



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

Simulaciones Computacionales en Astroquímica: Estructura y Reactividad de Moléculas Interestelares

Carmen Barrientos

Departamento de Química Física y Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, 47011 Valladolid, Spain
carmen.barrientos@uva.es

La Química Computacional se ha convertido en una herramienta muy útil para abordar de una manera global y racional los diferentes problemas químicos (y fisicoquímicos especialmente). Uno de los campos en que resulta más apropiada la aplicación de los métodos teóricos es la Química Interestelar o Astroquímica. Las condiciones generales del medio interestelar (ISM), de bajas presiones y temperaturas, hacen que en este tipo de química las interacciones con el entorno sean prácticamente inexistentes. Además, debido a las condiciones del ISM, pueden existir durante largos períodos de tiempo moléculas altamente reactivas, y al ser muy difícil la experimentación muchas sustancias allí presentes no se han podido aislar en el laboratorio. Por todo ello, el campo de la Química Interestelar constituye un medio ideal para la aplicación de los métodos teóricos, y además resulta muy útil cuando la experimentación no es posible.

El número de moléculas identificadas en el espacio, tanto en las nubes interestelares como en las capas circunestelares, aumenta de forma continua debido al uso de telescopios cada vez más potentes. Entre las moléculas detectadas, presentan un interés especial las que contienen hidrógeno, carbono, oxígeno y nitrógeno que se consideran precursoras de biomoléculas. En particular, la búsqueda de aminoácidos y sus precursores en el medio interestelar es uno de los retos más desafiantes de la Astroquímica. A pesar de varias búsquedas radioastronómicas, no ha sido posible una identificación concluyente del aminoácido más sencillo, la glicina. Sin embargo, la reciente detección en el espacio de moléculas relacionadas como el amino acetonitrilo ha impulsado la búsqueda de glicina interestelar.

En la presente charla nos centraremos en el estudio de la estructura y síntesis de moléculas de relevancia interestelar, dedicando especial atención a la estructura y síntesis de moléculas prebióticas.

P. Redondo, A. Largo, C. Barrientos, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2018, 478, 3042–3048.

P. Redondo, C. Barrientos, A. Largo, *Astrophys. J.*, 2019, 871:180.

M. Sanz-Novo, A. Largo, P. Redondo, C. Barrientos, *ACS Earth and Space Chemistry*, 2019, 3, 1170-1181

P. Redondo, A. Largo, C. Barrientos, *Astrophys. J.*, 2020, 899:135.

P. Redondo, M. Sanz-Novo, A. Largo, C. Barrientos, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 2020, 492, 1827–1833

M. Sanz-Novo, I. León, J. L. Alonso, A. Largo, C. Barrientos *Astron. Astrophys.* 2020, 644, A3, 1-10

Proyecto, con referencia VA244P20, cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional y la Conserjería de Educación de la Junta de Castilla y León de España.