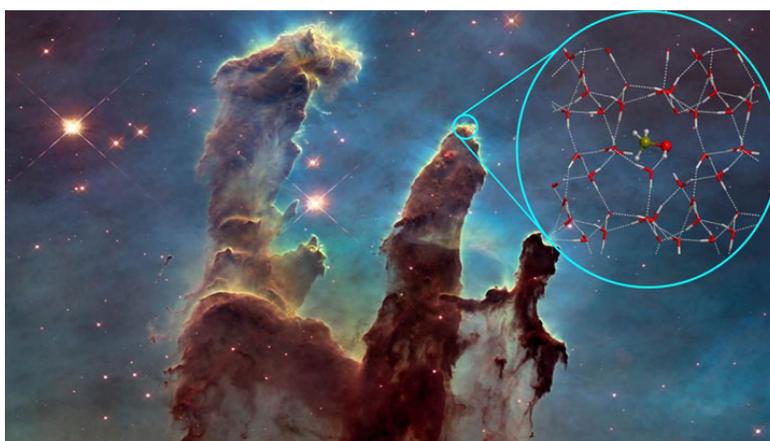


26/04/2016

Simulaciones computacionales justifican la presencia de formaldehído y etanol al espacio



El formaldehído y el metanol son las dos moléculas basadas en carbono más simples, y a partir de ellas se forman otras más complejas. Un estudio reciente ha realizado simulaciones computacionales que han permitido comprobar que la formación de estas moléculas se debe a la hidrogenación sucesiva a partir de la molécula más simple de óxido de carbono, a partir de la cual se añadirían átomos de hidrógeno que generarían las moléculas más grandes. Este proceso, llevado a cabo sobre la superficie de los granos de polvo y hielo espaciales, justifica su abundancia en el espacio.

El medio interestelar es toda aquella materia que existe entre las estrellas. El 90% de la masa de esta materia corresponde a la llamada materia oscura, que es un tipo de materia hipotética que no se ha detectado nunca directamente, y por tanto no se conoce su composición, pero se tienen evidencias indirectas de su presencia. El 9% corresponde a materia bariónica, materia constituida por bariones, que son partículas tales como los neutrones y los protones. El 1% restante es materia ordinaria tal y como la conocemos, y consiste en átomos y moléculas en fase gas y de materia en estado sólido en forma de granos de polvo y hielo. Esta materia ordinaria no se distribuye homogéneamente en el medio interestelar sino que se concentra en

determinadas zonas formando nubes de polvo, hielo y gas. Una de las nubes interestelares más famosas es la llamada “pilares de la creación”, que son tres columnas de gas y polvo (ver figura) bautizadas con este nombre porque los pilares se encuentran inmersos en el proceso de creación de nuevas estrellas.

Una de las líneas de investigación más activa en el campo de la astroquímica es aquella dedicada a conocer las rutas por las que las moléculas interestelares se han formado, considerando las condiciones extremas de baja temperatura (entre -260 y -150°C), de vacío prácticamente absoluto, y de densidades atómicas muy bajas (entre 100 y 10.000 átomos/ cm^3). Buena parte de las moléculas interestelares detectadas (alrededor de 185 especies diferentes, que en su mayoría son moléculas de entre 2 y 12 átomos, pero también moléculas mucho más grandes tales como el fullereno, C_{60}) parece ser que se han formado a través de reacciones más o menos complejas en fase gas. Sin embargo, hay otras que requieren la presencia de los granos de polvo y hielo. Este sería el caso, por ejemplo, de dos de las moléculas más relevantes en el espacio: el hidrógeno molecular (H_2) y el agua (H_2O). En ambos casos, la gran abundancia detectada sólo se puede explicar si se han formado en las superficies de los granos de polvo ya que los procesos en fase gas son muy ineficientes.

El formaldehído (H_2CO) y el metanol (CH_3OH) son dos moléculas también de mucha relevancia en astroquímica. Son las dos moléculas orgánicas (moléculas basadas en carbono, C) más simples detectadas, y son especies de partida para la formación de otras moléculas orgánicas más complejas. Por ejemplo, su disociación puede dar lugar a especies tales como CH_3 , CH_3O , HCO , OH , cuya combinación puede dar lugar a la formación de CH_3OCH_3 o CH_3CHO , entre otras. Tanto el formaldehído como el metanol son moléculas relativamente abundantes en el medio interestelar, pero su formación a través de rutas sintéticas en fase gas no justifica sus abundancias. Una de las vías para las que se ha abogado recientemente es la hidrogenación sucesiva del CO en superficies de granos de hielo siguiendo las siguientes etapas: $\text{CO} + \text{H} \rightarrow \text{HCO} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$.

En un estudio reciente liderado por el grupo de Química Bioinorgánica Computacional del Departamento de Química de la UAB y en colaboración con investigadores del Observatorio de Grenoble y de los departamentos de química de las universidades de Turín y de Perugia, se han realizado simulaciones computacionales para comprobar si la presencia de formaldehído y metanol en el medio interestelar se debe a esta secuencia de reacciones. Una parte de estas simulaciones computacionales se ha basado en la aplicación de métodos de la química cuántica. Estas simulaciones han permitido hacer una descripción detallada a escala atómica y molecular de las reacciones de hidrogenación del CO en superficies de hielos y, a la vez, obtener una serie de datos energéticos importantes relacionadas con estas reacciones, tal como la energía de interacción del CO con los hielos y las barreras de energía que se deben superar para pasar los reactivos a los productos finales. El otro bloque de simulaciones se refieren a modelos numéricos astroquímicos, que se basan en la resolución de ecuaciones cinéticas, y que en este trabajo se han utilizado para determinar la abundancia de formaldehído y metanol en el medio interestelar. Para la resolución de los modelos astroquímicos siempre es necesario introducir una serie de parámetros físicos (por ejemplo, temperatura, tamaño de los granos, densidades atómicas) pero también de datos energéticos, los cuales, a menudo, son poco precisos o sesgados, ya que provienen de medidas complejas o de estimaciones con mucho error acumulado. Uno de los puntos innovadores de este estudio es que los datos energéticos obtenidos con las simulaciones cuánticas se han utilizado como parámetros iniciales en los

modelos astroquímicos. El resultado final que se obtuvo fue que las abundancias de formaldehído y metanol predichas por los modelos astroquímicos están muy de acuerdo con las abundancias determinadas por las observaciones astronómicas, lo que no sucede cuando se introducen otros parámetros energéticos. Además, dado que los datos energéticos introducidos provienen de las reacciones de hidrogenación del CO sobre los granos de hielo, el buen acuerdo en las abundancias indica que la formación de formaldehído y metanol interestelar tiene lugar a través de estas reacciones. El trabajo, además, establece una nueva estrategia, combinar simulaciones computacionales basadas en métodos de la química cuántica con las basadas en modelos astroquímicos, para estudiar el origen y las vías de formación de las moléculas presentes en el medio interestelar.

Albert Rimola

Grupo de Bioinorgánica Computacional

Departamento de Química

Albert.Rimola@uab.cat**Referencias**

Rimola, Albert; Taquet, Vianney; Ugliengo, Piero; Balucani, Nadia; Ceccarelli, Cecilia. [Combined quantum chemical and modeling study of CO hydrogenation on water ice](#). *Astronomy & Astrophysics*. 2014, vol. 572, art. A70. doi: 10.1051/0004-6361/201424046.

[View low-bandwidth version](#)