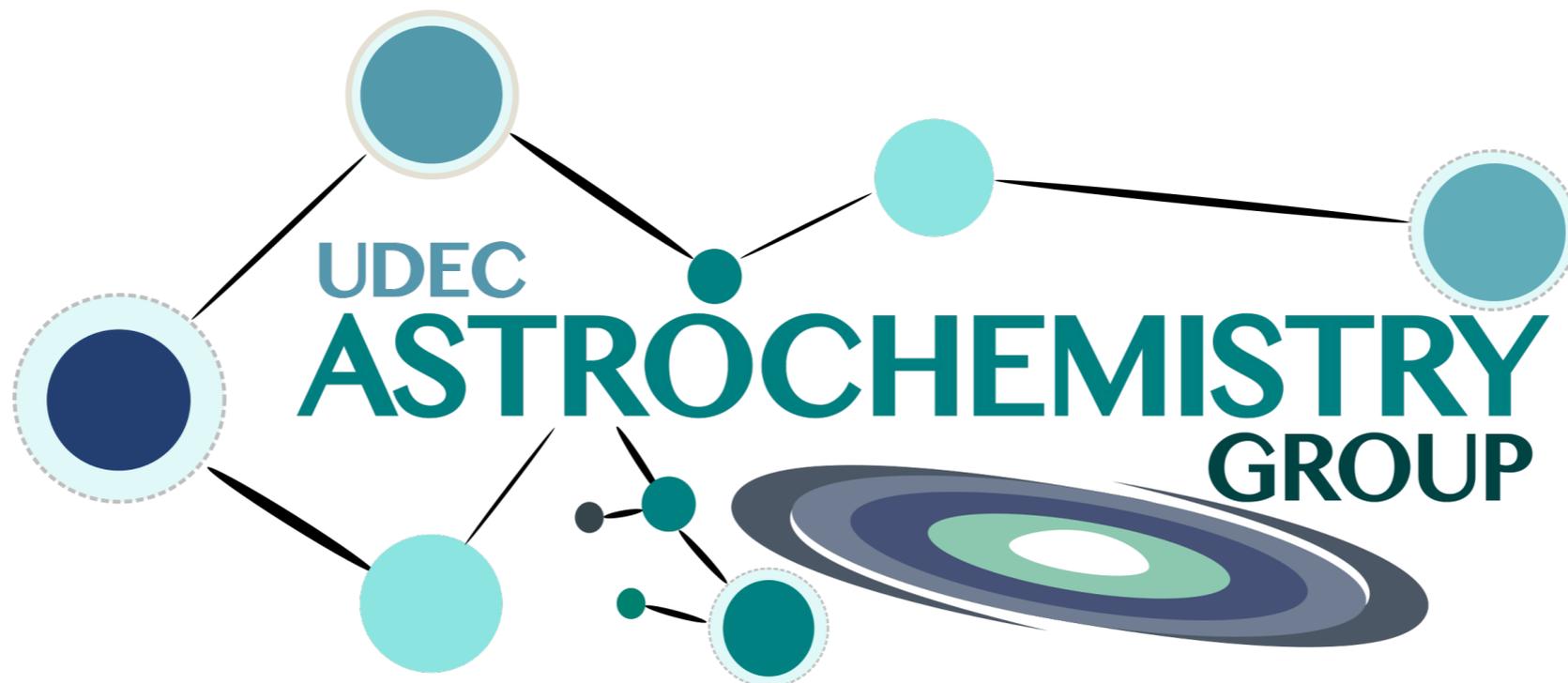




# Astroquímica Computacional

## Grupo de Teoría

Stefano Bovino, Departamento de Astronomía  
Universidad de Concepción, Chile



# ¿QUE ES LA ASTROQUIMICA?

¡EL ESTUDIO DE CÓMO LOS PROCESOS QUÍMICOS AFECTAN LA DINÁMICA DE LA FORMACIÓN DE GALAXIAS, ESTRELLAS Y PLANETAS!

---

# ASTROQUIMICA COMPUTACIONAL

- ▶ Lo que concierne los modelos
- ▶ El uso de herramientas computacionales para interpretar lo que observamos.
- ▶ Desarrollo de códigos para estudios "a priori" de regiones astronómicas.
- ▶ Astrofísica Computacional con Química

---

# DE QUE SE OCUPA LA ASTROQUIMICA

- ▶ ¿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 los espacios con la vida tal como la conocemos (astrobiología)?

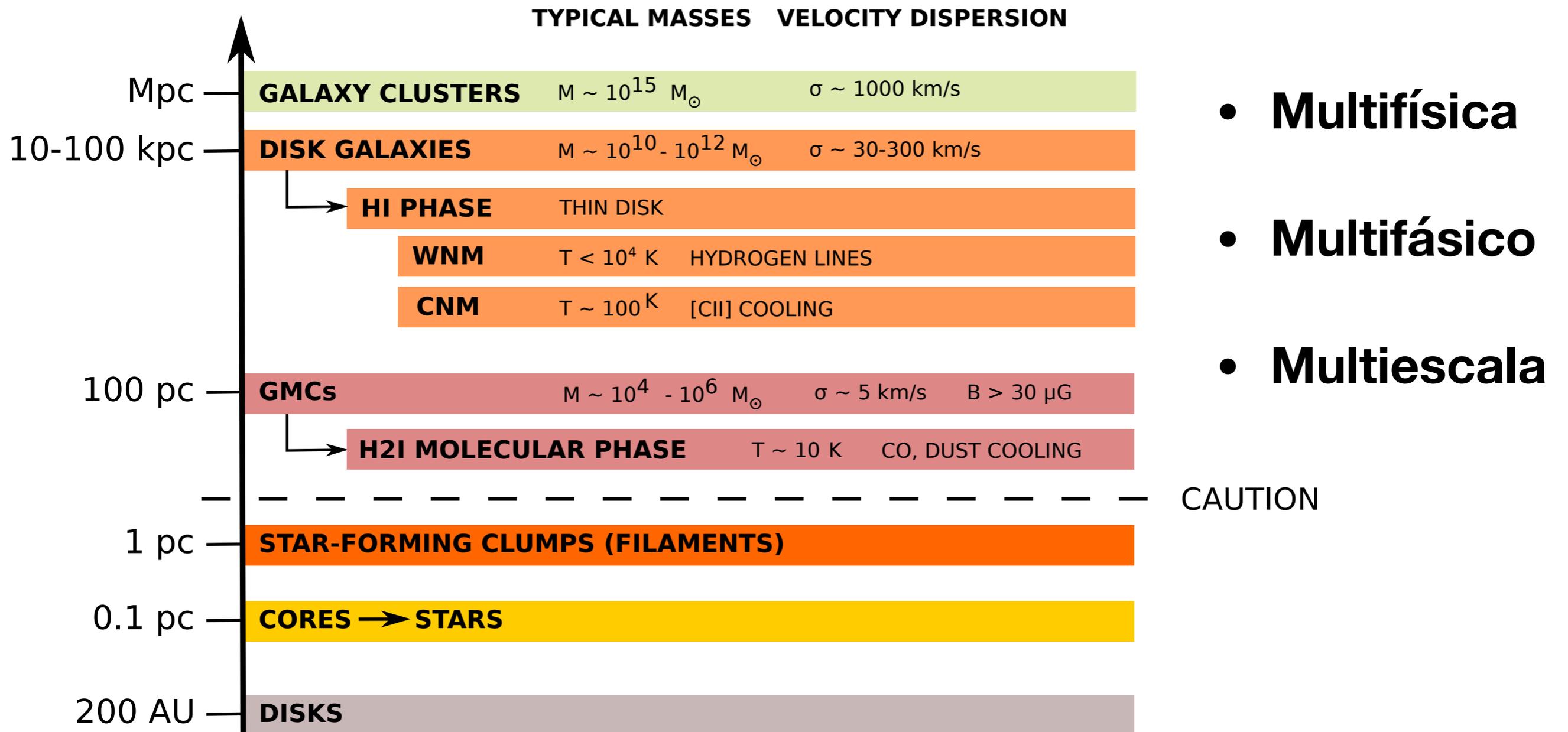
## **OBJETIVO PRINCIPAL:**

**Cerrar el gap entre la teoría y las observaciones**

# ¿Por qué necesitamos modelos?

- **Observaciones:**
  - Poderosos
  - Nos dan imágenes muy coloreadas
  - Proporcionan mucha información
  - Pero solo proporcionan una única instantánea en el tiempo
- **Modelos teóricos y computacionales:**
  - Nos da información sobre la evolución del objeto (antes y después de la etapa observada)

# Esta tan fácil hacer simulaciones?

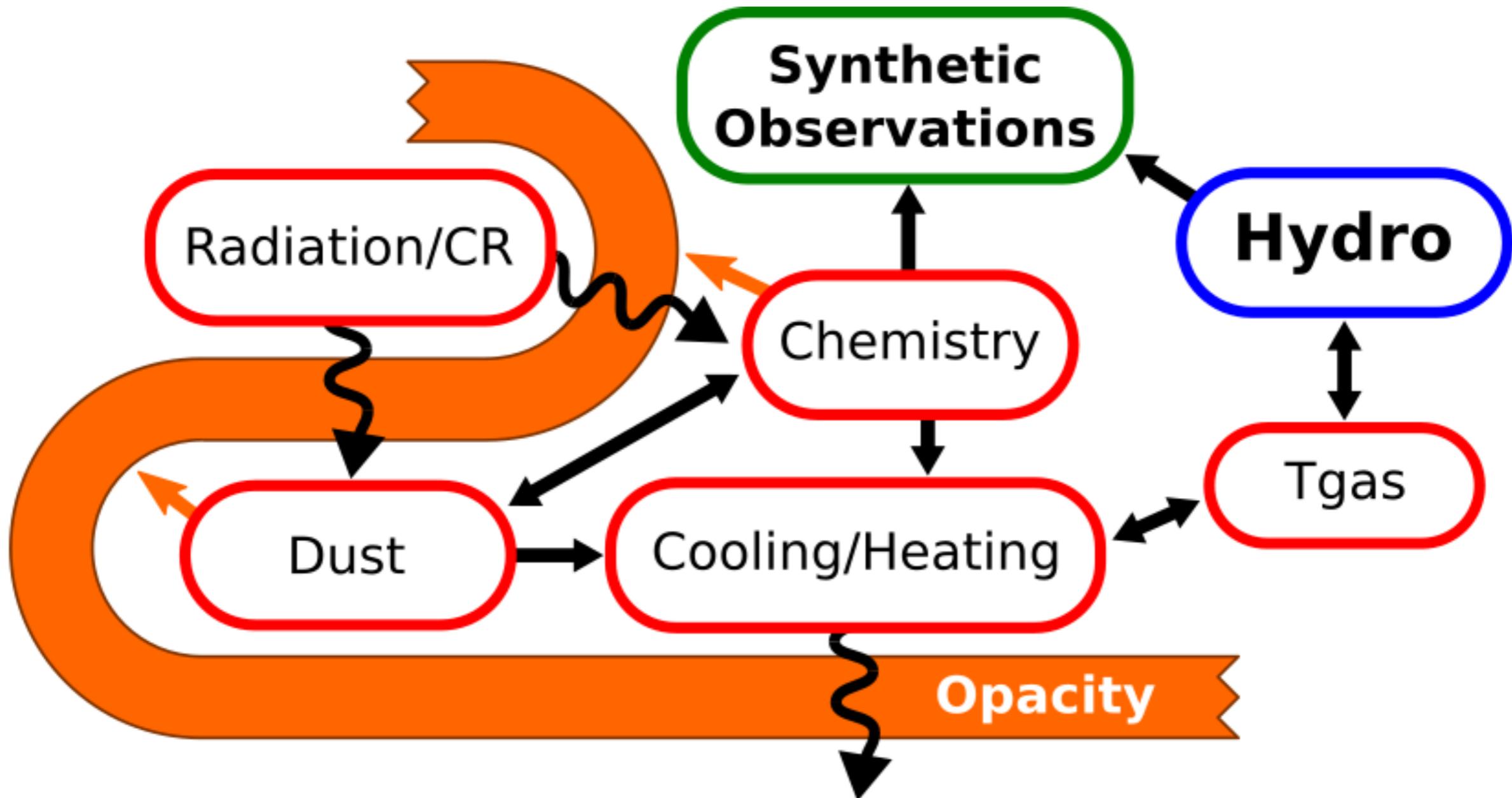


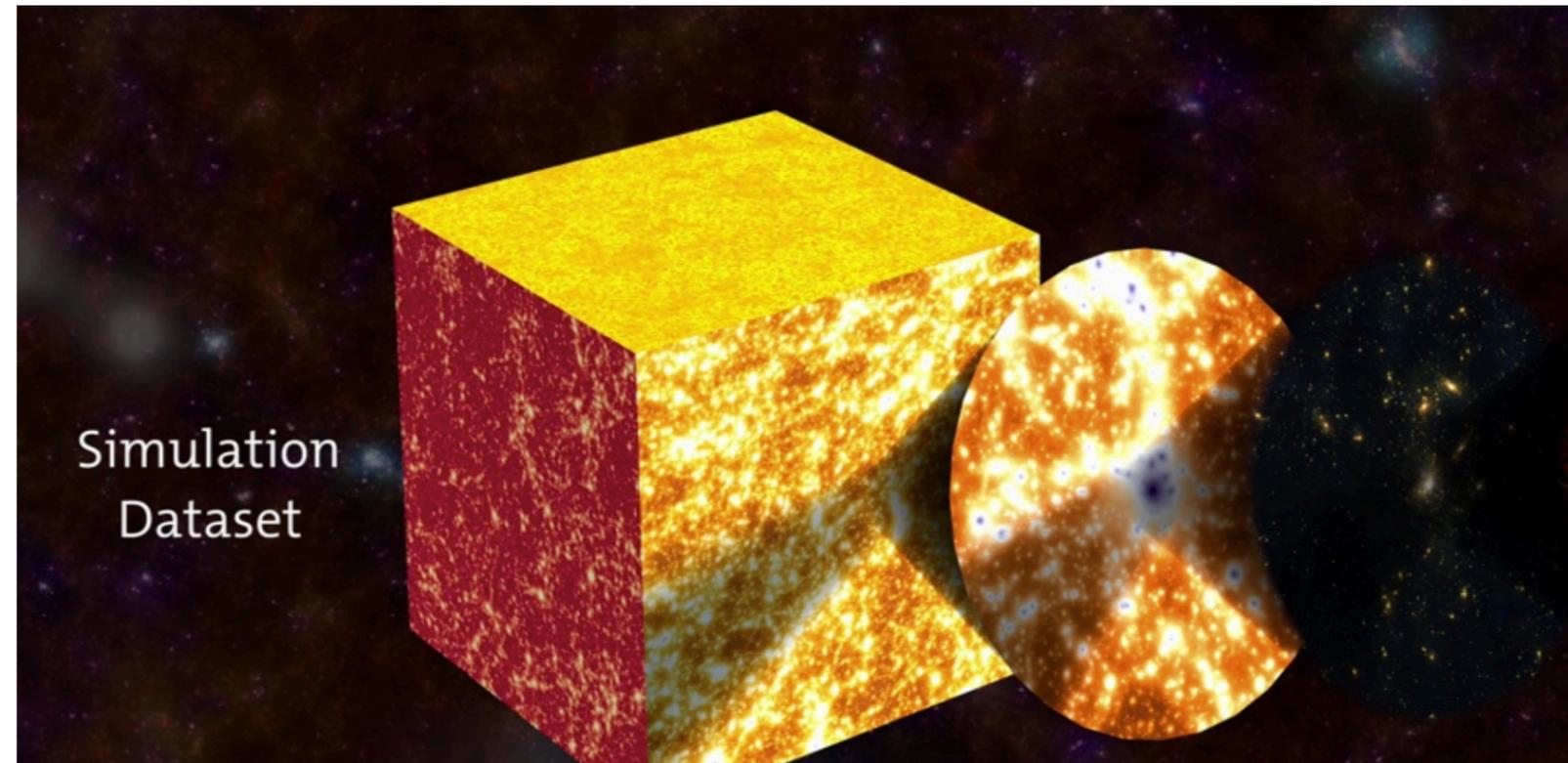
- **Multifísica**
- **Multifásico**
- **Multiescala**

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

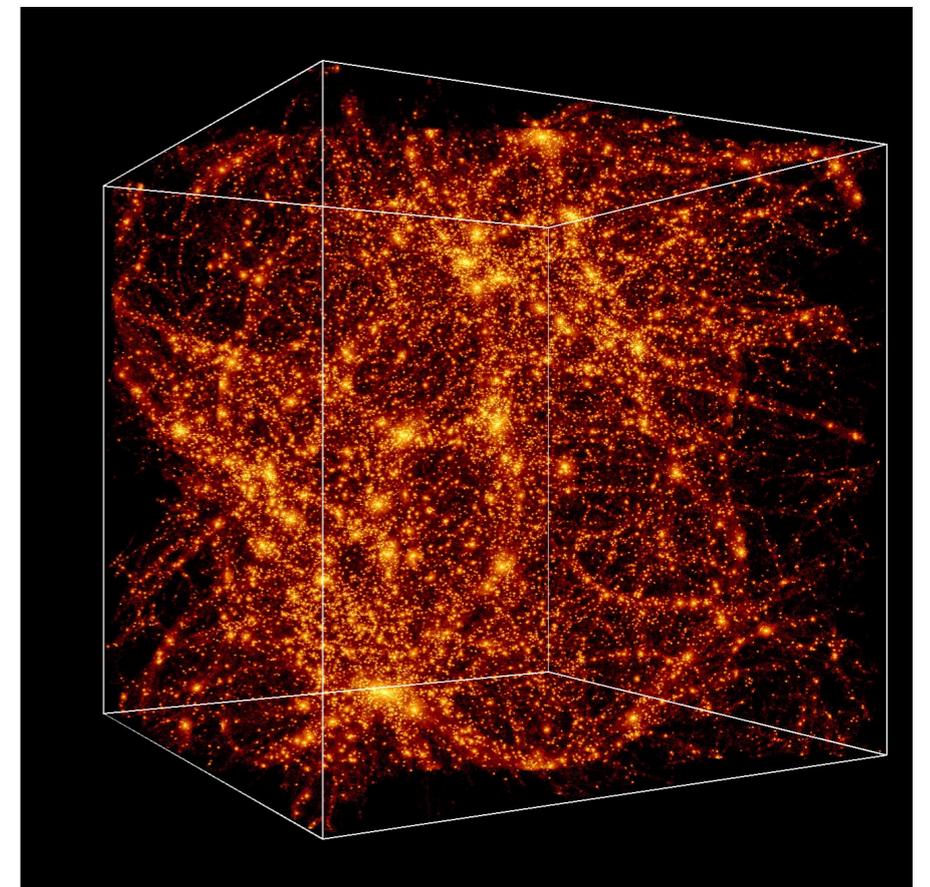
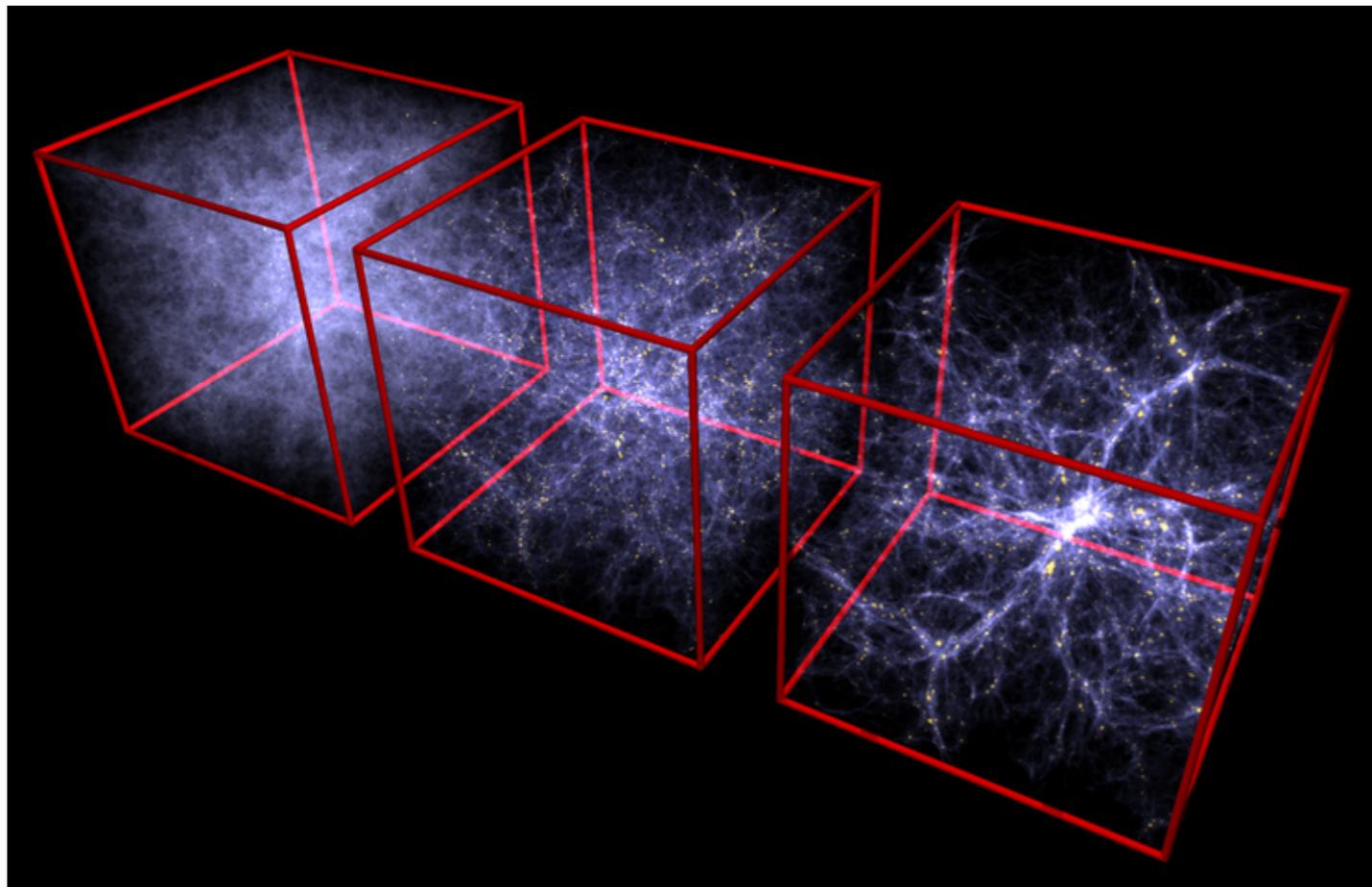
# QUIMICA-HIDRODINAMICA

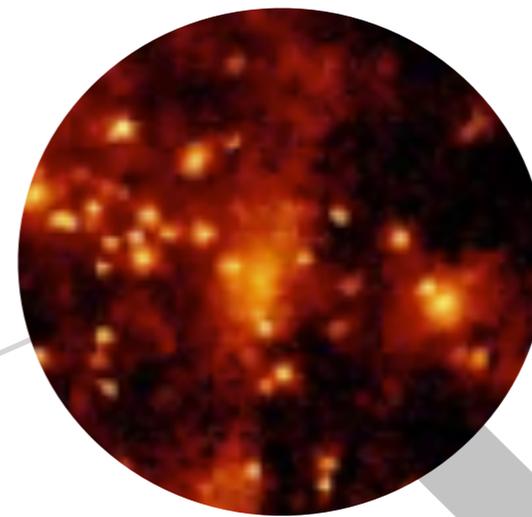
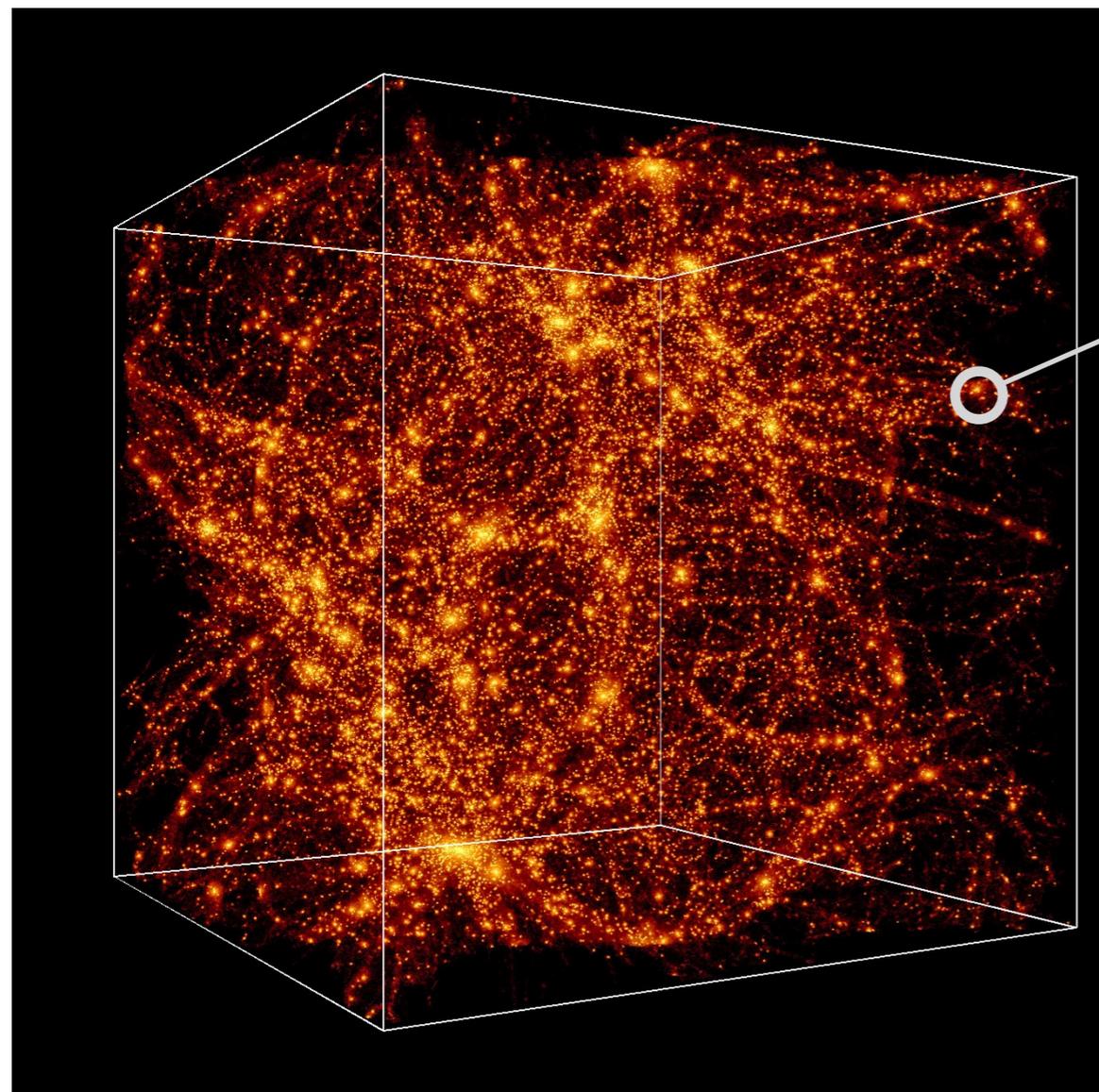
- **Hidrodinámica:** modelar el crecimiento de estructuras en el universo
- **Química:** Abundancias / Termodinámica



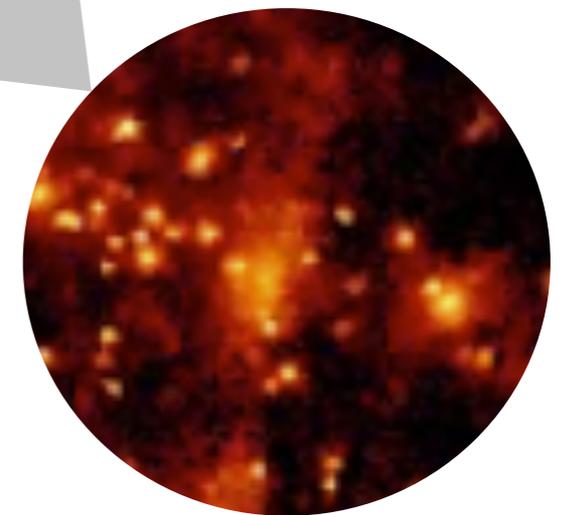
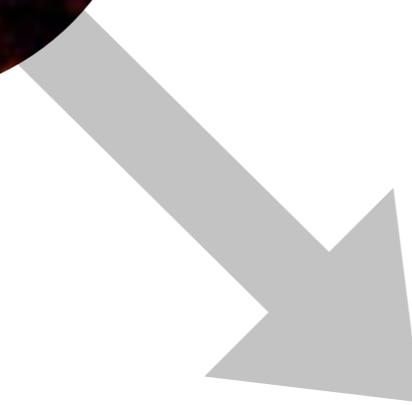


Credit: Volker Springel - MPA





ISM particles  
Time =  $t_0$



ISM particles  
Time =  $t_0 + \Delta t$

Actualizar un elemento de volumen de gas cada time-step  
>  $10^6$  partículas (gas), >  $10^4$  time-steps

Parte más pesada junto con la solución de la  
ecuación de Poisson (gravity solver)

# Herramientas: hidrodinámica + química

**K R O M E**  
better science through chemistry

Reissl+2017

**POLARIS**

Hopkins+2014  
**GIZMO**



**Synthetic  
Observations**

**Hydro**

Radiation/CR

Chemistry

Tgas

Dust

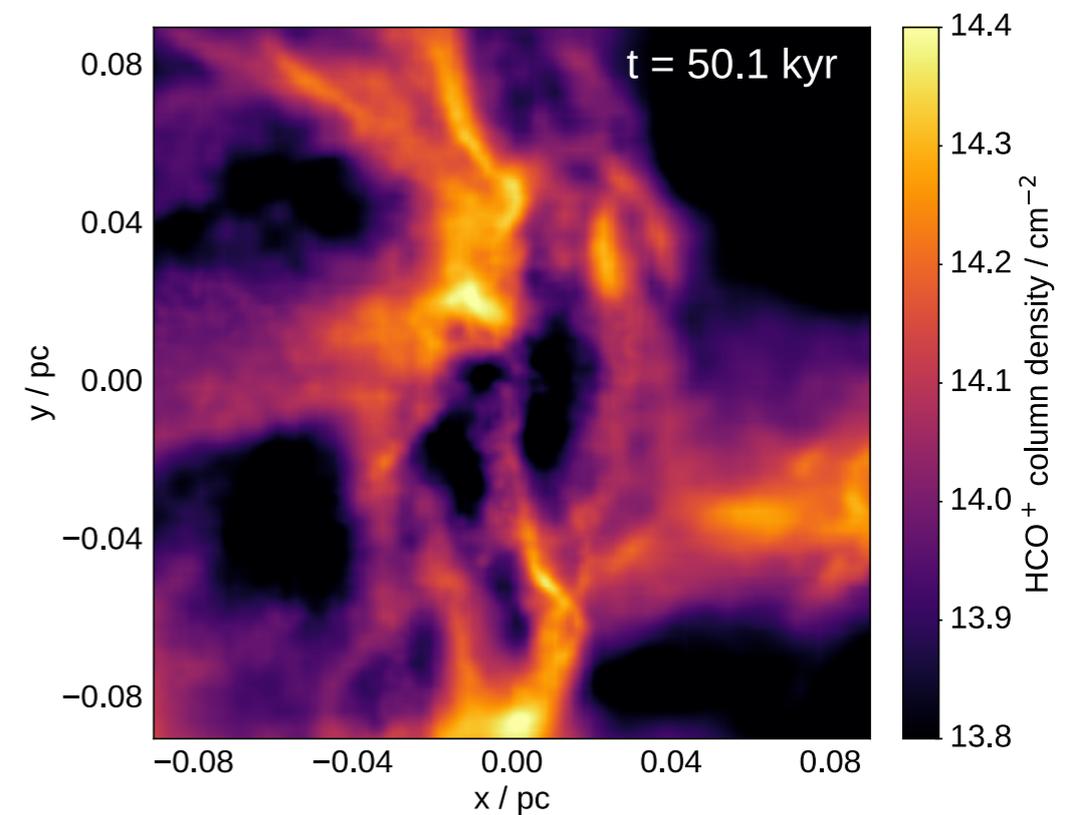
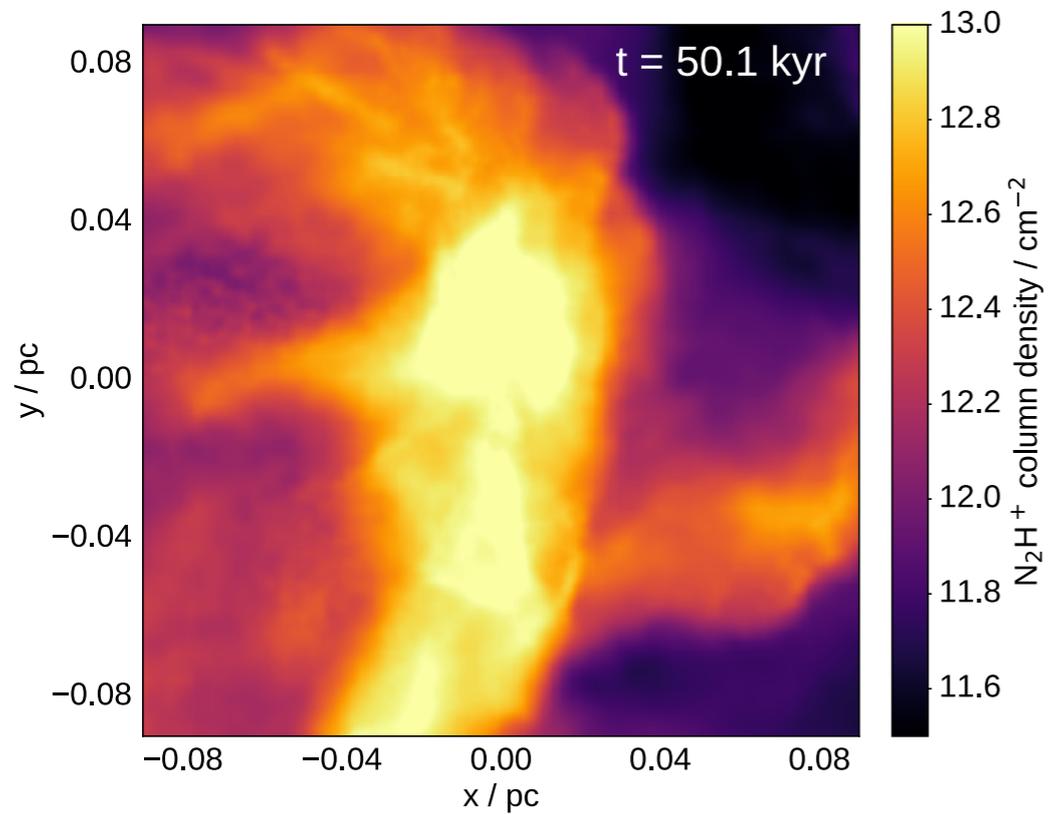
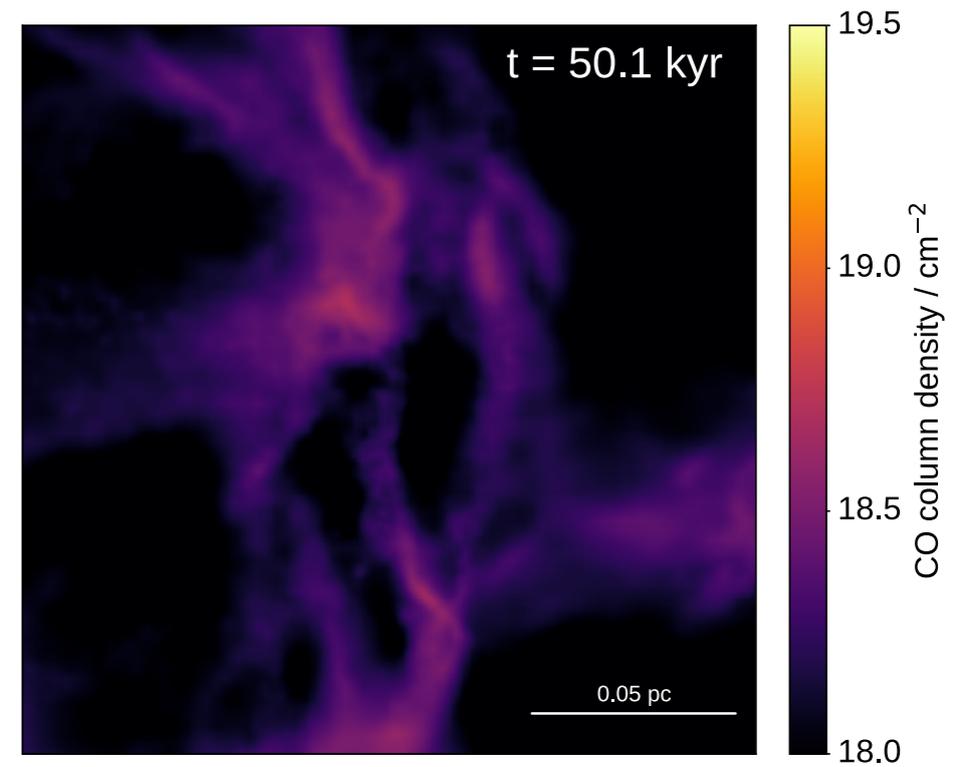
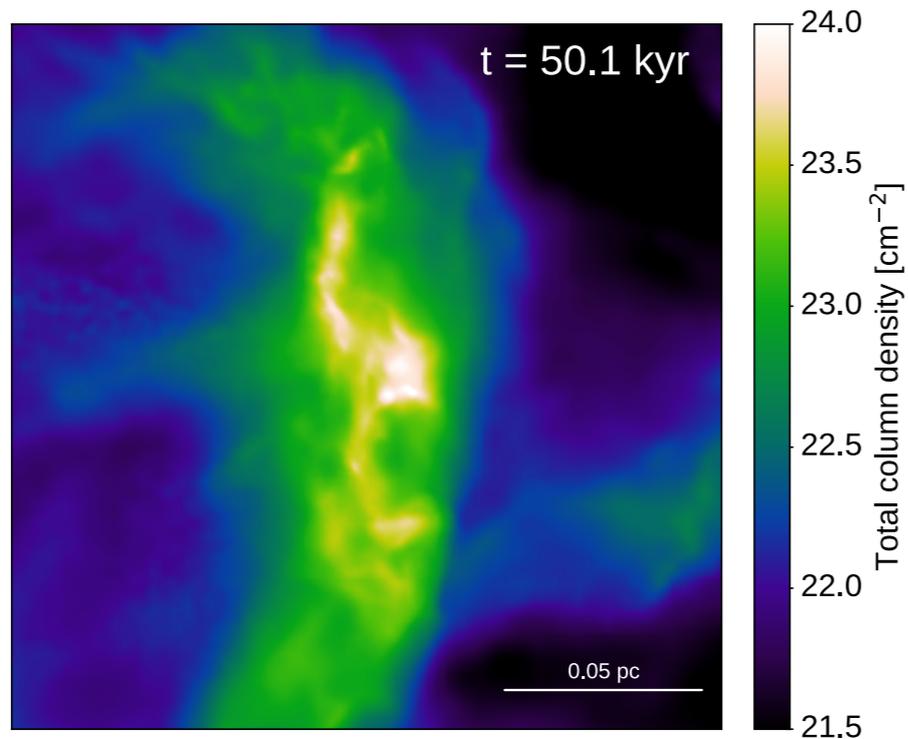
Cooling/Heating

Opacity

Grassi, SB+2014

Stefano Bovino

# Ejemplos: formacion estelar de alta masa



# 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
  - Atmosferas planetarias
  - Astroquímica de laboratorio (interacción gas-polvo)

# Colaboraciones internacionales



**Paola Caselli, MPE, Munich**



**Cecilia Ceccarelli, Grenoble**



**Tommaso Grassi, LMU, Munich**



**Alessandro Lupi, SNS, Pisa**



**Andrea Giannetti, IRA, Bologna**

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

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