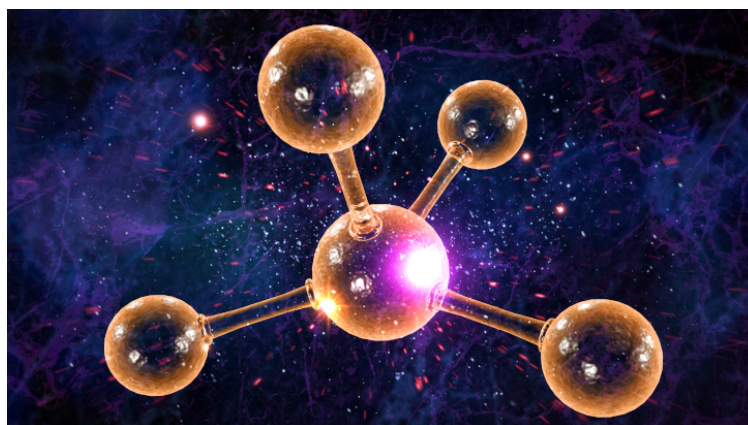


Divulga UAB

Revista de difusió de la recerca de la
Universitat Autònoma de Barcelona

17/04/2026

Com s'adhereixen les molècules orgàniques al gel còsmic? Nous apropaments a la química interestel·lar



Un nou estudi, amb participació del grup de recerca QuantumGrain del Departament de Química de la UAB, mostra com s'uneixen les molècules orgàniques al gel dels grans de pols de l'espai. La recerca posa de manifest que l'adhesió és més alta del que es pensava, cosa que afecta com aquestes molècules reaccionen, es desenganxen i acaben formant part dels futurs planetes.

iStock/Ezumelimages

Les molècules orgàniques complexes (iCOMs) —molècules amb sis o més àtoms que inclouen el carboni— són peces clau en la química del medi interestel·lar. Inclouen alcohols, aldehids, nitrils, àcids petits i altres espècies reactives que participen en vies que condueixen a molècules prebiòtiques (precursors de la vida). Les observacions han demostrat que les iCOMs estan presents en núvols moleculars freds, protoestrelles i discs que formen planetes, malgrat les condicions extremes (fred intens i radiació) que d'altra manera haurien de limitar la seva mobilitat i supervivència. Una qüestió central en l'astroquímica és com aquestes molècules es formen, com es mantenen estables i com passen entre les fases sòlides i gasoses en aquests ambients.

Un factor crucial que regeix el seu comportament és l'energia d'adehsió: la força amb la qual

una molècula s'adhereix als mantells gelats que cobreixen els grans de pols interestel·lar. Aquestes superfícies de gel, compostes principalment d'aigua —en forma amorfa o cristal·lina—, proporcionen tant un substrat químic com un reservori físic per a les iCOMs. Les energies d'adhesió determinen si una molècula roman congelada sobre el gra de pols o es desorbeix en el gas, influint així en les abundàncies observables. Fins ara, molts valors utilitzats habitualment es basen en clústers simplificats de molècules d'aigua, que sovint subestimen la veritable força de les interaccions molècula-gel.

El nostre estudi aborda aquesta limitació mitjançant l'avaluació d'energies d'adhesió de 19 iCOMs representatives usant models atomístics periòdics realistes de gel cristal·lí i amorf. Aquests models capturen les xarxes esteses d'enllaços d'hidrogen característiques dels mantells de gel astrofísics, cosa que permet una avaluació més precisa de la força de cada molècula.

 Gràfics dels resultats de l'estudi.

Les energies d'adhesió de diverses iCOMs han estat avaluades en mantells de gel d'aigua cristal·lina i amorfa presents en grans de pols interestel·lar. Les comparacions amb la literatura anterior mostren que els valors són molt més alts i, per tant, afecten significativament la modelització astroquímica i l'evolució molecular del medi interestel·lar.

Els resultats revelen energies d'adhesió generalment més altes en la majoria d'iCOMs en comparació amb les estimacions basades en els clústers simplificats. Això suggereix que les iCOMs es queden retingudes amb més fermesa en grans de pols gelats del que s'havia suposat anteriorment. En els núvols freds i densos, aquesta adherència més forta pot prolongar el temps de residència de les molècules a la superfície del gra, proporcionant més oportunitat per a les reaccions de la superfície. En ambients més càlids o dinàmics com els discs protoplanetaris, les energies d'adhesió més altes determinen quines espècies poden incorporar-se durant la formació de planetes.

Un resultat notable és l'àmplia distribució d'energies d'adhesió observades en el gel amorf. La seva topologia irregular de superfície crea diversos llocs d'adsorció amb fortaleeses diferents, cosa que significa que el comportament molecular no pot ser capturat per un únic valor. Aquesta variabilitat té implicacions importants per als models numèrics astroquímics que simulen processos de difusió, reacció i desorció en superfícies de gra.

En general, l'estudi posa de manifest la necessitat d'actualitzar les bases de dades astroquímiques amb valors d'energia d'adhesió més precises i, quan sigui possible, distribucions en lloc de nombres simples. Incorporar aquests resultats a models numèrics que inclouen xarxes de processos químics millorarà les prediccions de l'evolució de les iCOM i ajudarà a interpretar observacions cada vegada més detallades dels telescopis moderns, alhora que perfeccionarà la nostra comprensió de com sorgeix la complexitat molecular en el medi interestel·lar.

Harjasnoor Kakkar

Departament de Química (QuantumGrain group)

Universitat Autònoma de Barcelona

Harjasnoor.Kakkar@uab.cat

Referències

Harjasnoor Kakkar, Berta Martínez-Bachs, Cecilia Ceccarelli, Piero Ugliengo, and Albert Rimola, **Binding Energies of Interstellar Complex Organic Molecules on Water Ice**

Surfaces: A Quantum Chemical Investigation, *Astrophysical Journal*, 2025, 993, 184.
<https://doi.org/10.3847/1538-4357/ae064a>

[View low-bandwidth version](#)