identified proposals to be recommended for funding for this call.

We are pleased to inform you that your proposal has been retained on a reserve list for possible funding in this call, if additional budget becomes available and subject to confirmation by the ERC Scientific Council of the final ranked list of proposals recommended for funding in this call and finalisation of the evaluation process by the ERC Executive Agency.

In 3-5 weeks the official communication will be placed in the [F&T Portal](#) containing all information related to the evaluation process together with an evaluation report (providing reviews and an overall panel comment summarising the panel decision). The full evaluation results will consist of an Evaluation result letter, a letter from the ERC President and an Evaluation Report.

You will receive a notification from the F&T Portal as soon as the information is placed there. However, we advise you to check your [F&T Portal](#) regularly. To access it, log in and go to: My Proposal(s) and click on the 'Follow-up' button to access the 'Process documents'.

Outcome of the Step 1 evaluation of proposals submitted to the Call for Proposals ERC-2019-COG - PE9 - Proposal n° 865657 - QUANTUMGRAIN

Dear Dr. RIMOLA,

The ERC evaluation panels, composed of independent experts, have carried out their review of the proposals submitted to the ERC-2019-COG.

I am pleased to inform you that your proposal was retained following Step 1 of the evaluation and will now proceed to the second step.

For your information please find attached a document with initial information on the interview. Please note that the deadline to notify the ERCEA on issues related to your availability will be strictly enforced. Further details will be communicated to you within the next four weeks.

For any further inquiry concerning your step 2 interview, please do not hesitate to contact the ERC Executive Agency at: ERC-2019-COG-APPLICANTS@ec.europa.eu

This message should in no way be considered as a commitment of financial support by the European Union and does not prejudice the outcome of the Step 2 evaluation.

Kind regards,

Europa / Funding & Tenders Portal notification

Dear Coordinator,

Congratulations. Your proposal has reached the stage of Grant Agreement preparation. For any further

information about your project, please log on to the Funding & Tenders Portal > My Project(s) (<https://ec.europa.eu/info/funding-tenders/opportunities/portal/screen/myarea/projects>) and click on Actions > Manage Project. You will receive a separate notification when additional information for the Grant Agreement is required.

Regards,
Grant Management Services

AGRAÏMENTS

Computational BioNanoCat

(SGR)

- **Mariona Sodupe**
- **Luis Rodríguez-Santiago**
- **Xavier Solans-Monfort**

- **Agustí Lledós**
- **Gregori Ujaque**
- **Jean-Didier Maréchal**
- **Aleix Comas-Vives**



GreToBaPe

- **Piero Ugliengo (Univ. Torino)**
- **Cecilia Ceccarelli (Univ. Grenoble-Alpes)**
- **Nadia Balucani (Univ. Perugia)**
- **Marta Corno (Univ. Torino)**

- **Joan Enrique-Romero (UAB + Univ. Grenoble-Alpes)**
- **Stefano Ferrero (UAB)**
- **Aurèle Germain (Univ. Torino)**
- **Stefano Pantaleone (Univ. Torino)**



- **Berta Martínez-Bachs**
- **Eloy Peña**
- **Jessica Ferrero**
- ...

- **Josep M. Trigo-Rodríguez (ICE-CSIC)**
- **Jordi Llorca (ITE-UPC)**

