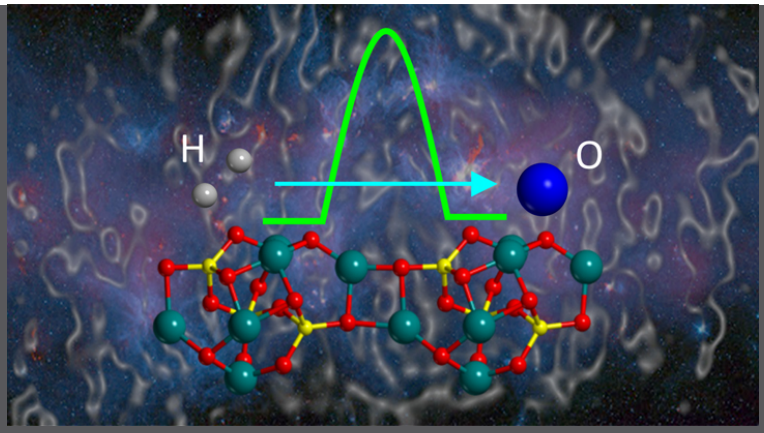
UABDIVULGA
BARCELONA RECERCA I INNOVACIÓ

25/10/2022

Simulaciones basadas en la mecánica cuántica ilustran la formación de agua en el medio interestelar



Un equipo de investigación liderado por la UAB ha conseguido formar moléculas de H_2O mediante reacciones que suceden en la materia interestelar aplicando simulaciones computacionales basadas en métodos de la química cuántica. Su trabajo avanza en el estudio sobre el origen del agua interestelar –indispensable para la vida en entornos astrofísicos–, una cuestión sobre la que todavía queda mucho por desvelar.

La materia interestelar es la materia presente en las regiones entre estrellas. Su existencia se evidencia mediante observaciones astronómicas realizadas con telescopios. Esta materia no está distribuida uniformemente, sino que se encuentra agrupada constituyendo nubes, que son la cuna de nuevas estrellas. A partir de las observaciones se sabe que la materia en las nubes se encuentra en estado gaseoso y en estado sólido. El estado líquido no existe, dadas las condiciones de muy bajas temperatura y presión.

La materia en fase gas se conforma de moléculas discretas. Estas pueden ser simples (¡y fundamentales!) como el H_2, el CO y el H_2O, o más complejas, como el CH_3CHO o el NH_2CHO. En cuanto a la materia en estado sólido, básicamente se encuentran granos de polvo de silicatos, que, eventualmente, pueden estar recubiertos de hielos, predominantemente de agua.

Viendo esta distribución de estados de la materia es lógico pensar, pues, que hay dos vías por las que se forman las moléculas interestelares: reacciones que suceden en fase gas y reacciones que suceden en las superficies de los granos de polvo. Muchos de los compuestos gaseosos ciertamente se forman mediante reacciones que tienen lugar en fase gas, pero no todos. En algunas reacciones, la presencia de los granos de polvo es esencial para que sucedan.

EL agua (H_2O) es una molécula de suma relevancia, obviamente a nivel biológico, pero también en astrofísica, puesto que es la fase sólida más abundante en el espacio y es un prerrequisito indispensable para amparar vida en entornos astrofísicos. Por tanto, saber cómo se forma y se distribuye en el espacio es de importancia capital. Formar H_2O mediante reacciones en fase gas es muy ineficiente, así que la explicación tiene que venir a partir de reacciones que suceden en las superficies de los granos de polvo interestelar. Y esto es lo que se ha demostrado mediante simulaciones computacionales basadas en métodos de la química cuántica.

En un trabajo de colaboración entre diferentes grupos de investigación internacionales liderados por la UAB, se ha simulado la reacción de formación de la H_2O hielo en superficies de silicatos de tipos Mg_2SiO_4 a partir de la reacción de un átomo de O con dos de H. Las simulaciones indican que el O queda fuertemente unido e inmóvil a un átomo de Mg del silicato. Los átomos de H también quedan unidos a la superficie del silicato, pero estos, por el contrario, pueden moverse y acercarse al átomo de O gracias a un fenómeno cuántico llamado efecto túnel. Este efecto permite que, a pesar de que la movilidad de los átomos de H en la superficies tienen una barrera de energía elevada, estos puedan moverse, puesto que en lugar de superar las barreras las atraviesan como si fueran por un túnel. Gracias a esta movilidad, los átomos de H se encuentran con la O y reaccionan para formar H_2O.

El trabajo también es de relevancia porque explica las primeras etapas de formación de los hielos. Con las simulaciones se evidencia que los primeros pasos de la formación de los hielos dan a partir de reacciones que suceden *in situ* en las superficies de los núcleos, en vez de que el agua se forme en fase gas y se adhiera a las superficies de los granos.

Obviamente, el problema de la formación del H_2O interestelar no está solucionado. Hay otras propuestas que también podrían explicar la presencia de las grandes cantidades de agua helada en las nubes interestelares, como por ejemplo la reacción de O con H_2, como también conocer el papel exacto de las superficies. Todavía hay un campo amplio para desvelar definitivamente un aspecto de interés fundamental omo el origen del agua interestelar.

Germán Molpeceres(1), Albert Rimola (2), Cecilia Ceccarelli (3), Johannes Kästner (4), Piero Ugliengo (5), Belén Maté (1)
(1) Instituto de Estructura de la Materia, IEM-CSIC
(2) Departamento de Química, Universitat Autònoma de Barcelona
(3) Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble (IPAG), Univ. Grenoble Alpes, CNRS
(4) Institute for Theoretical Chemistry, University of Stuttgart
(5) Dipartimento di Chimica and Nanostructured Interfaces and Surfaces (NIS), Università degli Studi di Torino
Albert.Rimola@uab.cat

Referencias

Germán Molpeceres, Albert Rimola, Cecilia Ceccarelli, Johannes Kästner, Piero Ugliengo, Belén Maté, **Silicate-mediated interstellar water formation: a theoretical study**, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, https://doi.org/10.1093/mnras/sty3024

View low-bandwidth version