



# Astroquímica

Astronomía, Química. ¿Que mas?

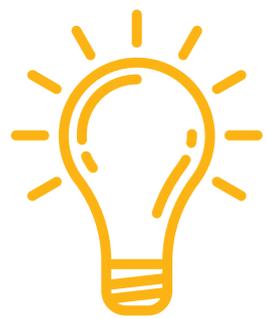
**Stefano Bovino**, Grupo de Astroquímica  
Departamento de Astronomía  
Universidad de Concepción



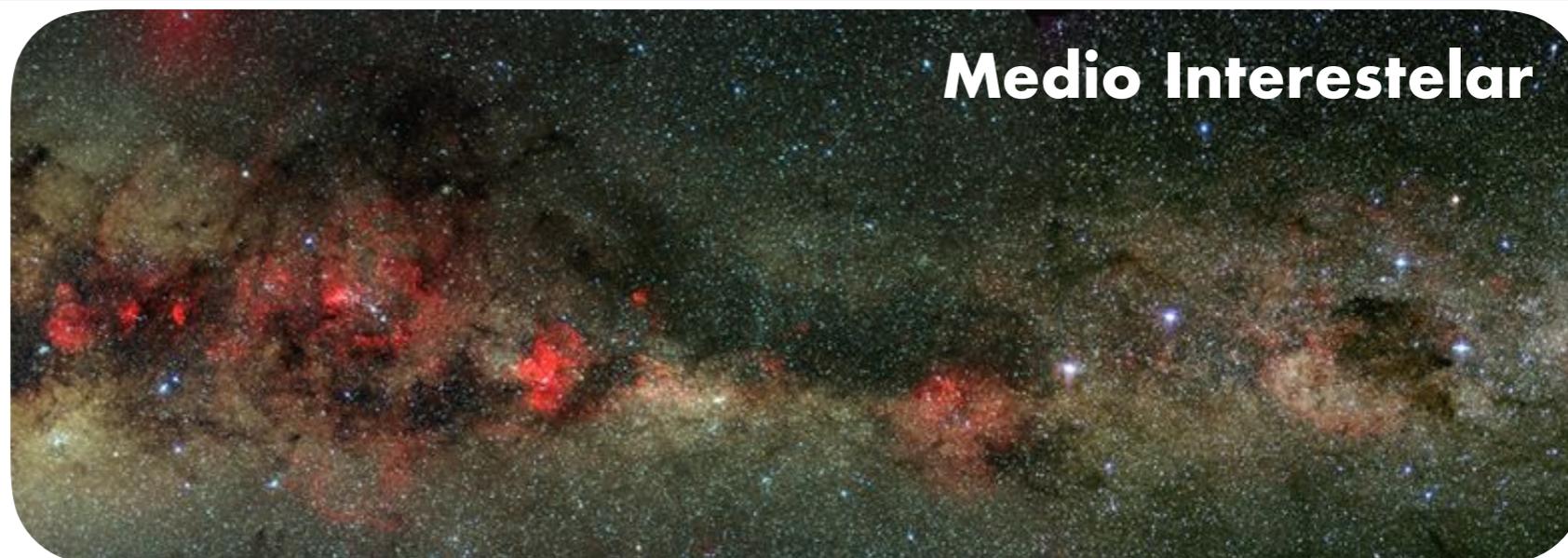
# ¿QUE ES LA ASTROQUÍMICA?

**EL ESTUDIO DE LA FORMACIÓN, DESTRUCCIÓN Y EXCITACIÓN DE MOLÉCULAS EN ENTORNOS ASTRONÓMICOS Y SU INFLUENCIA EN LA ESTRUCTURA, DINÁMICA Y EVOLUCIÓN DE LOS OBJETOS ASTRONÓMICOS.**

Alex Dalgarno (2008)



# COSAS QUE DEBES SABER



**Densidad numéricas:  
en moléculas per volumen ( $\text{cm}^{-3}$ )**

$10^4 \text{ cm}^{-3} = 1$  partícula por cada 10 litros

## Temperatura en Kelvin (K)

	Kelvin	Celsius	Fahrenheit
Punto de Ebullición H <sub>2</sub> O	373.15	100	212
Temperatura Corporal	310.15	37	96.6
Punto Congelamiento H <sub>2</sub> O	273.15	0	32
Cero Absoluto	0	-273.15	-459.67

# Química bajo diferentes condiciones

---

Densidad:  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Temperatura: 0-30 °C



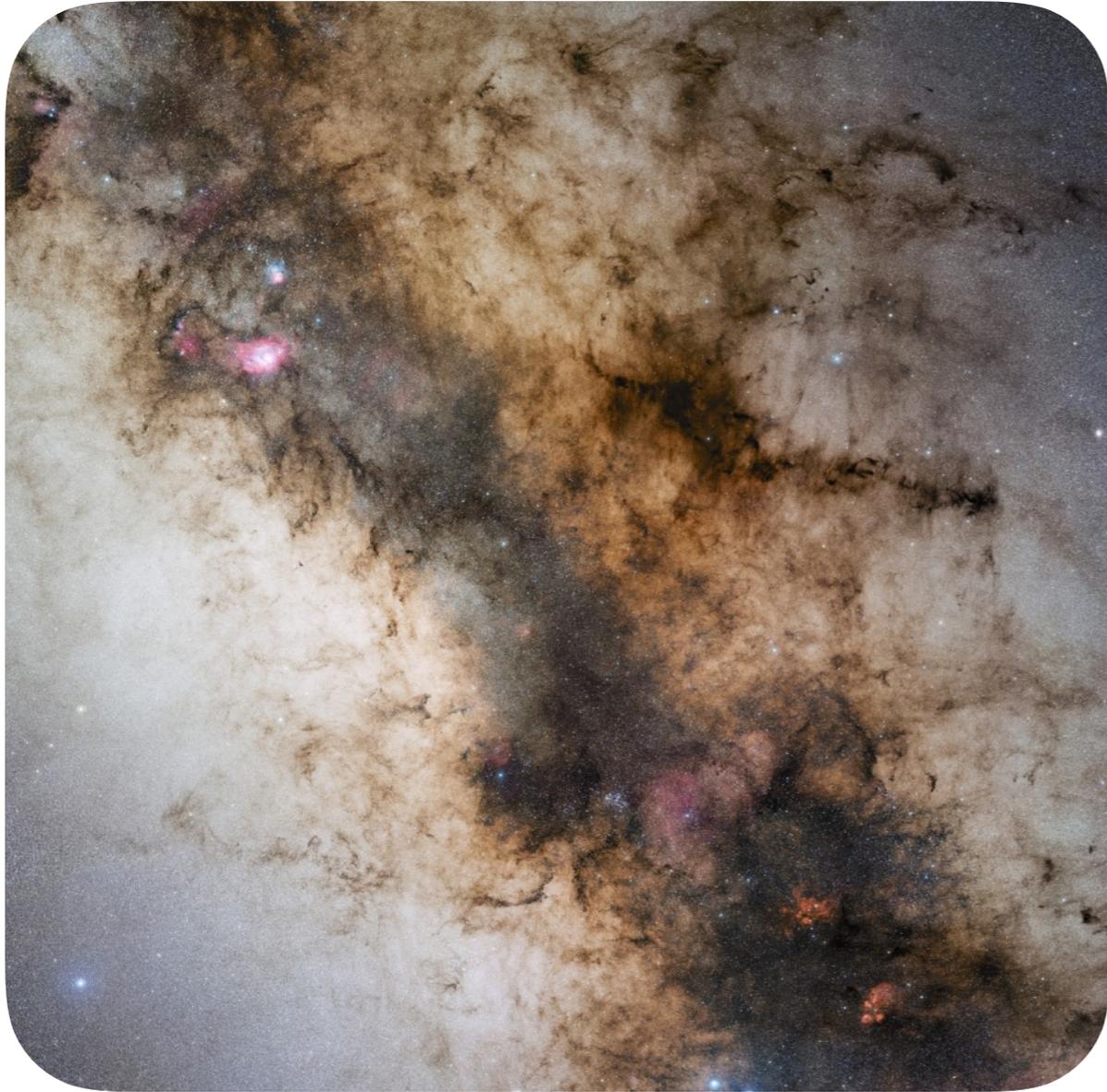
Densidad:  $10^4\text{-}10^6 \text{ cm}^{-3}$

Temperatura: 10 K (-263 °C)



# Química bajo diferentes condiciones

---

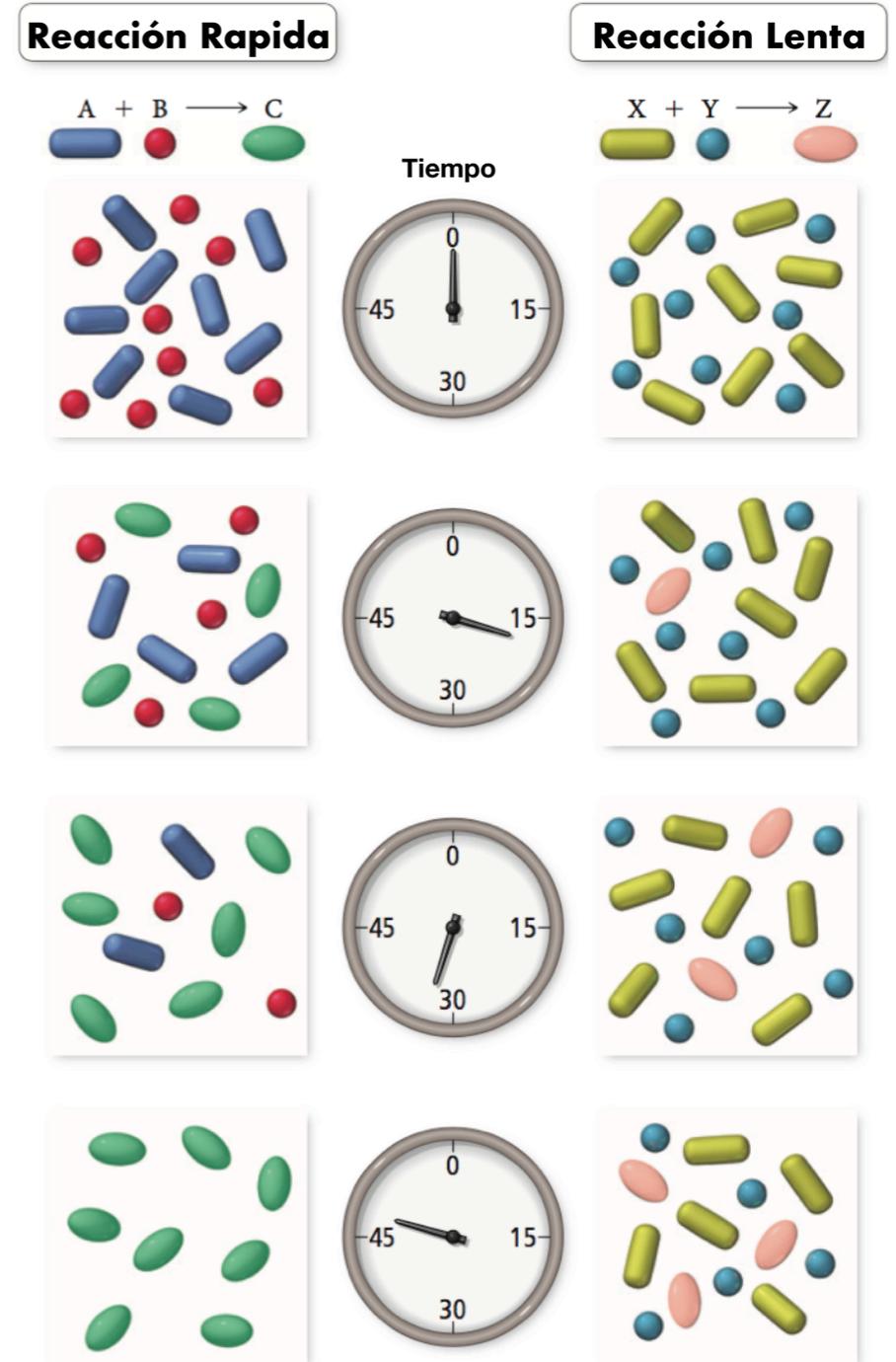


- Condiciones extremas (temperaturas pueden llegar también a  $10^6$  °C)
- Hay radiación y rayos cósmicos que destruyen especies químicas



# Química bajo diferentes condiciones

- Las condiciones químicas y físicas tienen un efecto sobre la velocidad de una reacción.



# Química bajo diferentes condiciones

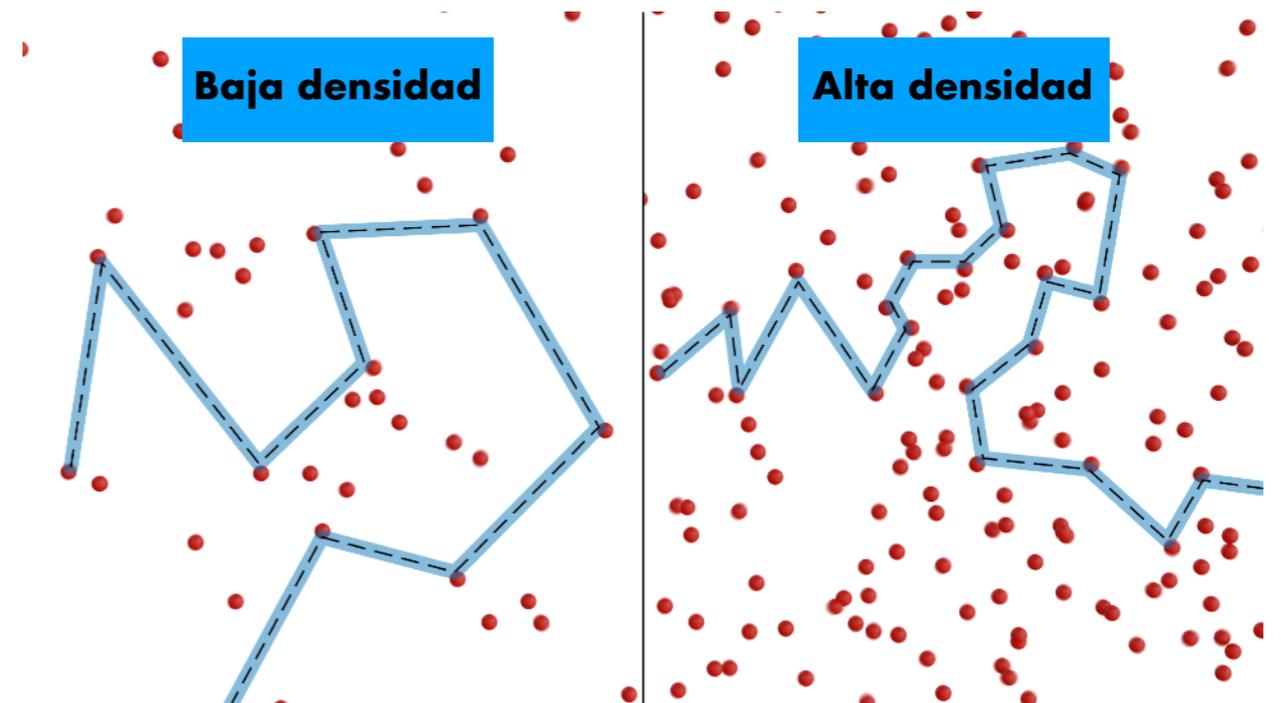
- Las condiciones químicas y físicas tienen un efecto sobre la velocidad de una reacción.

Tiempo de colisión en años:

$$t_{col} \approx \frac{4000}{n\sqrt{T}}$$

$$n = 1 \text{ cm}^{-3} \quad T = 100 \text{ K}$$

$$n = 10^4 \text{ cm}^{-3} \quad T = 10 \text{ K}$$



$$t_{col} = 400 \text{ años}$$

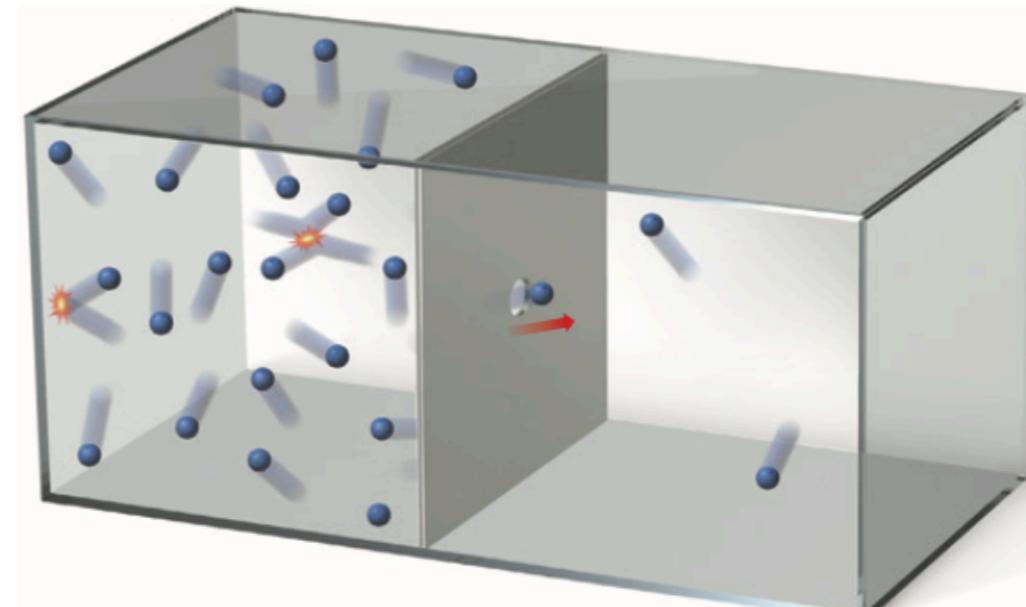
$$t_{col} = 0.12 \text{ años} \longrightarrow 1 \text{ mes}$$

# Química bajo diferentes condiciones

El medio interestelar es muy diluido

$$t_{col} = 400 \text{ años}$$

$$t_{col} = 0.12 \text{ años} \longrightarrow 1 \text{ mes}$$



El tiempo para formar una estrella es **1 millón de años**



El tiempo para formar embriones planetarios hasta **10 millones de años**



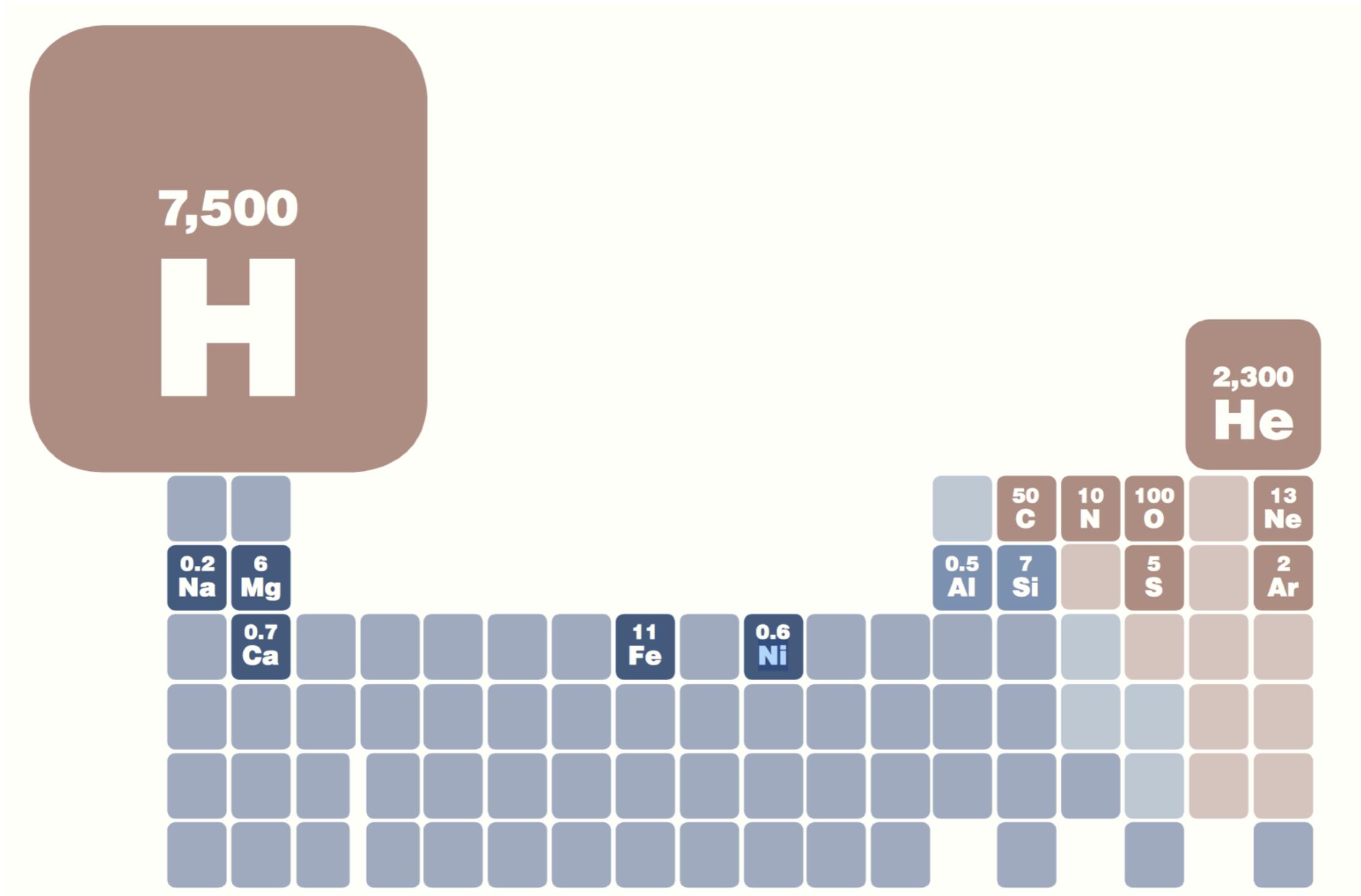
# Química bajo diferentes condiciones

The image displays a periodic table of elements. The main table is a grid of colored boxes, each containing an atomic number and a chemical symbol. The colors are: light blue for noble gases (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn), dark blue for most other elements, and brown for hydrogen (H), helium (He), carbon (C), nitrogen (N), oxygen (O), fluorine (F), iodine (I), and astatine (At). A dashed line connects the bottom of the main table to a separate block of elements, the lanthanide and actinide series, which are arranged in two rows of 14 elements each. The lanthanide series (row 1) includes elements 58 (Ce) to 71 (Lu). The actinide series (row 2) includes elements 90 (Th) to 103 (Lr).

1 H																	2 He	
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	114		116		118		
			58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu		
			90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr		

# Química bajo diferentes condiciones

---



# Para resumir

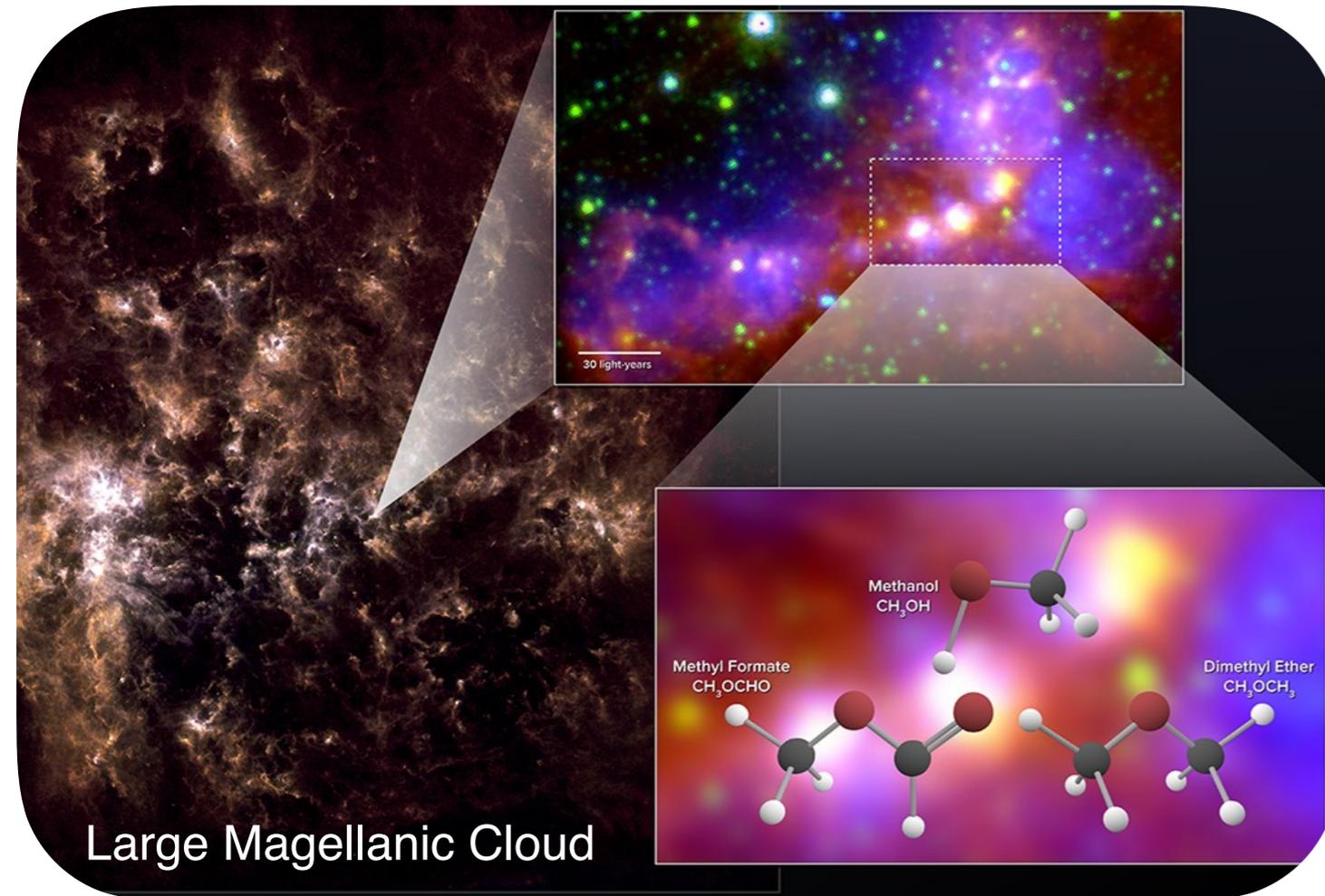
---

- En el medio interestelar hay condiciones extremas de densidad y temperatura
- Además hay radiación (fotones y rayos cósmicos)
- Procesos químicos son lentos

**A pesar de todo eso en el ISM tenemos un alto grado de complejidad**



# Moléculas orgánicas complejas

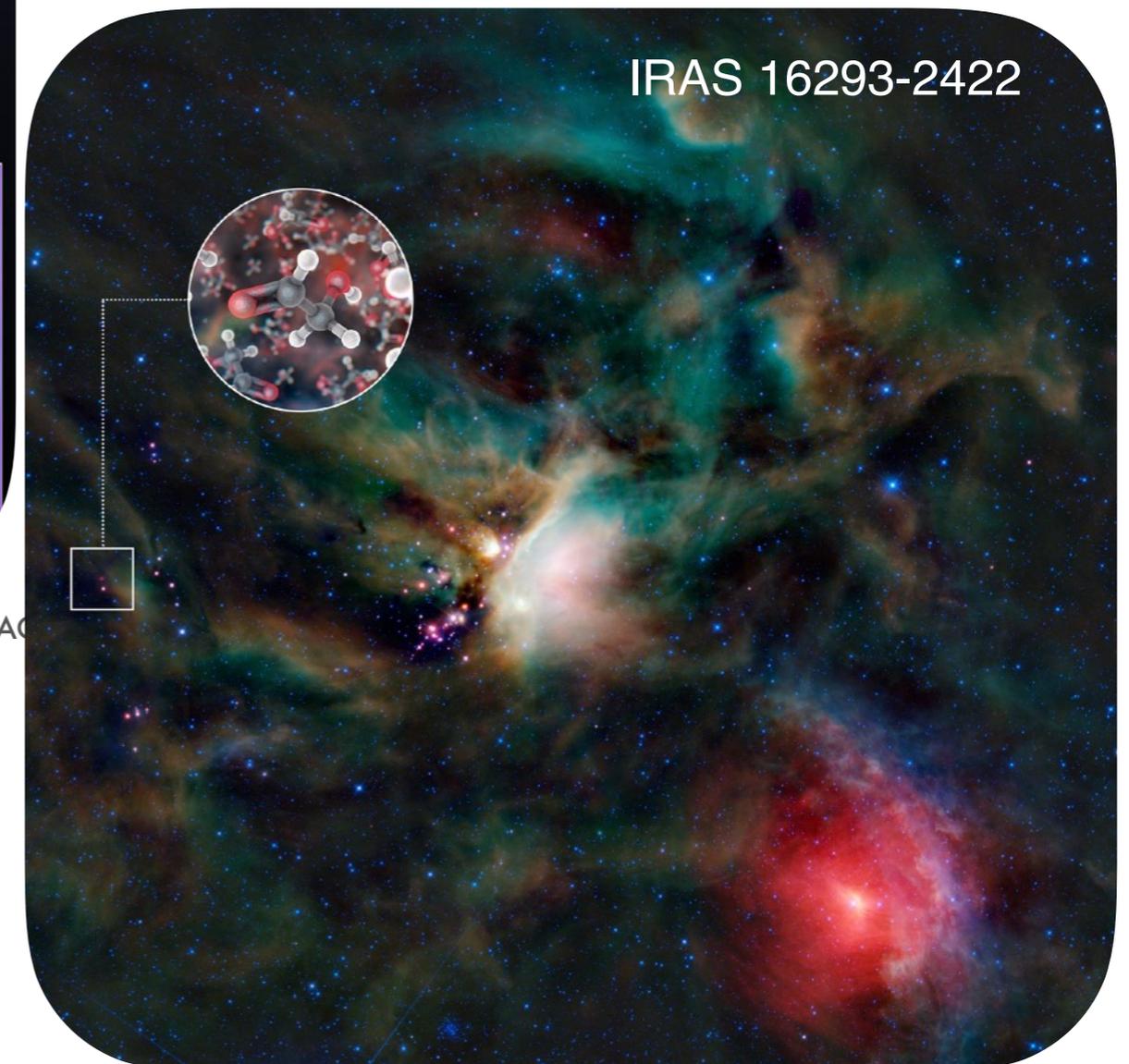


Large Magellanic Cloud

Credit: NRAO/AUI/NSF; ALMA (ESO/NAOJ/NRAO); Herschel/ESA; NASA/JPL-Caltech; NOAO

- Éter dimetílico
- Metanol
- Formiato de metilo

Glicolaldehído observados cerca de una estrella símil a nuestro Sol (la más simple molécula relacionada al azúcar)

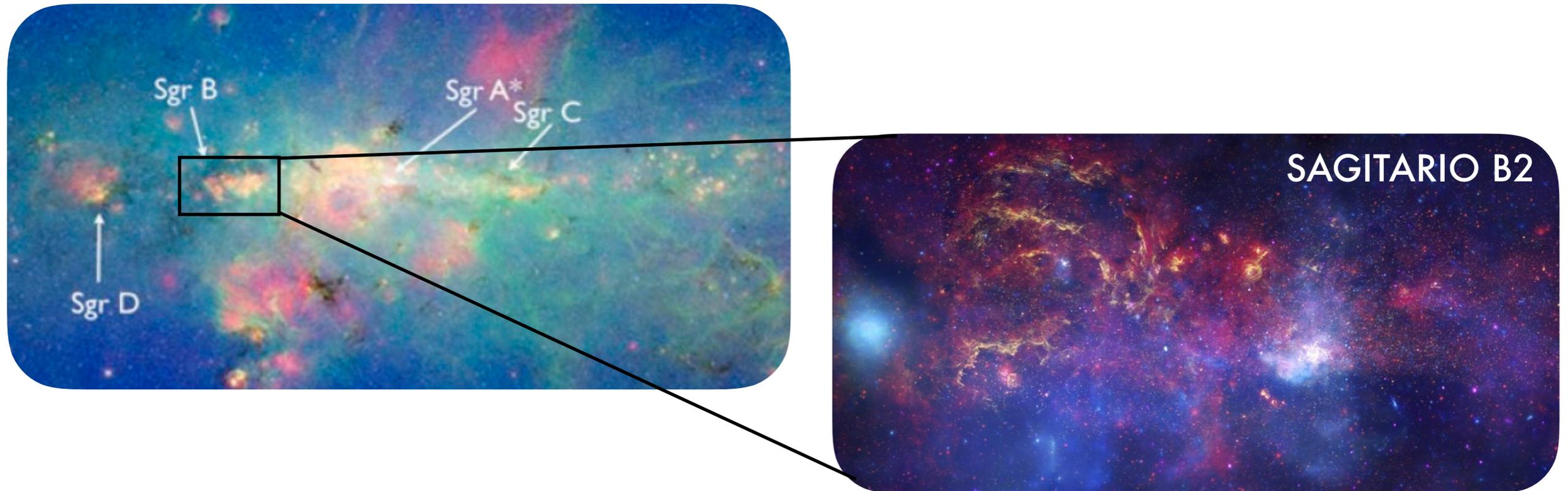


IRAS 16293-2422

Credit: ALMA (ESO/NAOJ/NRAO)/L. Calçada (ESO) & NASA/JPL-Caltech/WISE Team

# Una nube de alcohol más grande que el sistema solar

---

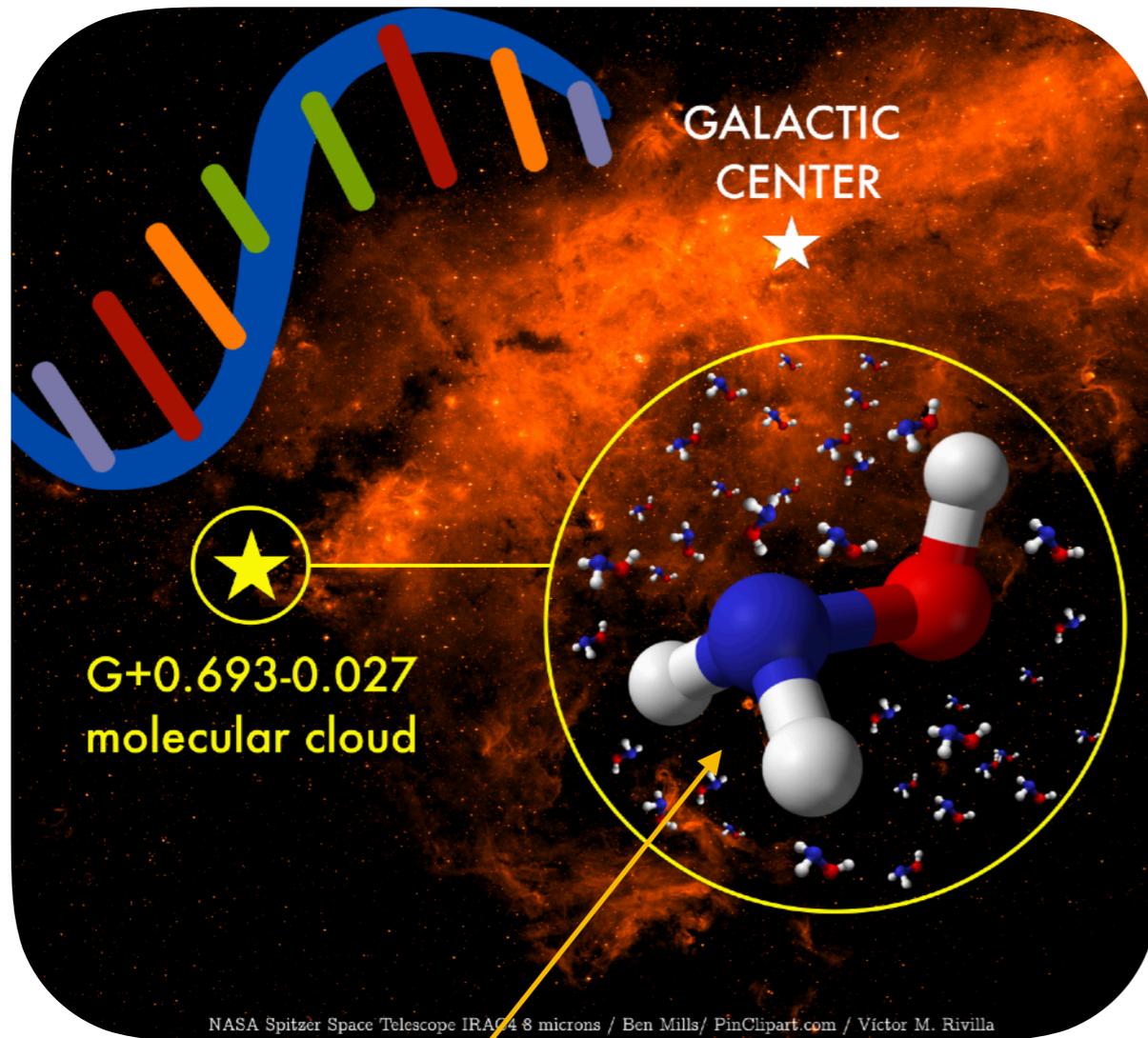


La nube de alcohol es tan grande que mide más de 460.000 millones de kilómetros

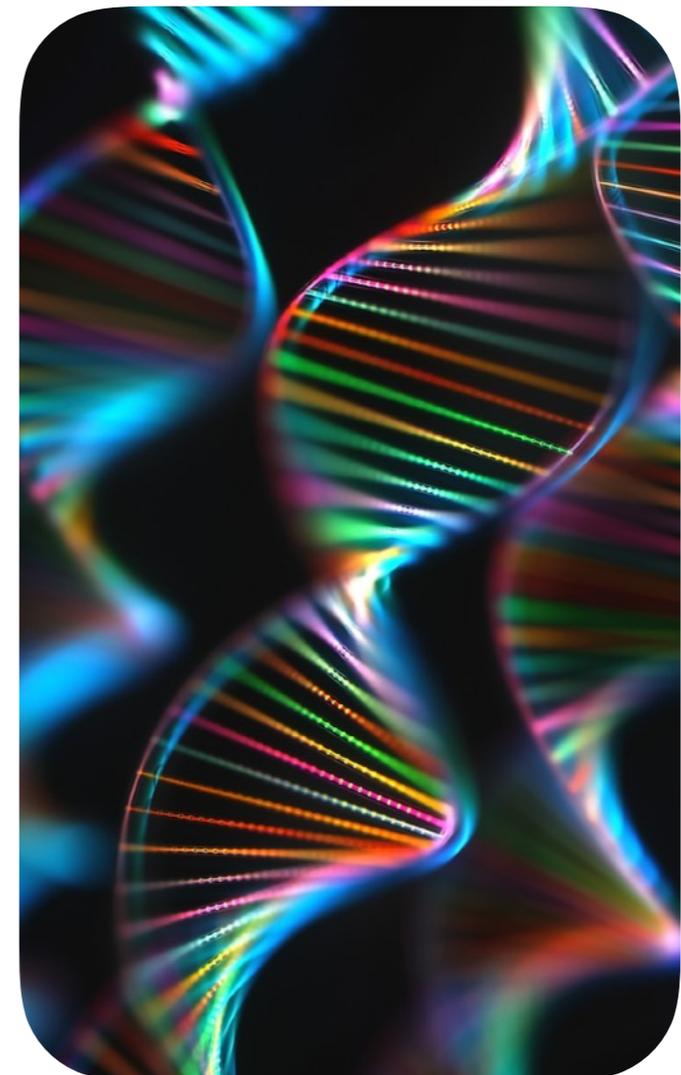
Tanto alcohol etílico que para poder "beber" toda la nube, toda la humanidad debería unirse en una fiesta interminable en la que beber 300 pintas al día durante un billón de años

*El centro de nuestra galaxia sabe a frambuesa (formiato de etilo)*

# Moléculas orgánicas complejas



RNA



- Hidroxilamina
- Glicolaldehído
- Urea
- Cianamida
- Cianoacetileno

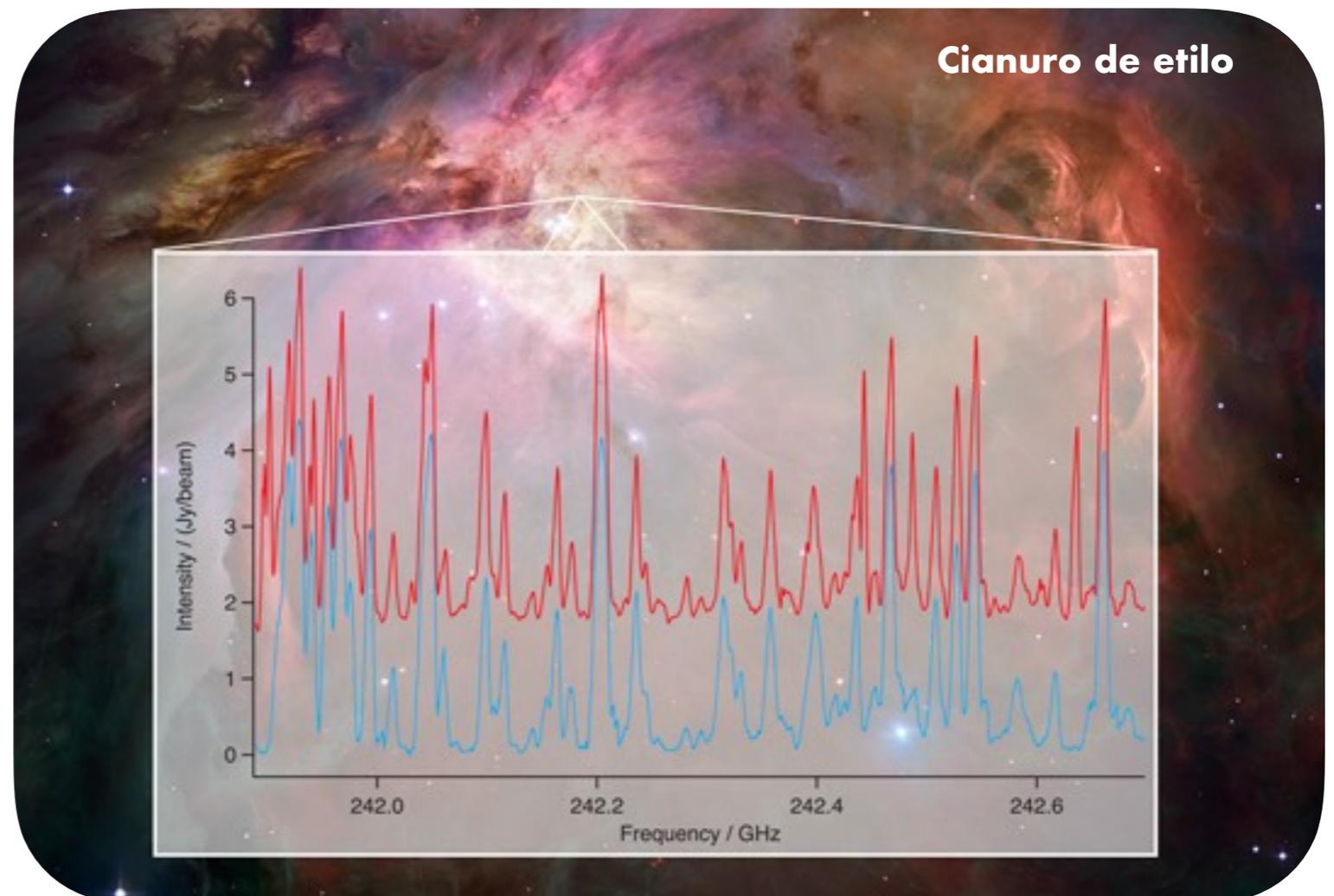
# ¿Como identificamos las moléculas?

- Cada espectro de emisión es único para cada elemento, podemos pensar en cada uno de estos espectros como su "huella digital"
- Cada elemento químico absorbe, emite y refleja la luz de una manera muy característica



**Rojo:** espectro observado (ALMA)

**Blue:** espectro medido (Lab)



# El Universo molecular: un poco de historia

## El siglo XX

1937

CH: Swings & Rosenfeld

1940

CH, CN: McKellar

1941

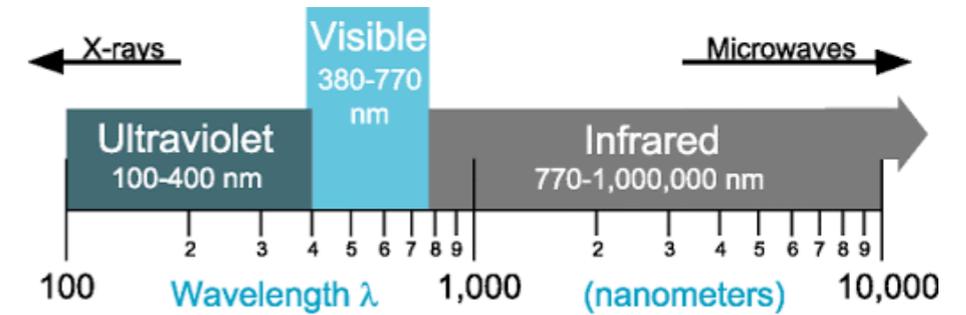
CH<sup>+</sup>: Douglas & Herzberg

1968

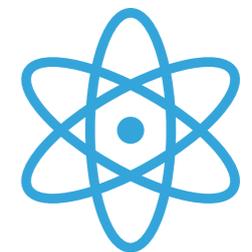
NH<sub>3</sub>: Cheung, Townes @ 1 cm (ondas radio)

1963

OH: @ 18 cm by Weinreb et al.

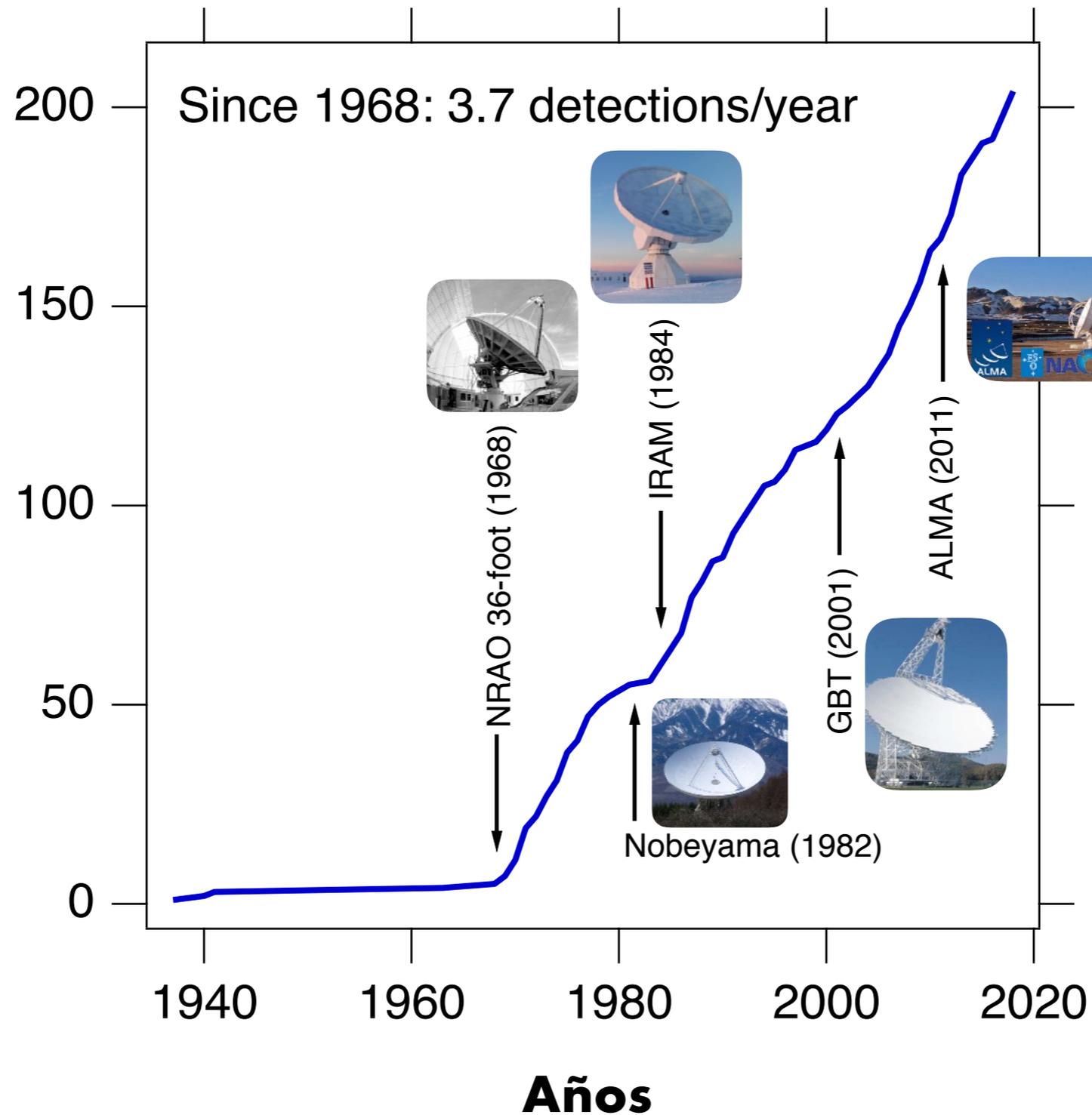


**Líneas espectrales en banda óptica (entre 300 GHz y 3000 THz)**



# El Universo molecular

Numero cumulativo de moléculas observadas



# El Universo molecular: '80



Sutton+1985, Blake+1986, Blake+1987

1987ApJ...315..621B

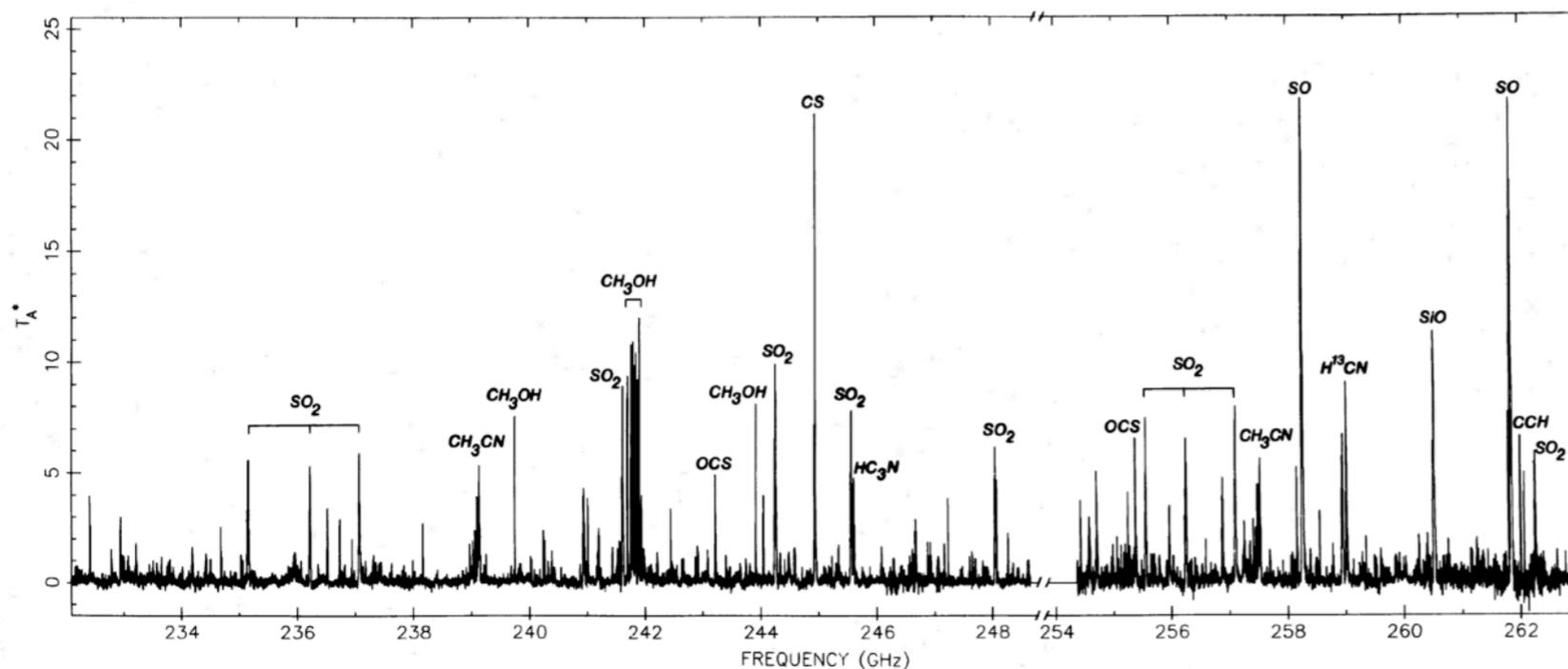
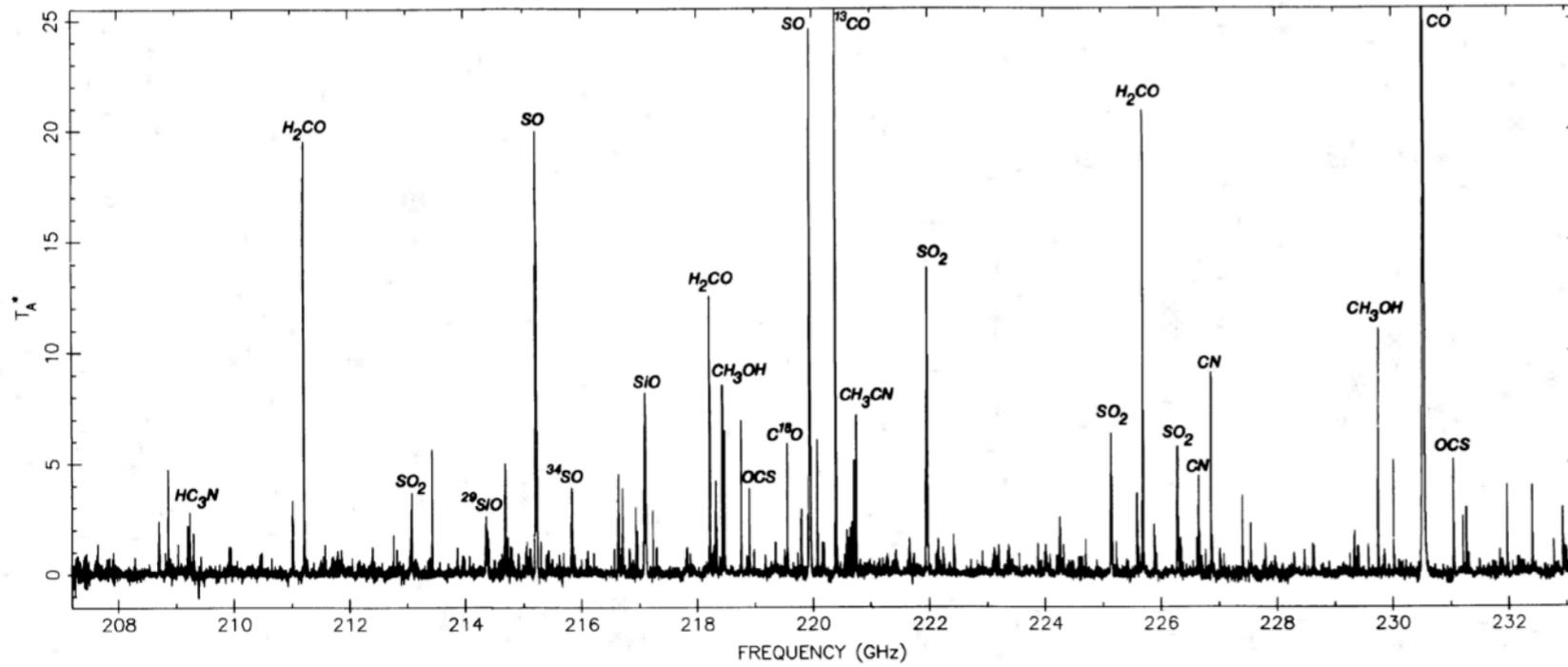
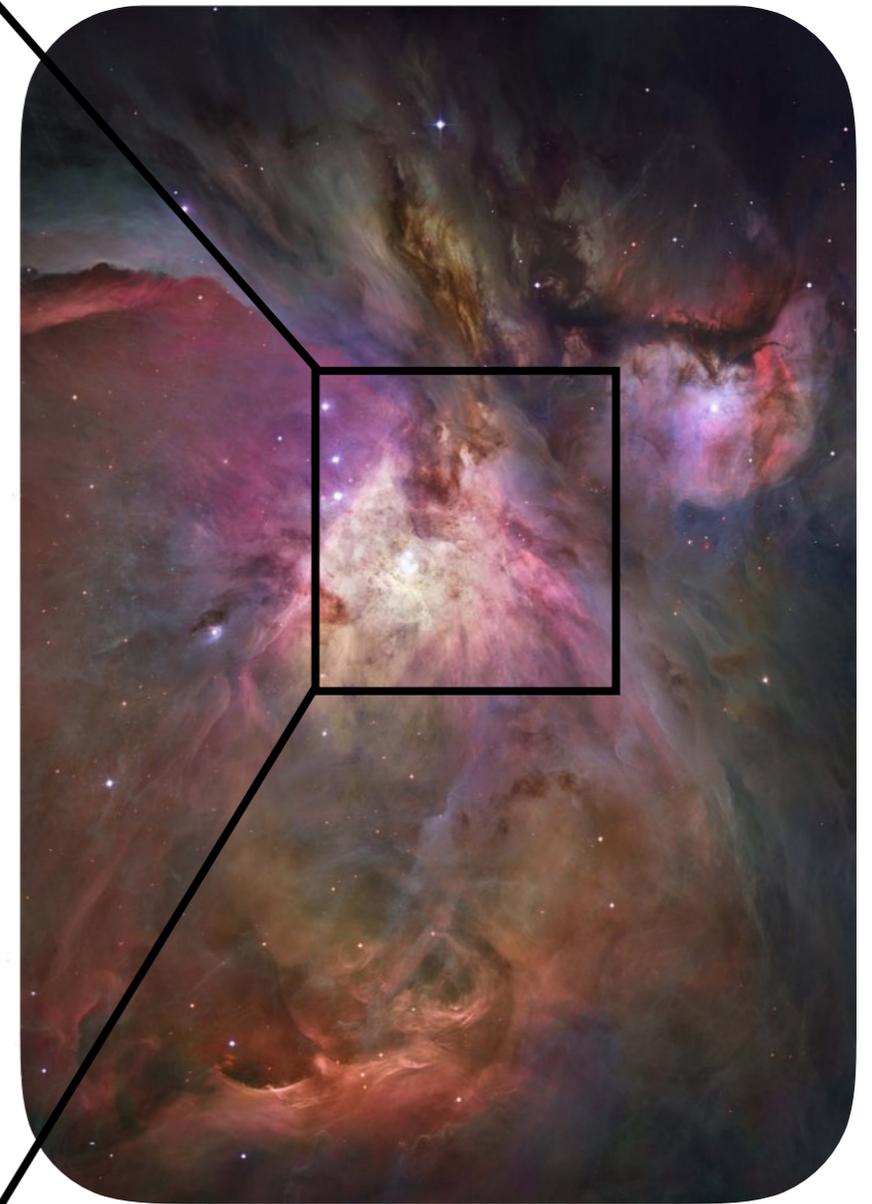
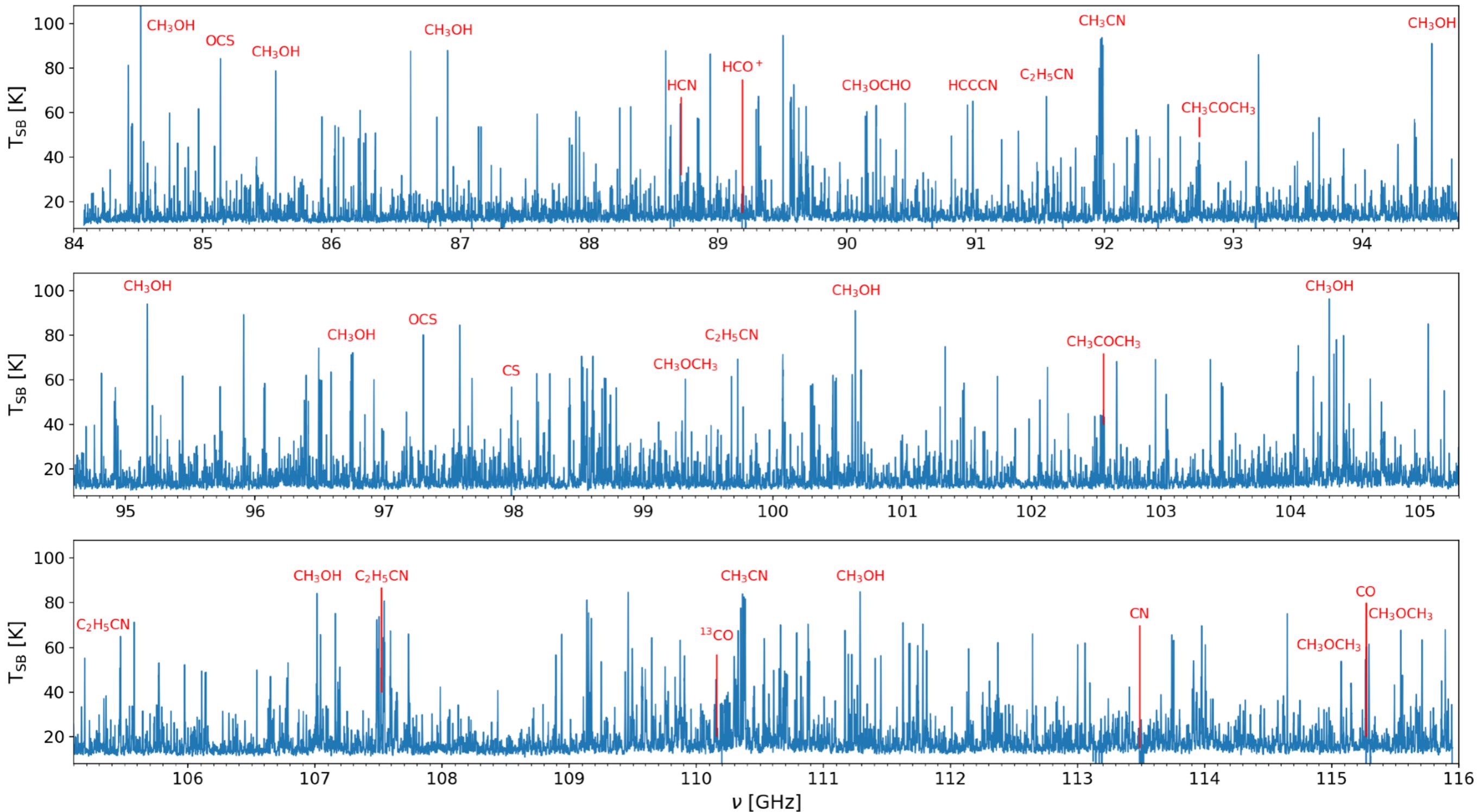


FIG. 1.—Compressed view of the OVRO spectral line survey of OMC-1



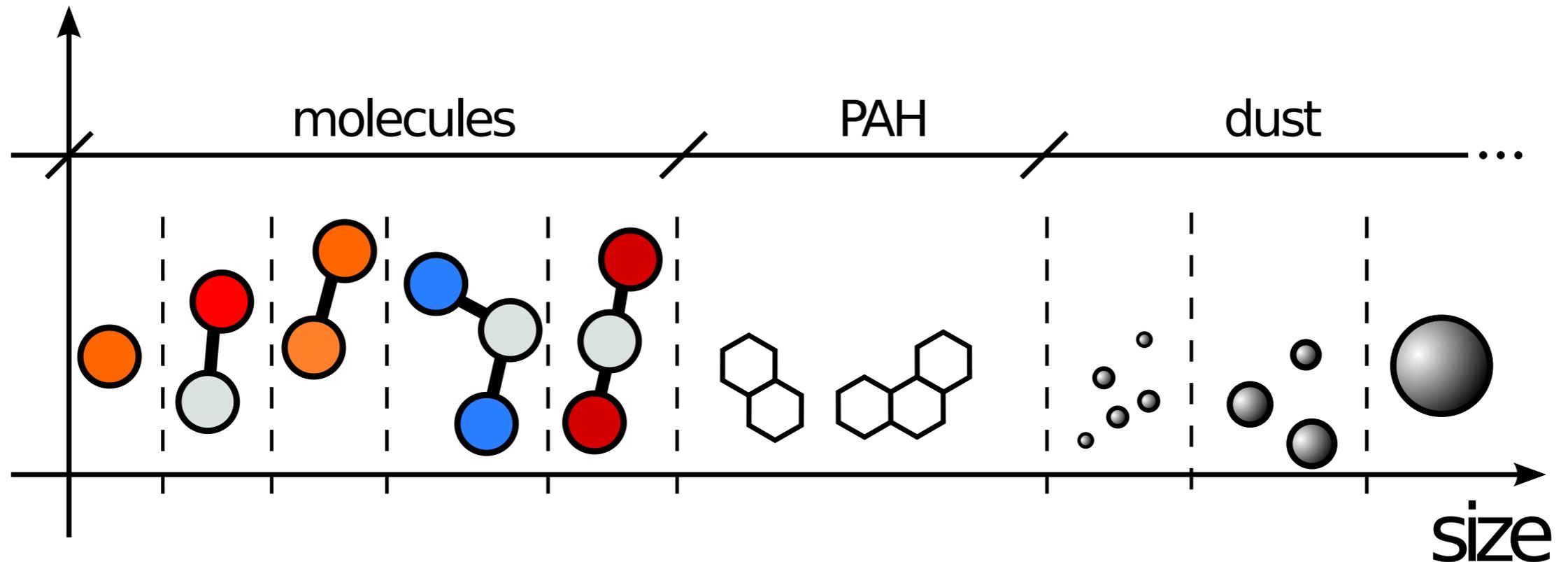
# Complejidad y líneas no identificadas: hoy día



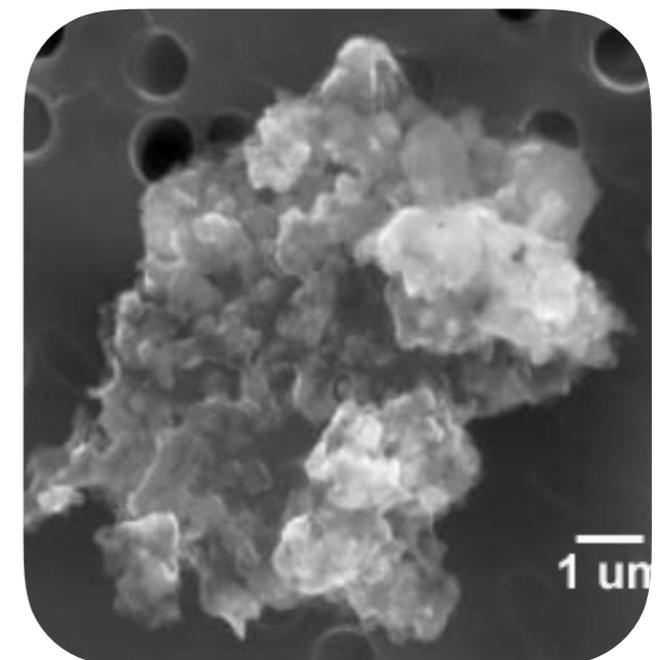


**¿DE DONDE VIENE TANTA  
COMPLEJIDAD?**

# No hay solo gas en el ISM

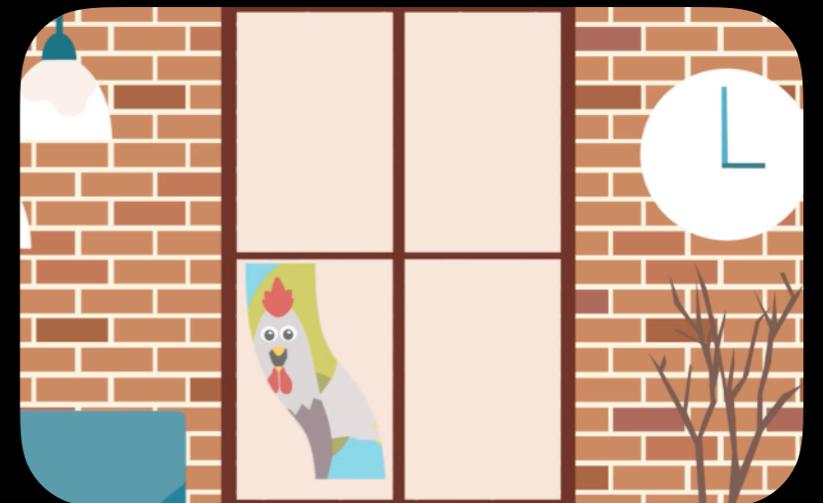
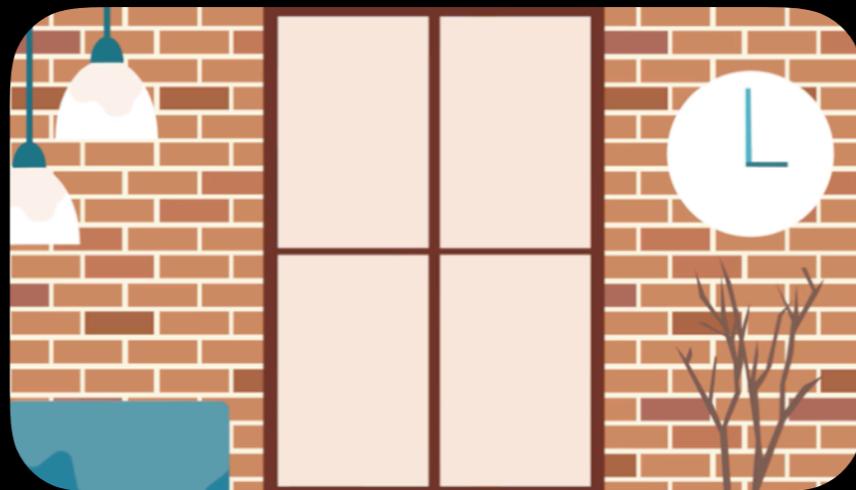


- Polvo (partículas de **silicatos** o carbonáceas)
  - Granos de tamaño de 0.1-1.0 micras ( $10^{-4}$  cm)
  - 100 veces menos abundante del gas
  - Super importante
  - Dinamica y química



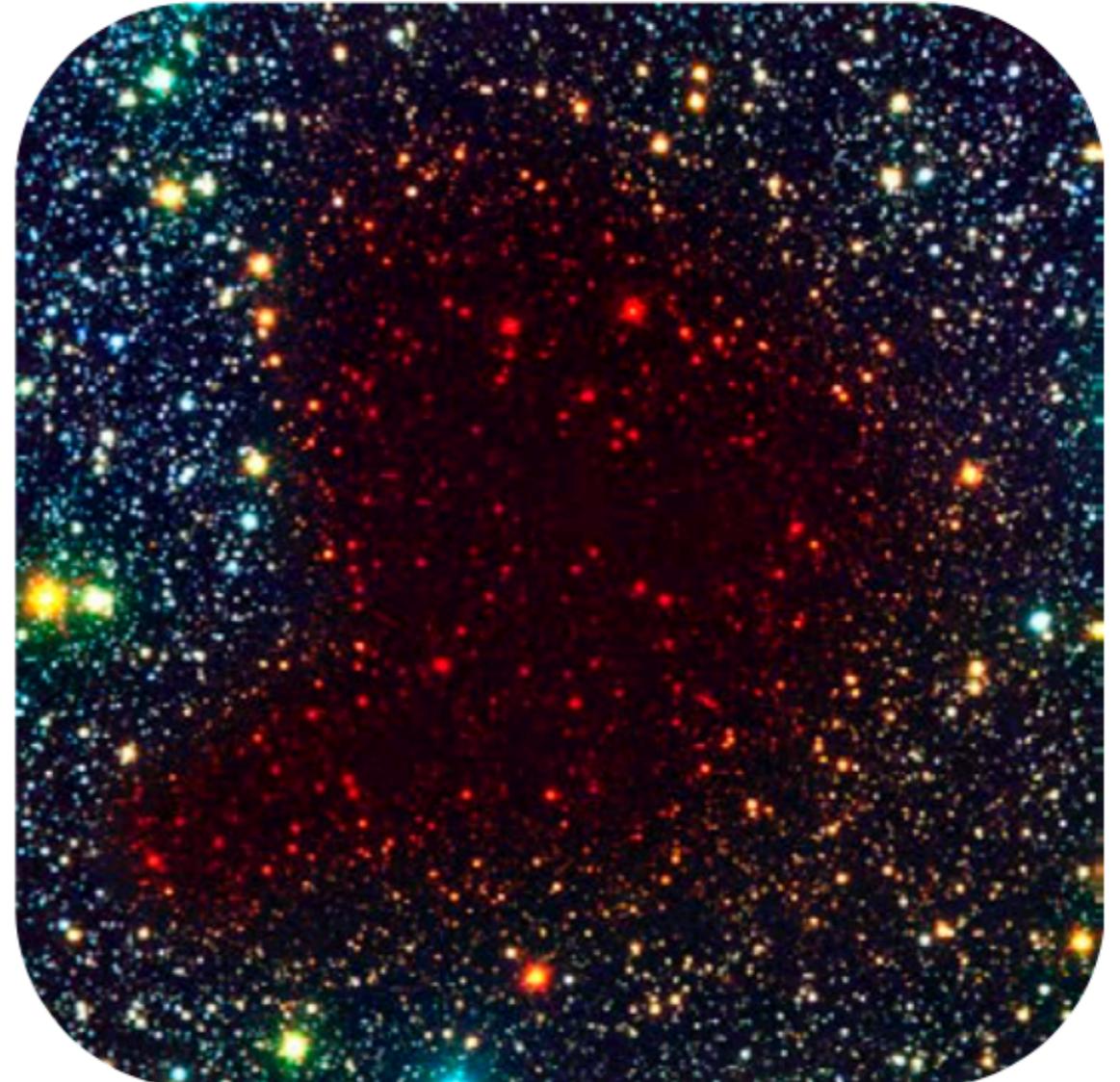
# No hay solo gas en el ISM

---



# Longitudes de onda mas largas

---

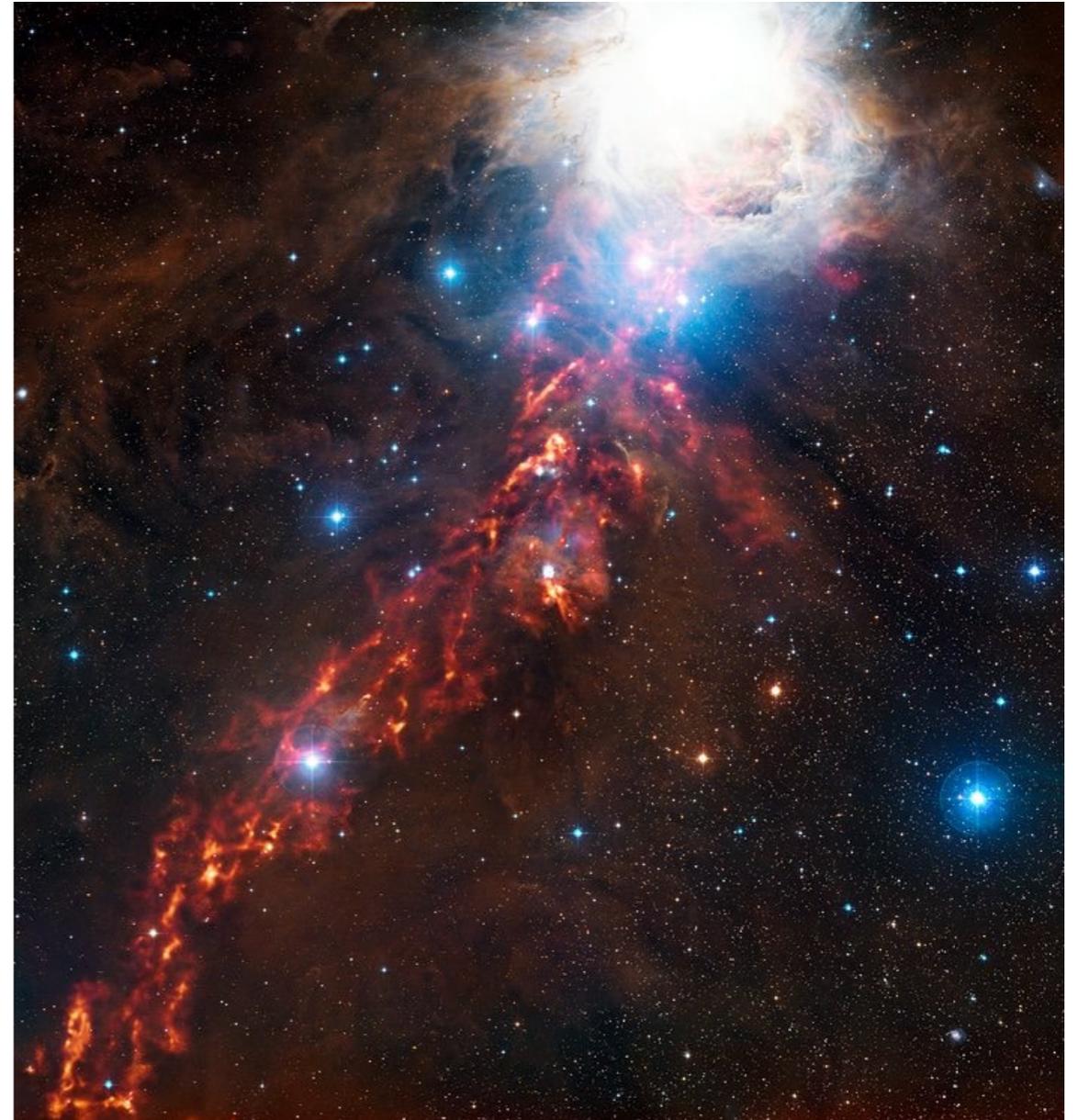


La fotografía de la izquierda muestra Barnard 68, una nube oscura tal y como se ve con luz visible. La fotografía de la derecha muestra la imagen anterior combinada con otra en el infrarrojo cercano, donde se observan estrellas que antes estaban ocultas. (Créditos: ESO)

# Longitudes de onda mas largas

---

Crédito: ESO/Digitized Sky Survey 2

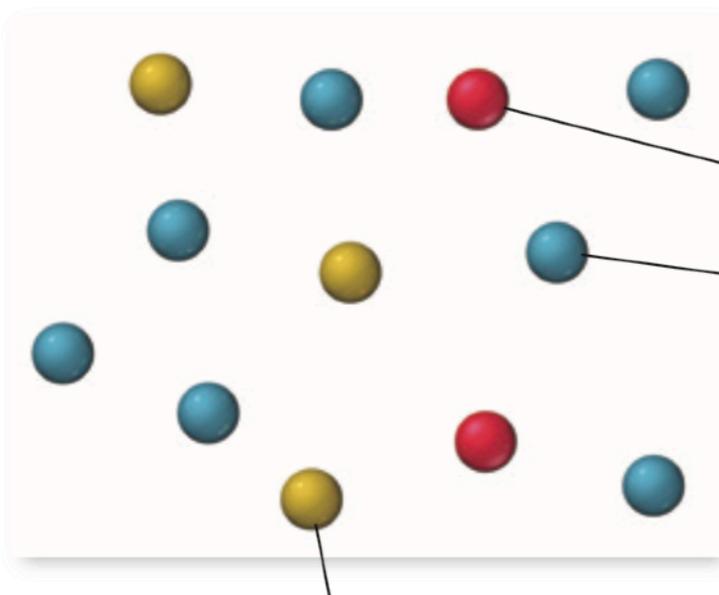


El brillo anaranjado representa débil luz que proviene de granos de frío polvo interestelar, en longitudes de onda demasiado largas para ser vistas por el ojo humano.

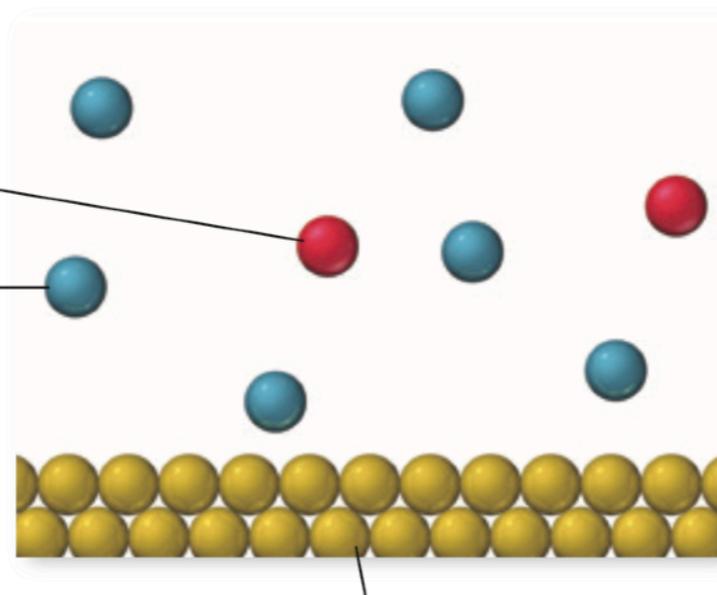
# El polvo actúa de catalizador (entre otras cosas)

- Catalizador
  - Aumenta la velocidad de una reacción química
  - O mejor, permite que ocurra

Catàlisi homogènia

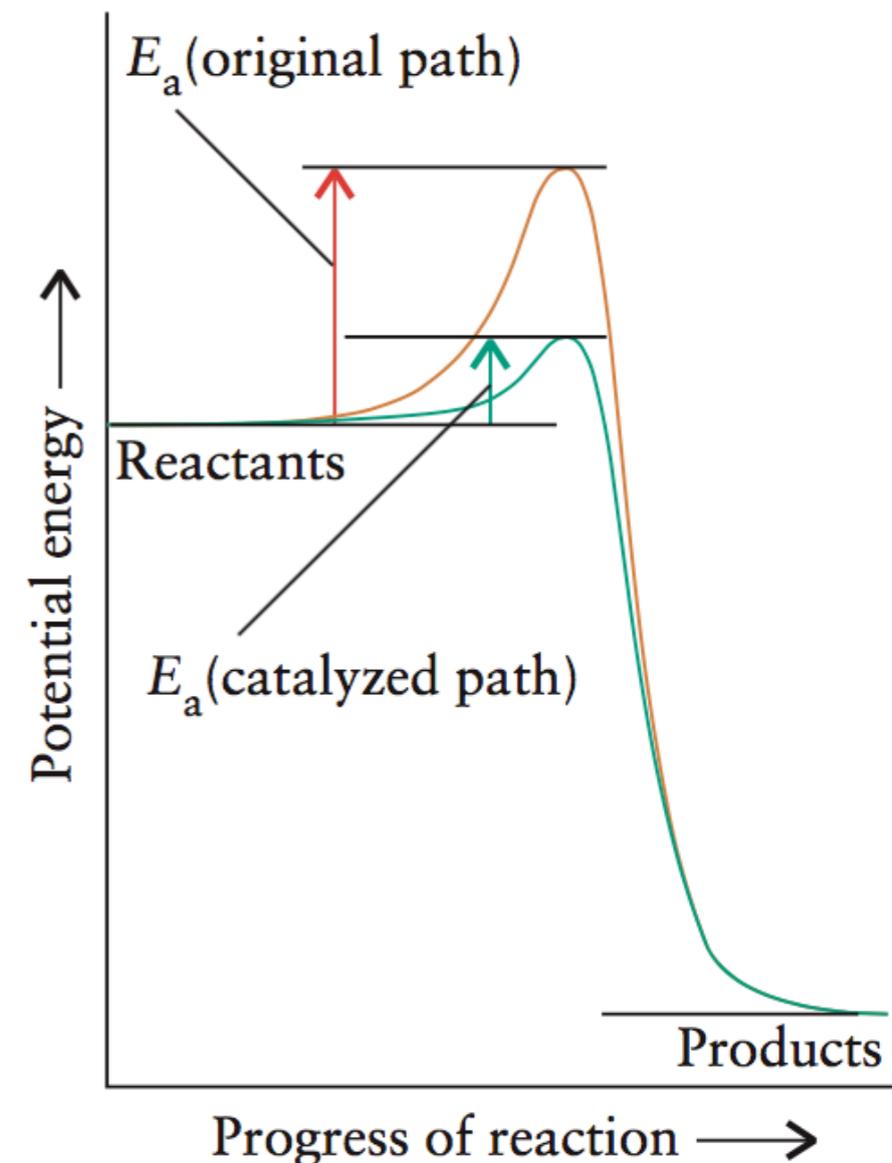


Catàlisi heterogènia



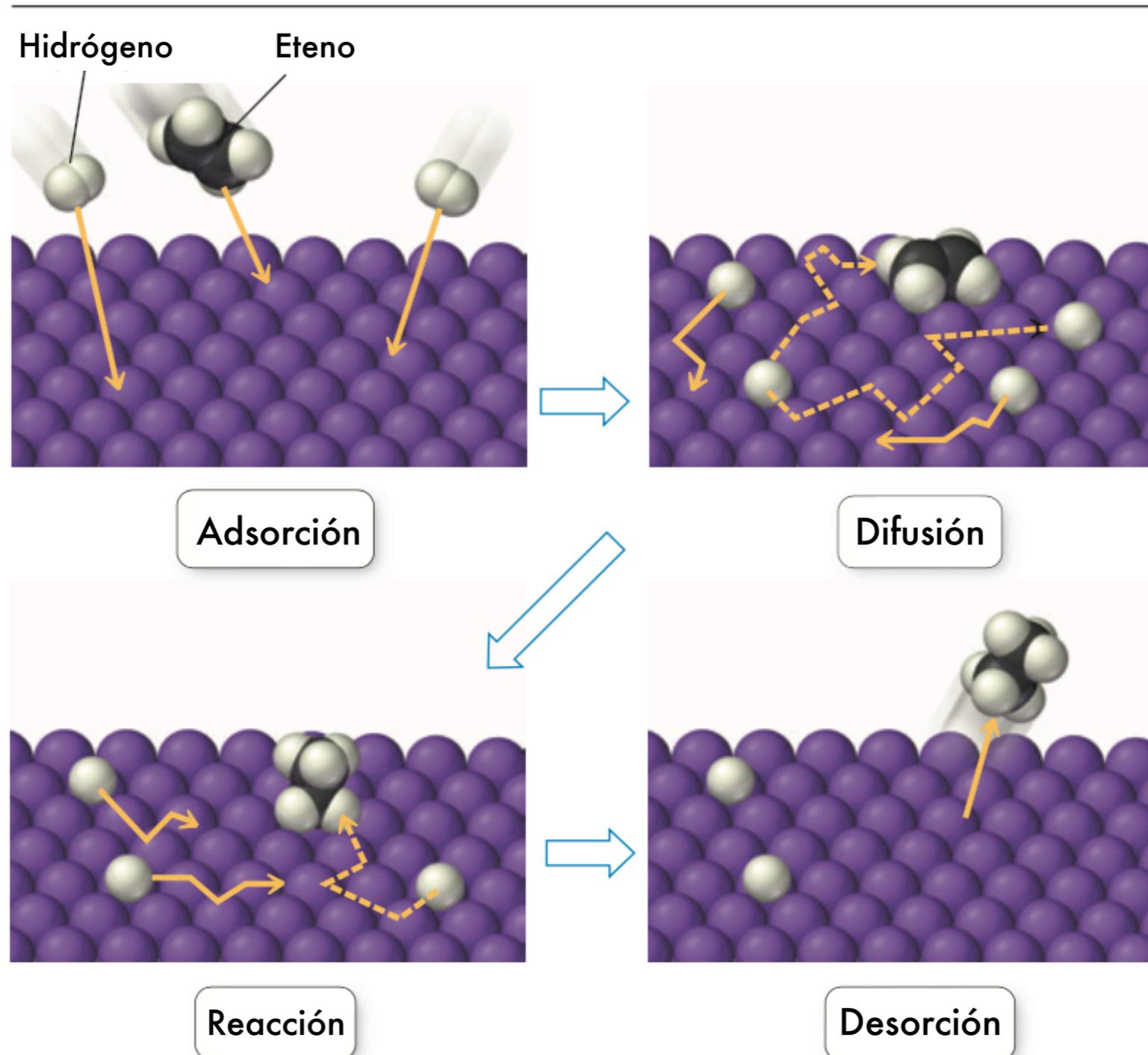
Productos

Reactivos



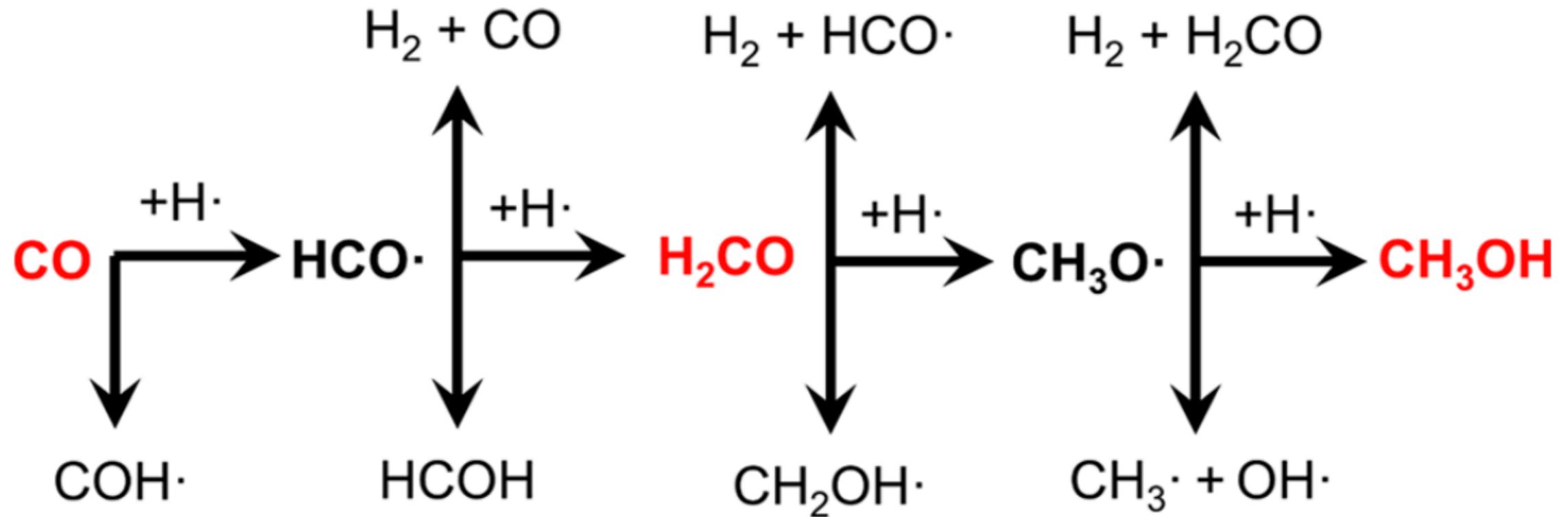
# El polvo actúa de catalizador

## Catàlisi heterogènia



# El polvo actúa de catalizador: ejemplos

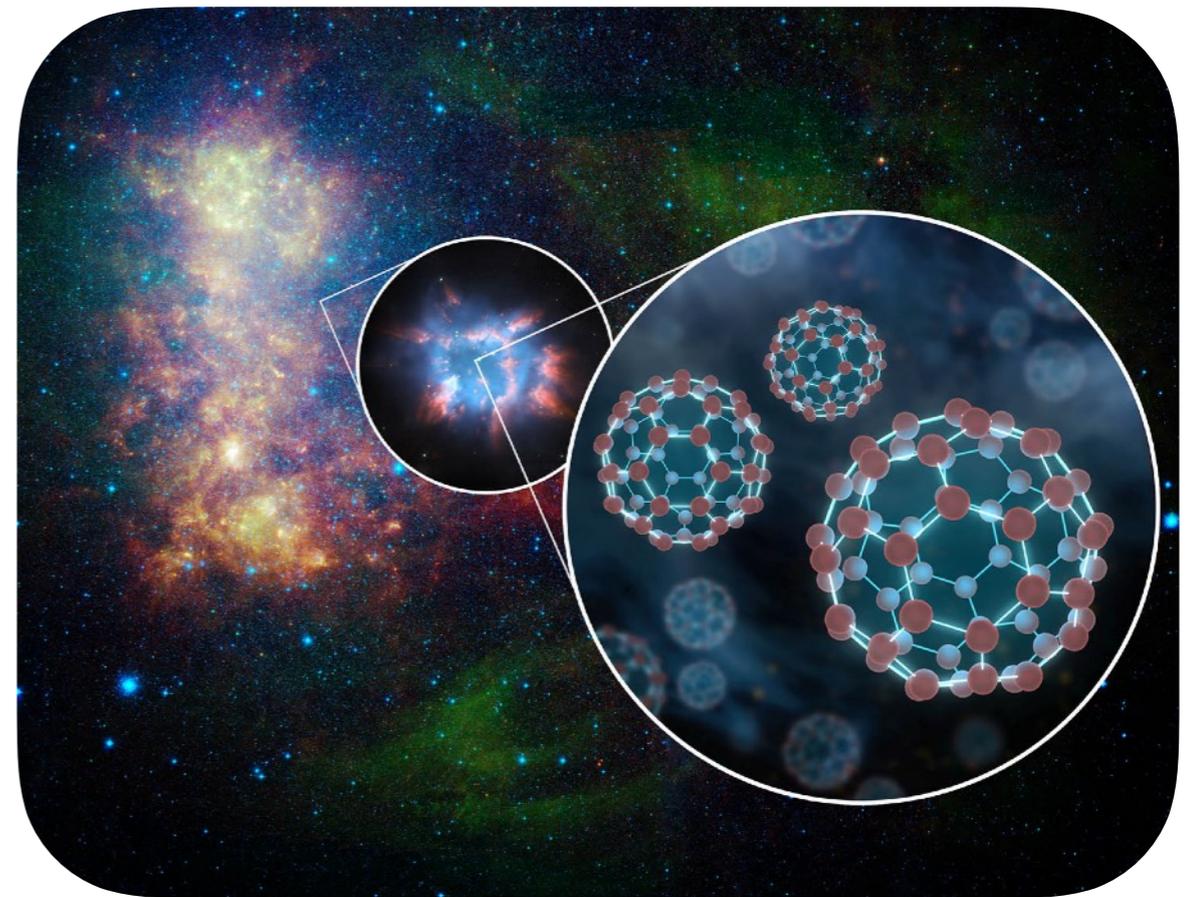
## Formación de metanol



# Preguntas que intentamos responder

---

- ¿Cuáles son los procesos químicos que conducen a la formación y destrucción de moléculas?
- ¿Qué causa la diversidad química?
- ¿Qué tan bien se conocen los procesos moleculares básicos de los experimentos o la teoría?
- ¿Cómo pueden usarse las moléculas como diagnóstico físico y químico de la estructura física?
- ¿Cómo se relacionan las moléculas en el medio interestelar con la vida tal como la conocemos? (astrobiología)



# Por qué es importante

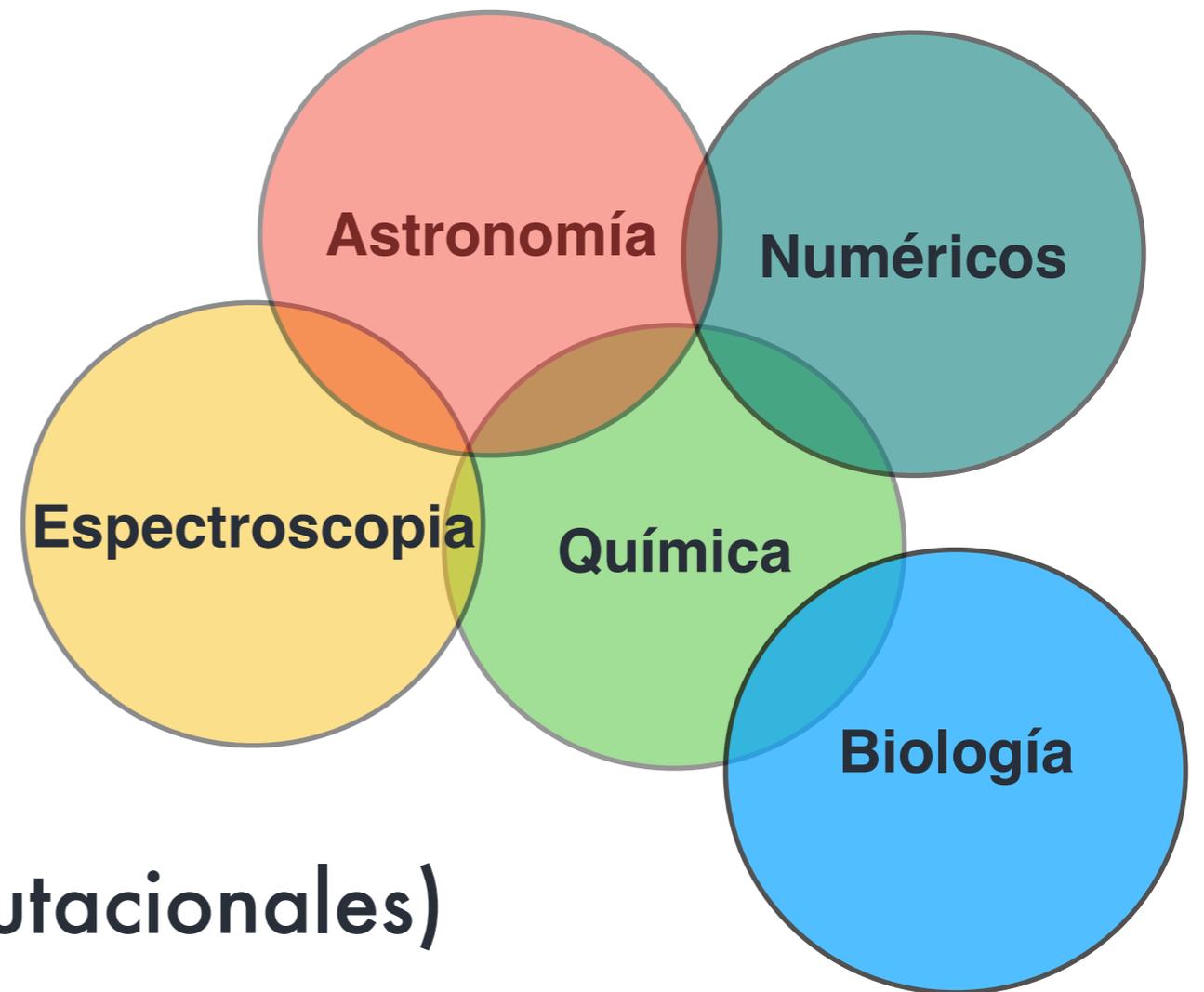
---

- Moléculas como diagnóstico de las condiciones físicas de los entornos donde residen (T, densidad, velocidad)
- ISM es un laboratorio único para el estudio de nuevos fenómenos químicos (en condiciones extremas)
- Las moléculas regulan el enfriamiento (formación de estrellas)

# Tema interdisciplinario

---

- Espectroscopia
- Cinética Química
- Ciencias de superficie
- Química Cuántica
- Astronomía
- Numéricos (ciencias computacionales)
- Biología



# Las ramas de la Astroquímica

---



Astroquímica de Laboratorio

Química Cuántica

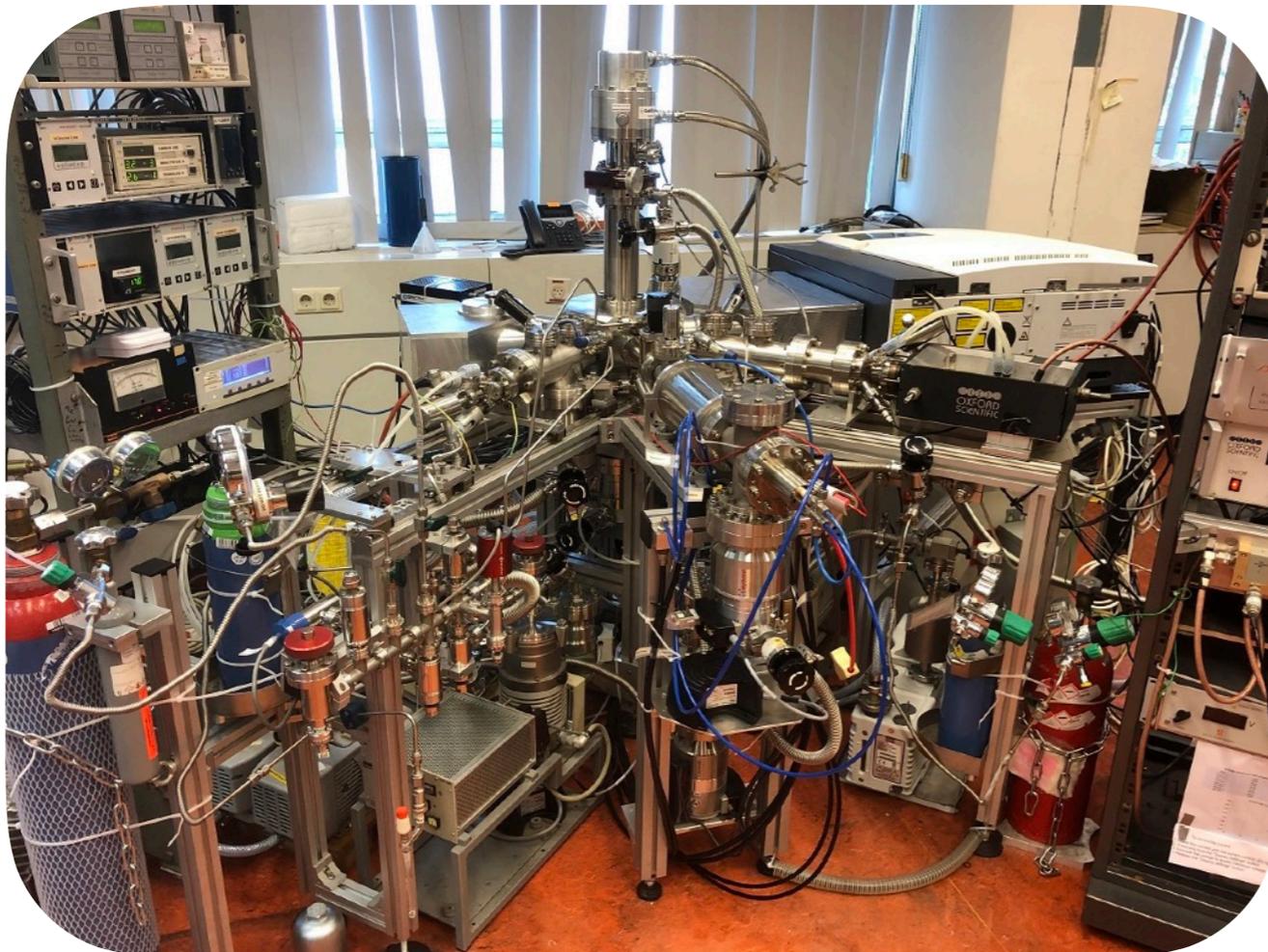
Astroquímica Computacional

Observaciones (Astronomía)

La mezcla de estudios de laboratorio, computacionales, y observaciones permite desarrollar nuevas teorías acerca de la formación de estrellas y sistemas planetarios.

# Laboratorio: ingrediente fundamental

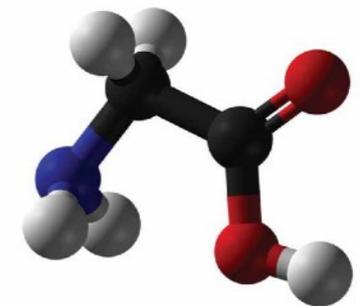
Se intenta crear las condiciones que tenemos en el medio interestelar (bajas presión\*\* y temperatura), reproducir diversos entornos



S. Ioppolo et al. Nat Astron, 2020



**Glicina\*** : formación bajo condiciones de la nubes oscuras



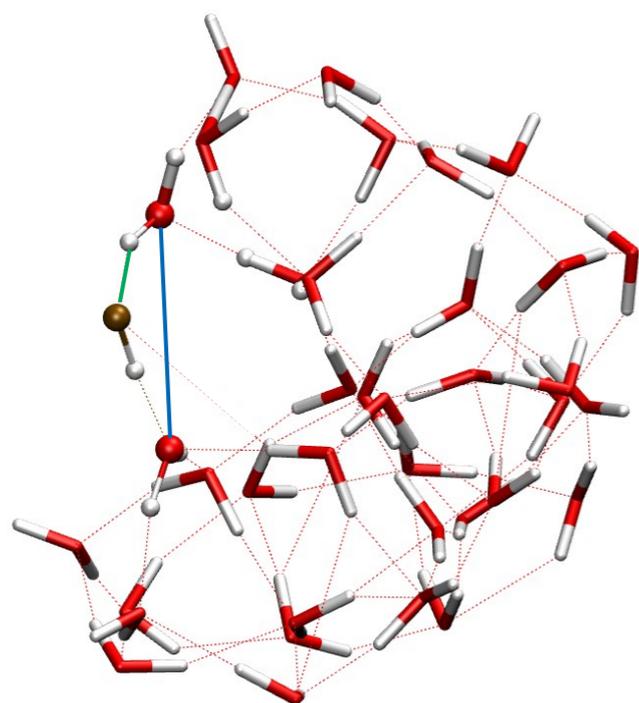
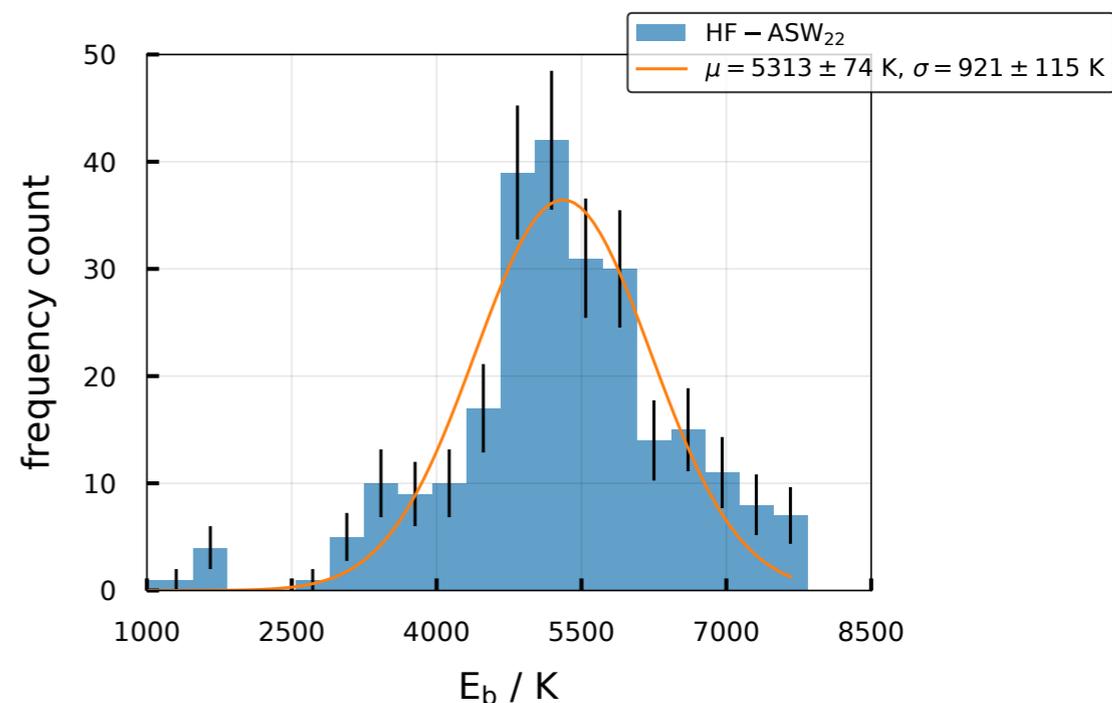
\* aminoácido a partir del cual se crean proteínas

\*\* ultra-alto vacío ( $10^{-10}$  Torr) y criogénica

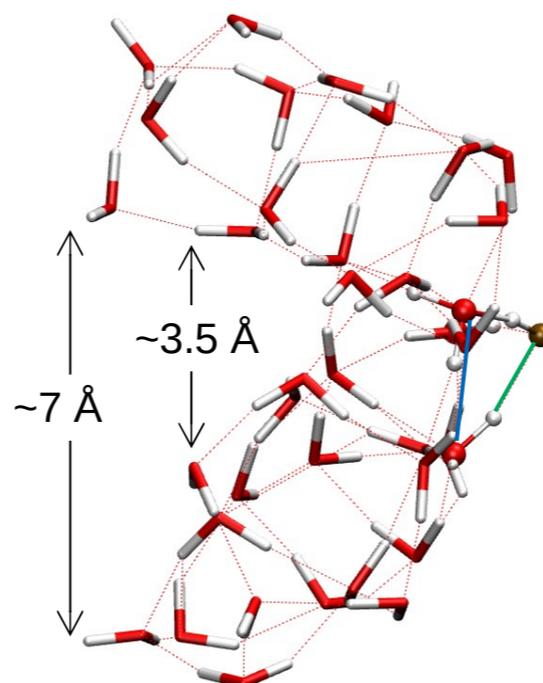
# Teoría: química cuántica

Bovolenta, Bovino et al. *Mol. Astrophys.*, 2020

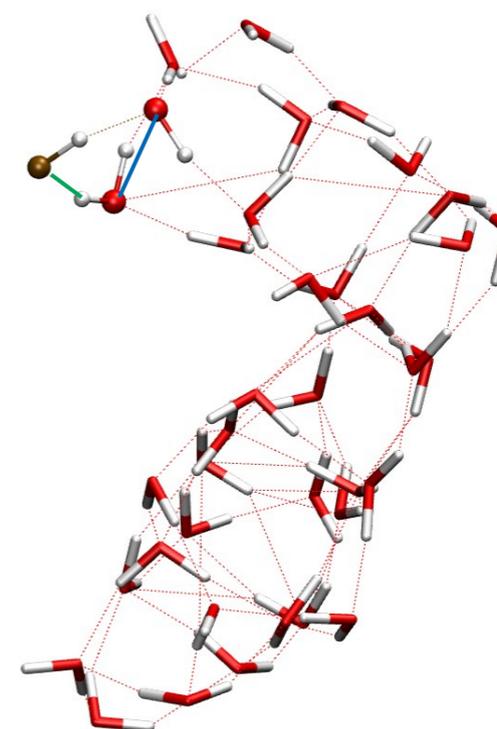
Estudio teórico de interacción moléculas - polvo interestelar (cubierto de hielo) para calcular energías de unión o procesos reactivos, calculo de espectros



(a) cavity



(b) side

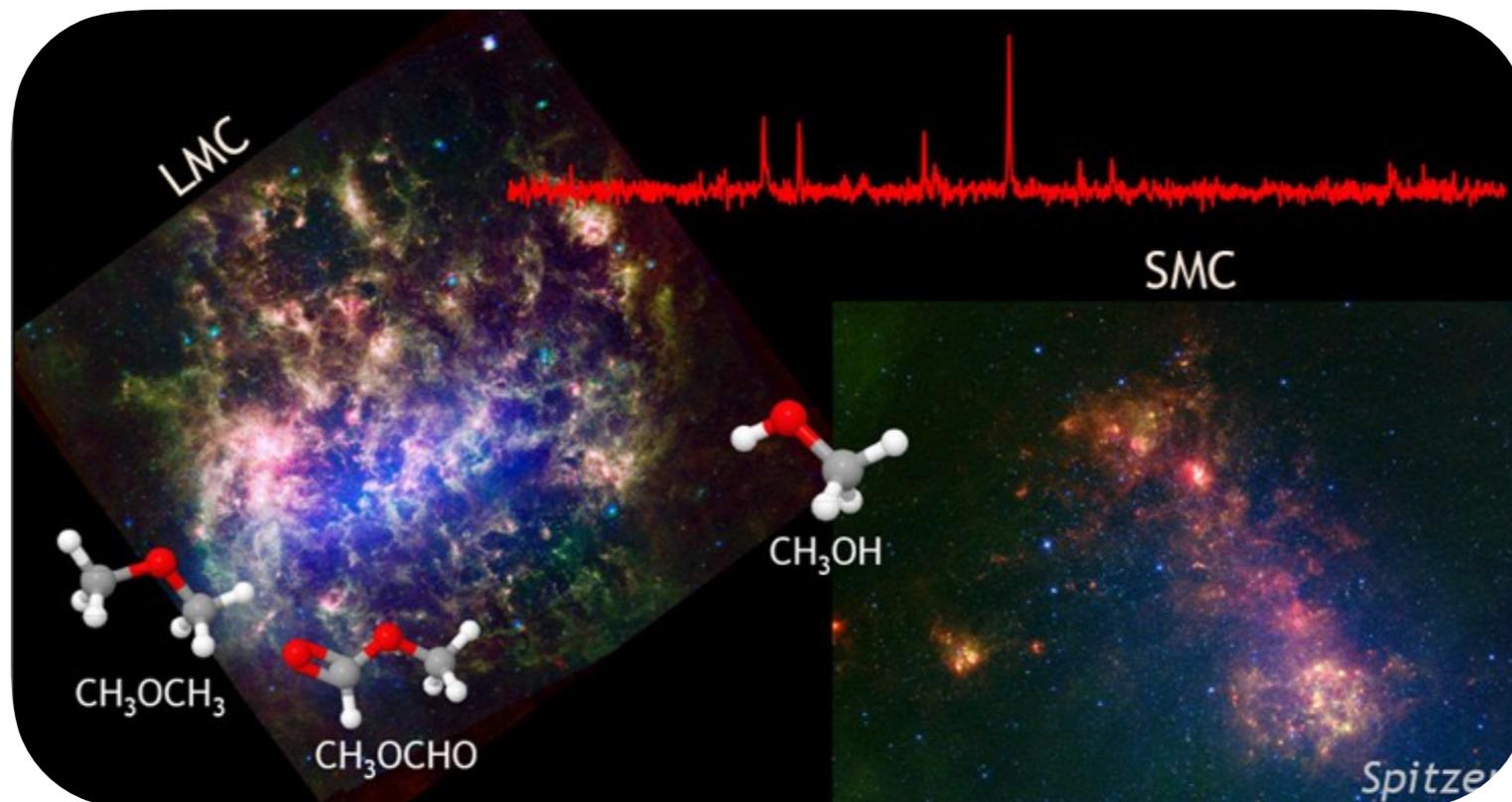


(c) edge

# Observaciones contra Modelos Computacionales

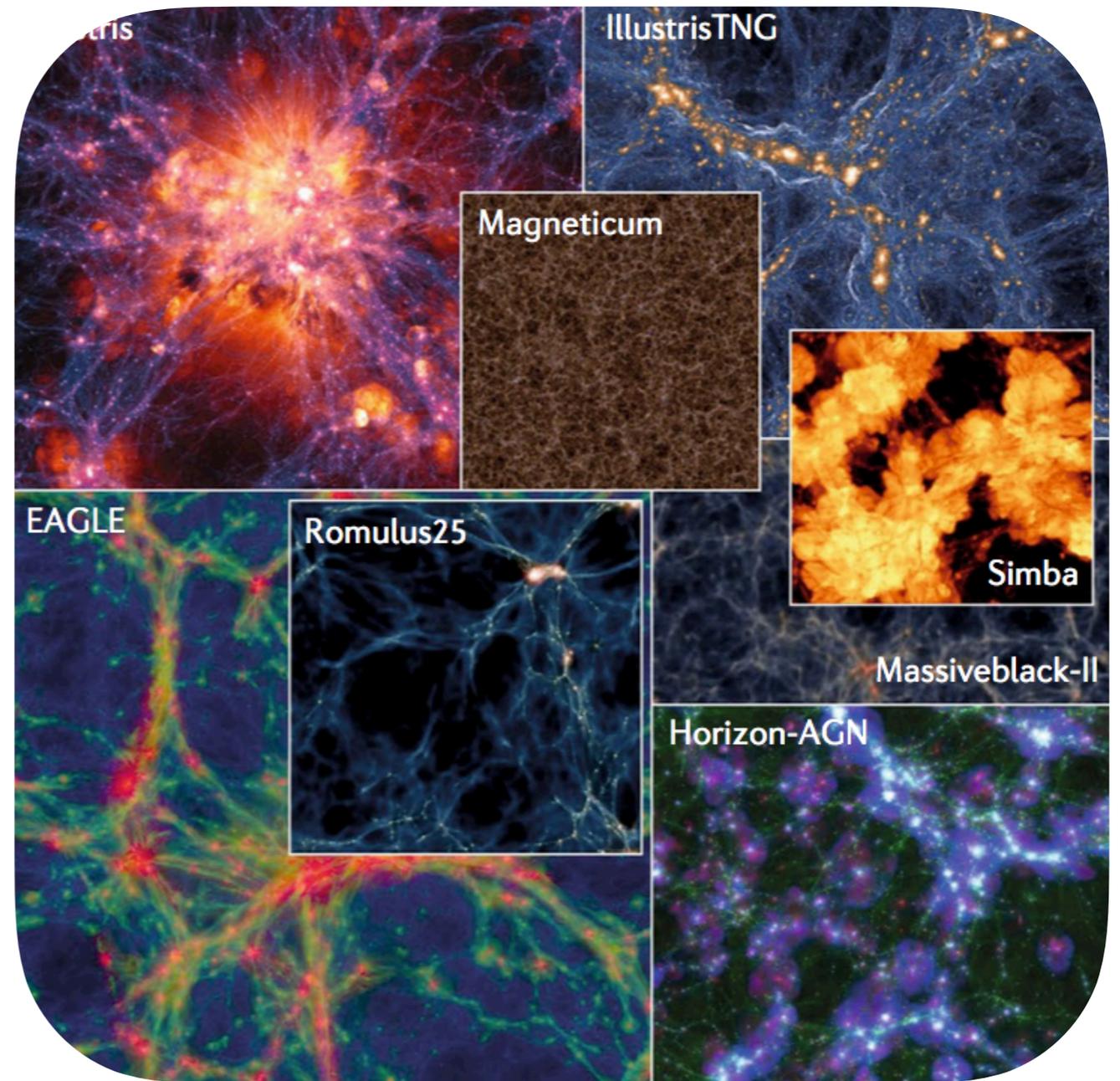
---

- Poderosas
- Proporciona mucha información
- Pero solo proporciona una única instantánea en el tiempo



# Modelos computacionales

- Nos da información sobre la evolución del objeto (antes y después de la etapa observada)
- El uso de herramientas computacionales para interpretar lo que observamos.
- Desarrollo de códigos para estudios de regiones astronómicas (a priori).



# Modelos computacionales

---

- Históricamente los primeros modelos se desarrollaron en los años '50

## THE ASTROPHYSICAL JOURNAL

AN INTERNATIONAL REVIEW OF SPECTROSCOPY AND  
ASTRONOMICAL PHYSICS

VOLUME 113

MAY 1951

NUMBER 3

THE DENSITY OF MOLECULES IN INTERSTELLAR SPACE

DAVID R. BATES\* AND LYMAN SPITZER, JR.  
University College, London, and Princeton University Observatory  
*Received January 22, 1951*

## BULLETIN OF THE ASTRONOMICAL INSTITUTES OF THE NETHERLANDS

1946 April 30

Volume X

No. 371

---

COMMUNICATION FROM THE OBSERVATORY AT LEIDEN

---

Condensation in interstellar space, by *H. A. Kramers* and *D. ter Haar* <sup>1)</sup>.

# Modelos computacionales

## 1946-1951 Primeros modelos (Kramers, Bates & Spitzer)

Determinar las abundancias de especies químicas bajo ciertas condiciones físicas

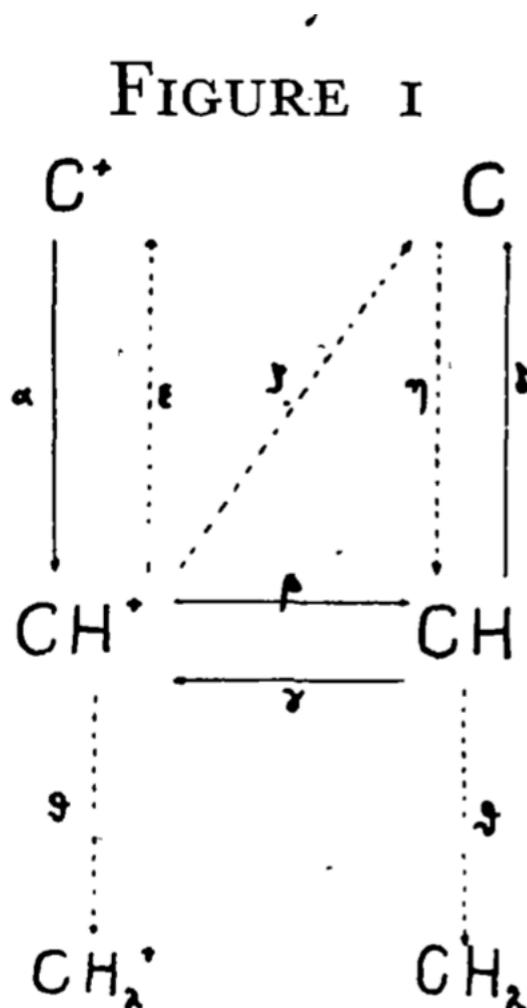
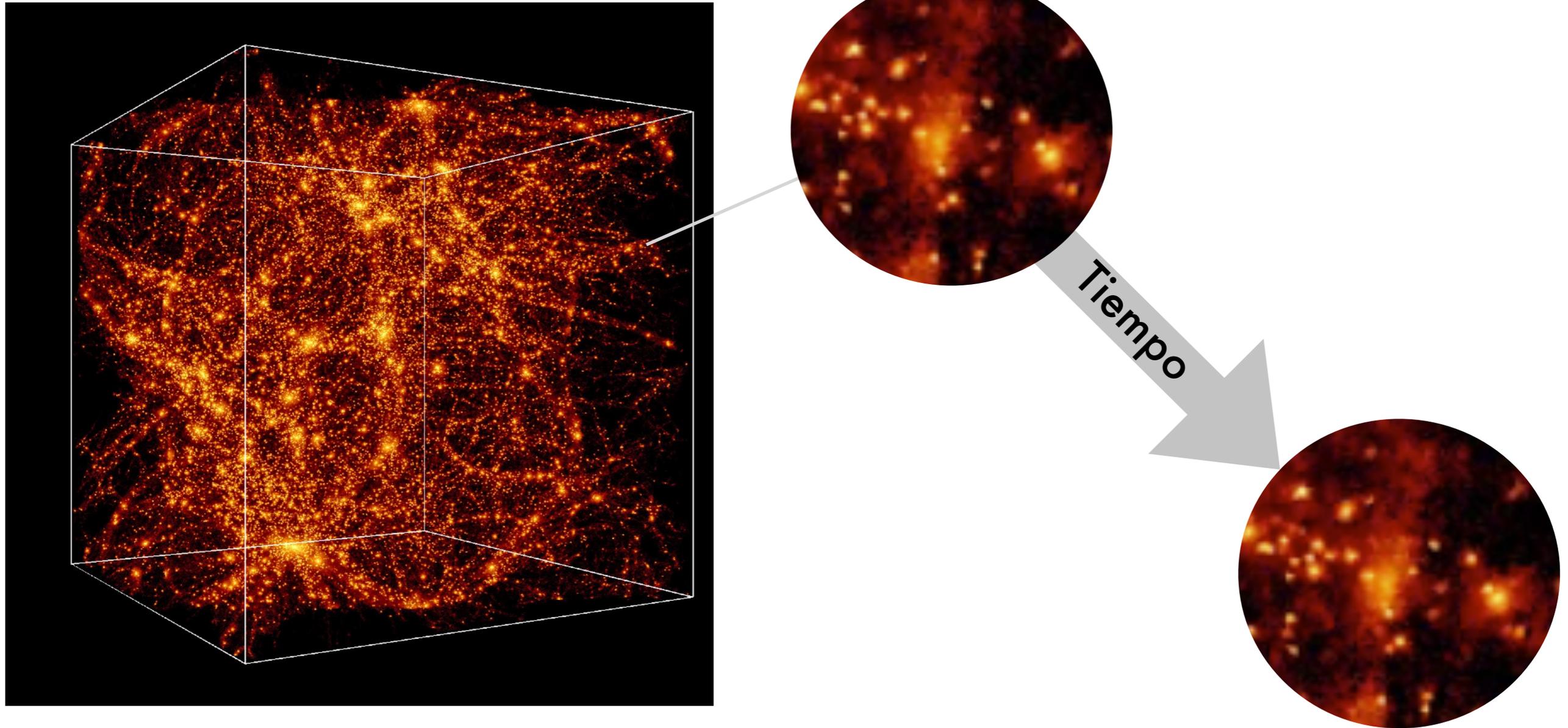


TABLE I

Process	Description	Frequency
$\alpha : C^+ + H \rightarrow CH^+ + h\nu$	(radiation capture)	$N_\alpha = 10^{-17} \cdot \rho_{C^+} \cdot \rho_H$
$\beta : CH^+ + e \rightarrow CH + h\nu$	(electron capture)	$N_\beta = 3 \cdot 10^{-13} \cdot \rho_{e^-} \cdot \rho_{CH^+}$
$\gamma : CH + h\nu \rightarrow CH^+ + e$	(photoionization)	$N_\gamma = 2 \cdot 10^{-11} \cdot \rho_{CH}$
$\delta : CH + h\nu \rightarrow C + H$	(photodissociation)	$N_\delta = 10^{-11} \cdot \rho_{CH}$
$\epsilon : CH^+ + h\nu \rightarrow C^+ + H$	(photodissociation)	$N_\epsilon \sim 10^{-15} \cdot \rho_{CH^+}$
$\zeta : CH^+ + e \rightarrow C + H$	(electron capture leading to dissociation)	$N_\zeta \sim 3 \cdot 10^{-14} \cdot \rho_{e^-} \cdot \rho_{CH^+}$
$\eta : C + H \rightarrow CH + h\nu$	(radiation capture)	$N_\eta = 7 \cdot 10^{-18} \cdot \rho_C \cdot \rho_H$
$\zeta' : CH^{(+)} + H \rightarrow CH_2^{(+)}$	("mechanical" capture)	$N_{\zeta'} \leq 7 \cdot 10^{-17} \cdot \rho_{CH^{(+)}} \cdot \rho_H$

# Modelos computacionales: hidrodinámica

---



Actualizar un elemento de volumen de gas en el tiempo:  
Como cambia su energía (temperatura), composición química etc.

# Modelos computacionales: caros

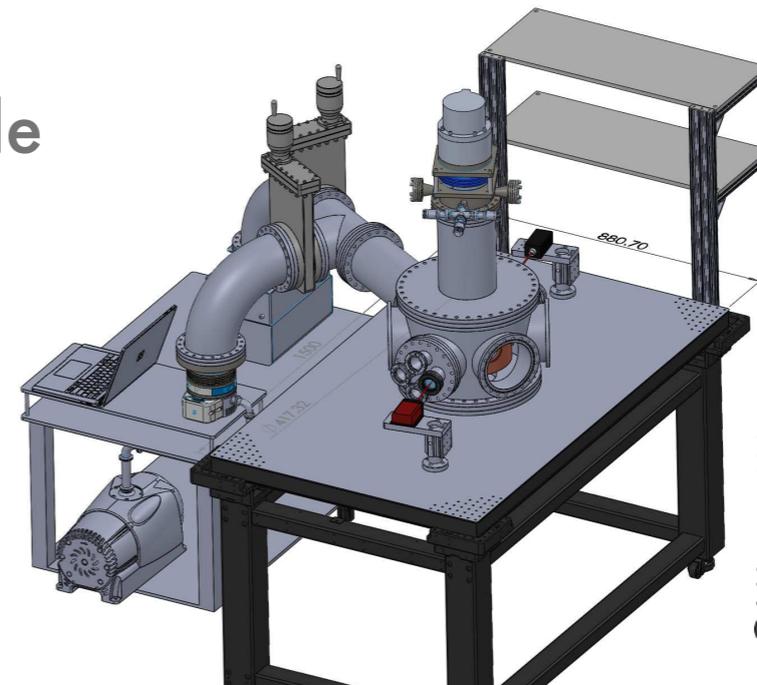
---

- Son caros por distintas razones:
  - Hay mucha física que se debe incluir
  - Los volúmenes que se simulan son inmensos
  - Hay procesos complejos
  - Hay límites computacionales de algoritmos

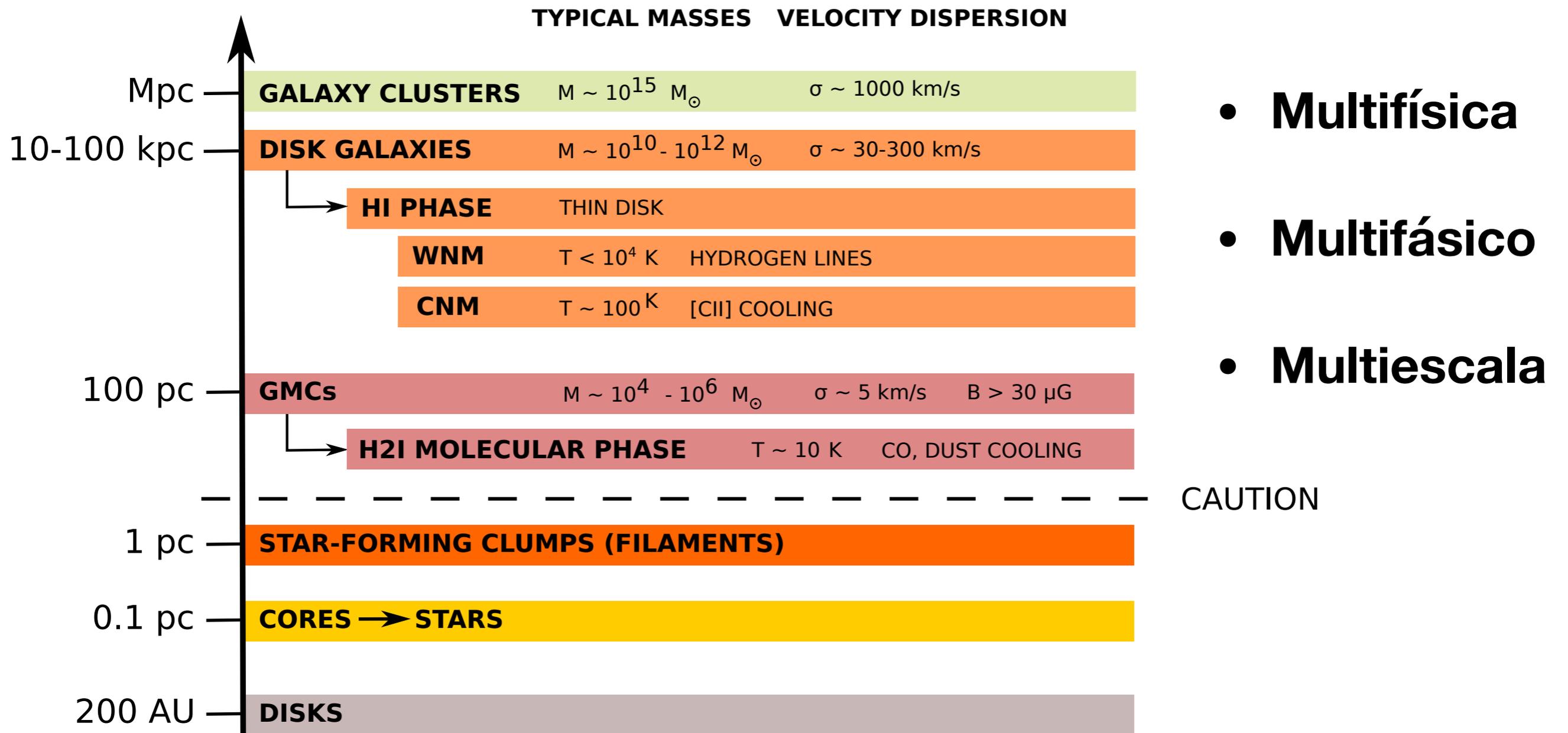
# ¿Qué hacemos aquí en Concepción?

El grupo de Astroquímica UdeC es el primero y el único grupo de este tipo en Chile.

- 12 miembros
- Astroquímica computacional y simulaciones (Kultrun)
- Observaciones con ALMA y APEX
- Laboratorio de Astroquímica para el estudio de procesos gas-polvo (en desarrollo con CePIA)
- Química cuántica en colaboración con el departamento de Química Física



# Esta tan fácil hacer simulaciones?



- **Multifísica**
- **Multifásico**
- **Multiescala**

**Pero necesitamos simulaciones con química para comparar la teoría con las observaciones**

---

# QUE SIGNIFICA QUÍMICA EN HIDRODINÁMICA

Solucionar las ecuaciones de la hidrodinámica que describen la dinámica del gas



Incluye la macrofísica: puede ser cualquier cosa, física de agujeros negros, radiación, campos magnéticos



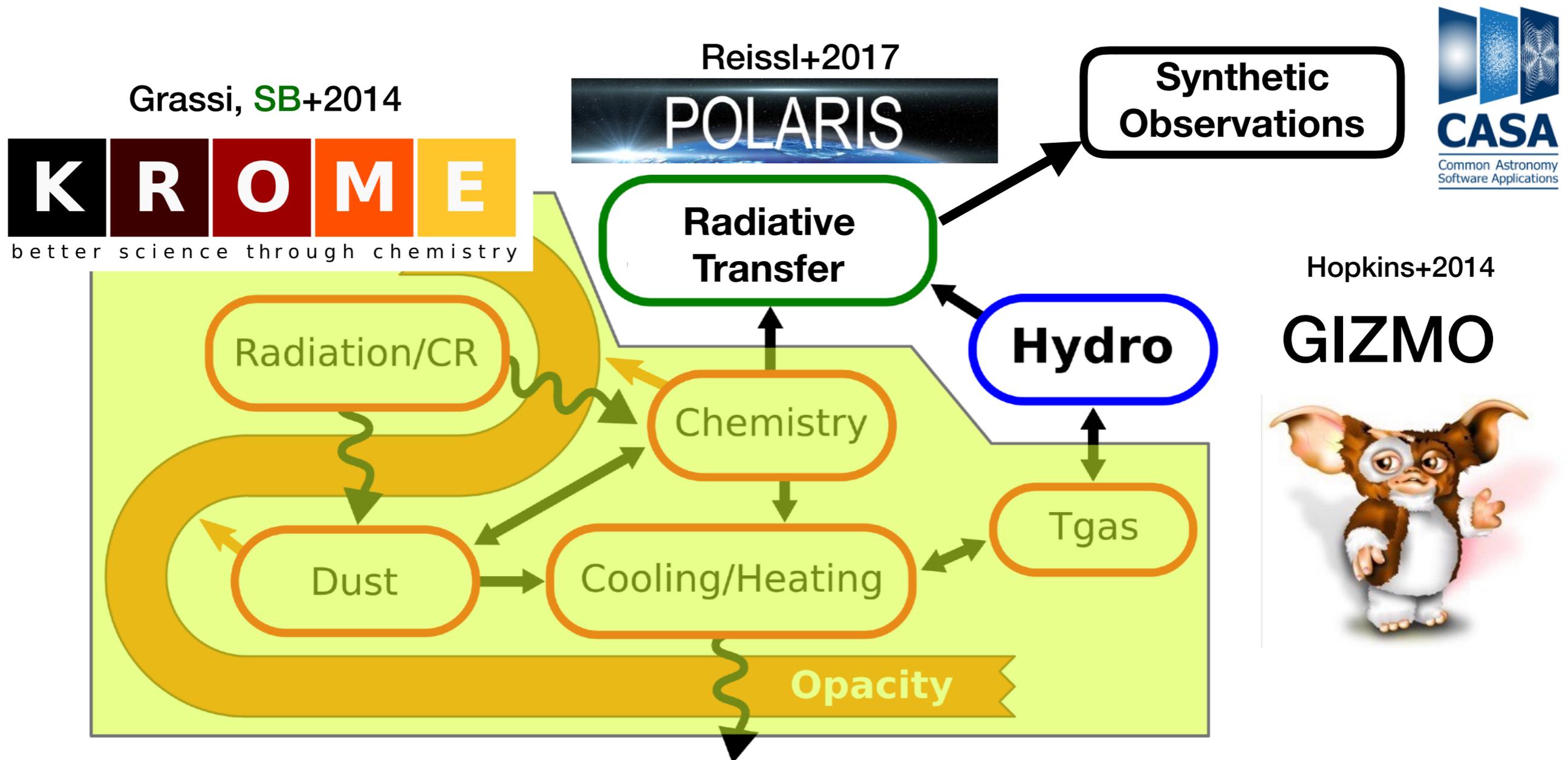
Nosotros podemos agregar microfísica



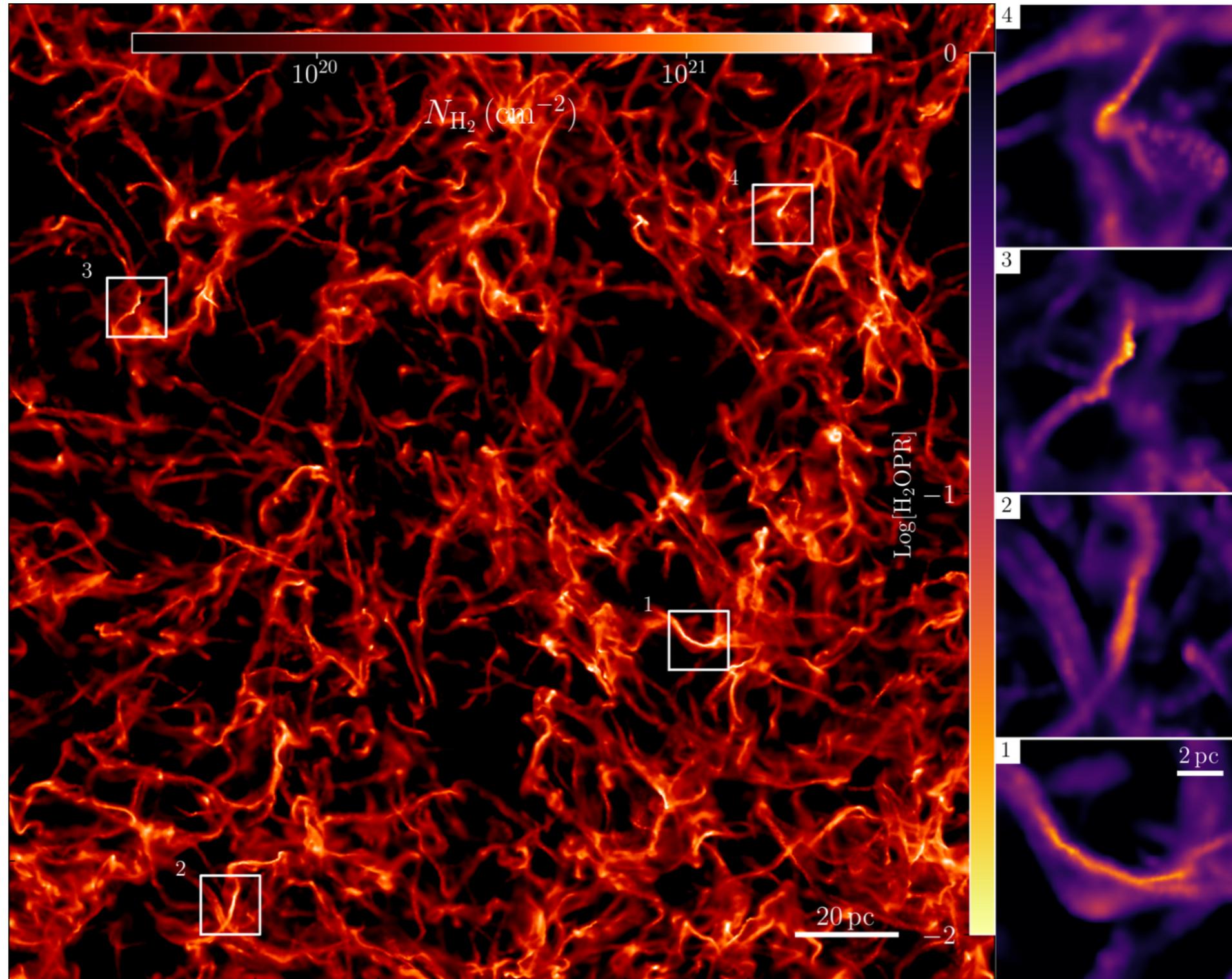
Química (cinética), los procesos de enfriamiento, la interacción gas-polvo

# hidrodinámica + química

- **GOAL:** comparar simulaciones y observaciones



# Modelos computacionales: ejemplo II



# Objetivos del grupo de Astroquímica

- **Simulaciones de regiones de formación estelar de baja y alta masa**
  - ¿Cómo se forman las estrellas (en particular las masivas)?
  - ¿Cuál es el rol de los campos magnéticos y la turbulencia?
  - ¿Cuál es el rol de la fragmentación?
  - ¿Cuáles son las condiciones iniciales?

# Objetivos del grupo de Astroquímica

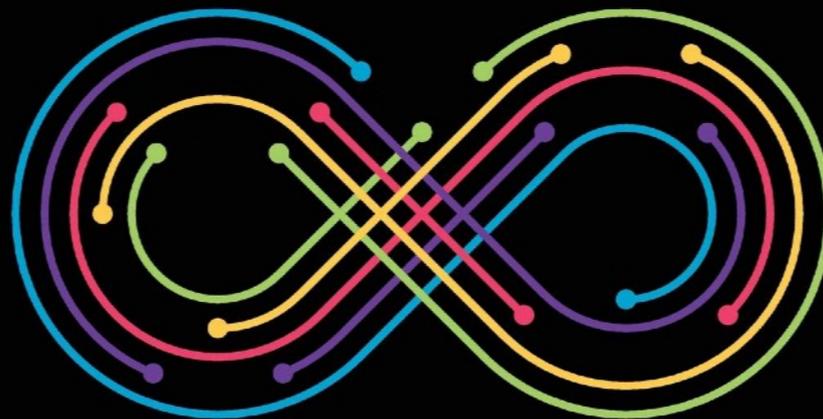
- **Simulaciones de escala galáctica**
  - Simulaciones de formación y evolución de galaxias
  - Química impulsada por AGN en la zona molecular central
  - Procesos de acreción en filamentos
  - Astroquímica de laboratorio (Cosmic Dust Experiment)

## **Mas información:**

<http://theory-starformation-group.cl/sbovino/>

[http://www.astro.udec.cl/dust\\_lab/](http://www.astro.udec.cl/dust_lab/)

<http://stf.astroapoyo.cl/astrochemistry.html>



**Dudas/Contacto:** stefanobovino (at) astro-udec.cl