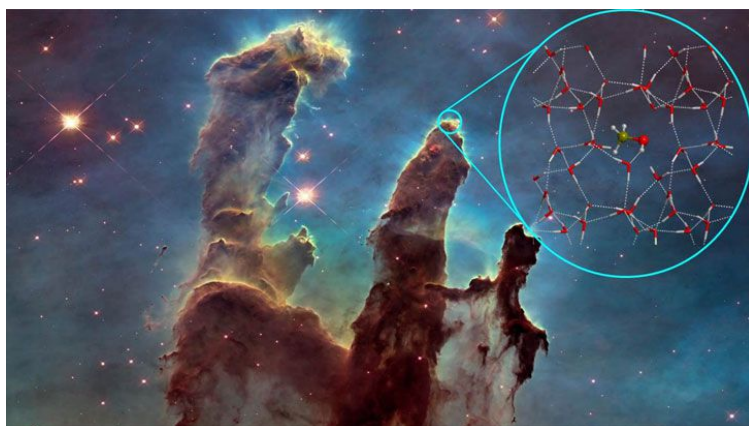


26/04/2016

## Simulacions computacionals justifiquen la presència de formaldehid i metanol a l'espai



El formaldehid i el metanol són les dues molècules basades en carboni més simples, i a partir d'elles es formen altres més complexes. Un estudi recent ha realitzat simulacions computacionals que han permès comprovar que la formació d'aquestes molècules es deu a la hidrogenació successiva a partir de la molècula més simple d'òxid de carboni, a partir de la qual s'afegirien àtoms d'hidrogen que generarien les molècules més grans. Aquest procés, dut a terme sobre la superfície dels grans de pols i gel espacials, justifica la seva abundància a l'espai.

El medi interestel·lar és tota aquella matèria que existeix entre les estrelles. El 90% de la massa d'aquesta matèria correspon a l'anomenada matèria fosca, que és un tipus de matèria hipotètica que no s'ha detectat mai directament, i per tant no se'n coneix pas la composició, però es tenen evidències indirectes de la seva presència. El 9% correspon a

matèria bariònica, matèria constituïda per barions, que són partícules tals com els neutrons i els protons. L'1% restant és matèria ordinària tal i com la coneixem, i consisteix en àtoms i molècules en fase gas i de matèria en estat sòlid en forma de grans de pols i gel. Aquesta matèria ordinària no es distribueix homogèniament en el medi interestel·lar sinó que es concentra en determinades zones formant núvols de pols, gel i gas. Un dels núvols interestel·lars més famosos és l'anomenat "pilars de la creació", que són tres columnes de gas i pols (veure figura) batejades amb aquest nom perquè els pilars es troben immersos en el procés de creació de noves estrelles.

Una de les línies de recerca més activa en el camp de l'astroquímica és aquella dedicada a conèixer les rutes per les quals les molècules interestel·lars s'han format, considerant les condicions extremes de baixa temperatura (entre  $-260$  i  $-150$  °C), de buit pràcticament absolut, i de densitats atòmiques molt baixes (entre 100 i 10.000 àtoms/cm<sup>3</sup>). Bona part de les molècules interestel·lars detectades (al voltant de 185 espècies diferents, que majoritàriament són molècules d'entre 2 i 12 àtoms, però també molècules molt més grans tals com el full·lerè, C<sub>60</sub>) sembla ser que s'han format a través de reaccions més o menys complexes en fase gas. No obstant, n'hi ha d'altres que requereixen la presència dels grans de pols i gel. Aquest seria el cas, per exemple, de dues de les molècules més rellevants en l'espai: l'hidrogen molecular (H<sub>2</sub>) i l'aigua (H<sub>2</sub>O). En ambdós casos, la gran abundància detectada només es pot explicar si s'han format en les superfícies dels grans de pols ja que els processos en fase gas són molt inefficients.

El formaldehid (H<sub>2</sub>CO) i el metanol (CH<sub>3</sub>OH) són dues molècules també de molta rellevància en astroquímica. Són les dues molècules orgàniques (molècules basades en carboni, C) més simples detectades, i són espècies de partida per a la formació d'altres molècules orgàniques més complexes. Per exemple, la seva dissociació pot donar lloc a espècies tals com CH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>O, HCO, OH, la combinació de les quals pot donar lloc a la formació de CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub> o CH<sub>3</sub>CHO, entre d'altres. Tant el formaldehid com el metanol són molècules relativament abundants en el medi interestel·lar, però la seva formació a través de rutes sintètiques en fase gas no justifica les seves abundàncies. Una de les vies per a les quals s'ha advocat recentment és la hidrogenació successiva del CO en superfícies de grans de gel seguint les següents etapes:  $\text{CO} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ .

En un estudi recent liderat pel grup de Bioinorgànica Computacional del Departament de Química de la UAB i en col·laboració amb investigadors de l'Observatori de Grenoble i dels departaments de química de les universitats de Torí i de Perugia, s'han realitzat simulacions computacionals per comprovar si la presència de formaldehid i metanol en el medi interestel·lar és degut a aquesta seqüència de reaccions. Una part d'aquestes simulacions computacionals s'ha basat en l'aplicació de mètodes de la química quàntica. Aquestes simulacions han permès fer una descripció detallada a escala atòmica i molecular de la reaccions d'hidrogenació del CO en superfícies de gels i, alhora, obtenir una sèrie de dades energètiques importants relacionades amb aquestes reaccions, tal com l'energia d'interacció del CO amb els gels i les barreres d'energia que s'han de superar per passar dels reactius als productes finals. L'altre bloc de simulacions fan referència a models numèrics astroquímics, que es basen en la resolució d'equacions cinètiques, i que en aquest treball s'han utilitzat per determinar l'abundància de formaldehid i metanol en el medi interestel·lar. Per a la resolució dels models astroquímics sempre és necessari introduir una sèrie de paràmetres físics (per exemple, temperatura, mida dels grans, densitats atòmiques) però també de dades energètiques, les quals, sovint, són poc acurades o esbiaixades, ja que provenen de mesures complexes o d'estimacions amb molt d'error acumulat. Un dels punts innovadors d'aquest estudi és que les dades energètiques obtingudes amb les simulacions

quàntiques s'han utilitzat com a paràmetres inicials en els models astroquímics. El resultat final que s'obtingué fou que les abundàncies de formaldehid i metanol predites pels models astroquímics estan molt d'acord amb les abundàncies determinades per les observacions astronòmiques, fet que no succeeix quan s'introdueixen altres paràmetres energètics. A més, com que les dades energètiques introduïdes provenen de les reaccions d'hidrogenació del CO sobre els grans de gel, el bon acord en les abundàncies indica que la formació de formaldehid i metanol interestel·lar té lloc a través d'aquests reaccions. El treball, a més, estableix una nova estratègia, combinar simulacions computacionals basades en mètodes de la química quàntica amb les basades amb models astroquímics, per estudiar l'origen i les vies de formació de les molècules presents en el medi interestel·lar.

**Albert Rimola**

Grup de Bioinorgànica Computacional

Departament de Química

[Albert.Rimola@uab.cat](mailto:Albert.Rimola@uab.cat)**Referències**[View low-bandwidth version](#)