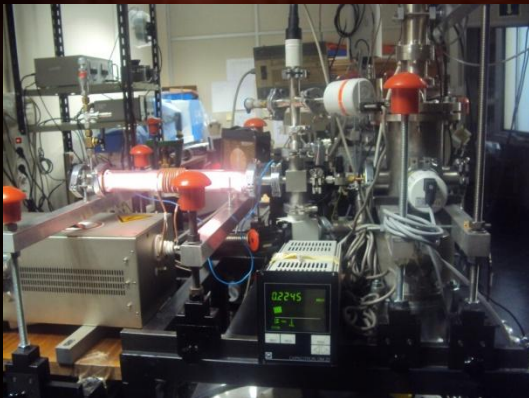


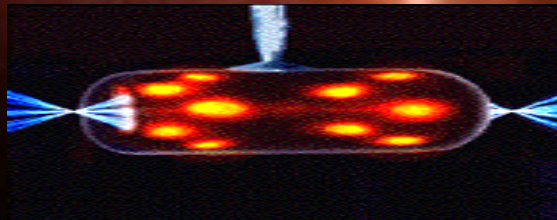
Astrofísica de laboratorio y modelización: un camino para una mejor comprensión del universo

Vicente Timón

Instituto de Estructura de la Materia (IEM-CSIC), Serrano 123, 28006 Madrid, Spain



Laboratorio de plasmas IEM



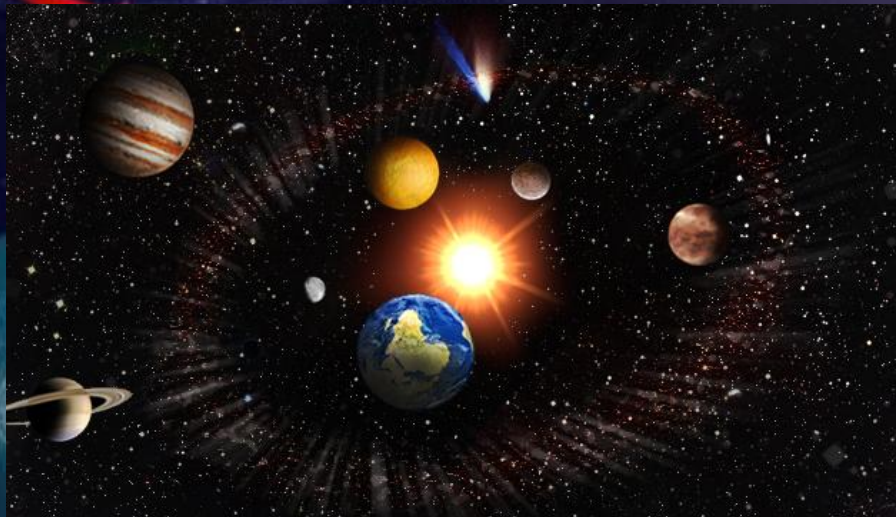
Cluster Finisterrae 2 (CESGA)

¿Que es la astrofísica?

La Astrofísica es la aplicación de la Física a la Astronomía, al estudio de la estructura, composición y evolución de los astros”

Astro – son cuerpos celestes que tienen una forma definida. Como estrellas, planetas, satélites, cometas etc

Física – El estudio de las propiedades de los cuerpos y las leyes que rigen las transformaciones que afectan a su estado y a su movimiento, sin alterar su naturaleza.

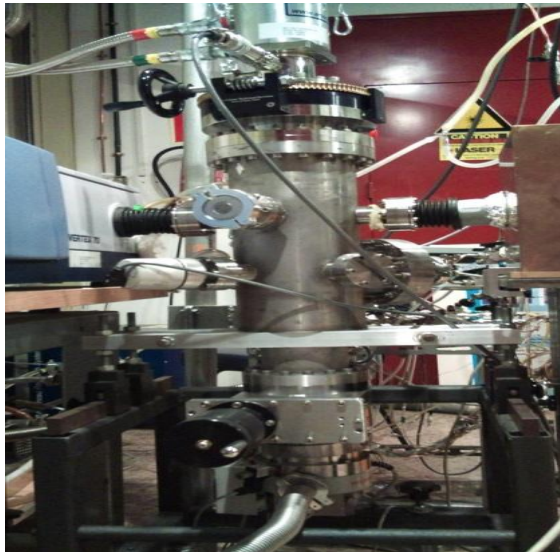


VIDEO

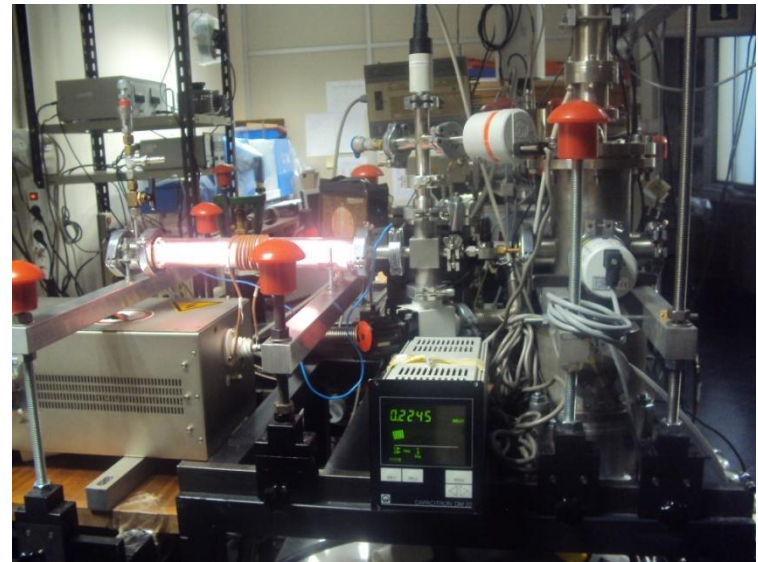
El Laboratorio

Laboratorio.

Es un lugar que se encuentra equipado con los medios necesarios para llevar a cabo **experimentos**, [investigaciones](#) o [trabajos](#) de carácter científico o técnico. En estos espacios, las condiciones ambientales se **controlan** y se **normalizan** para evitar efectos indeseados y permitir que las pruebas sean repetibles.



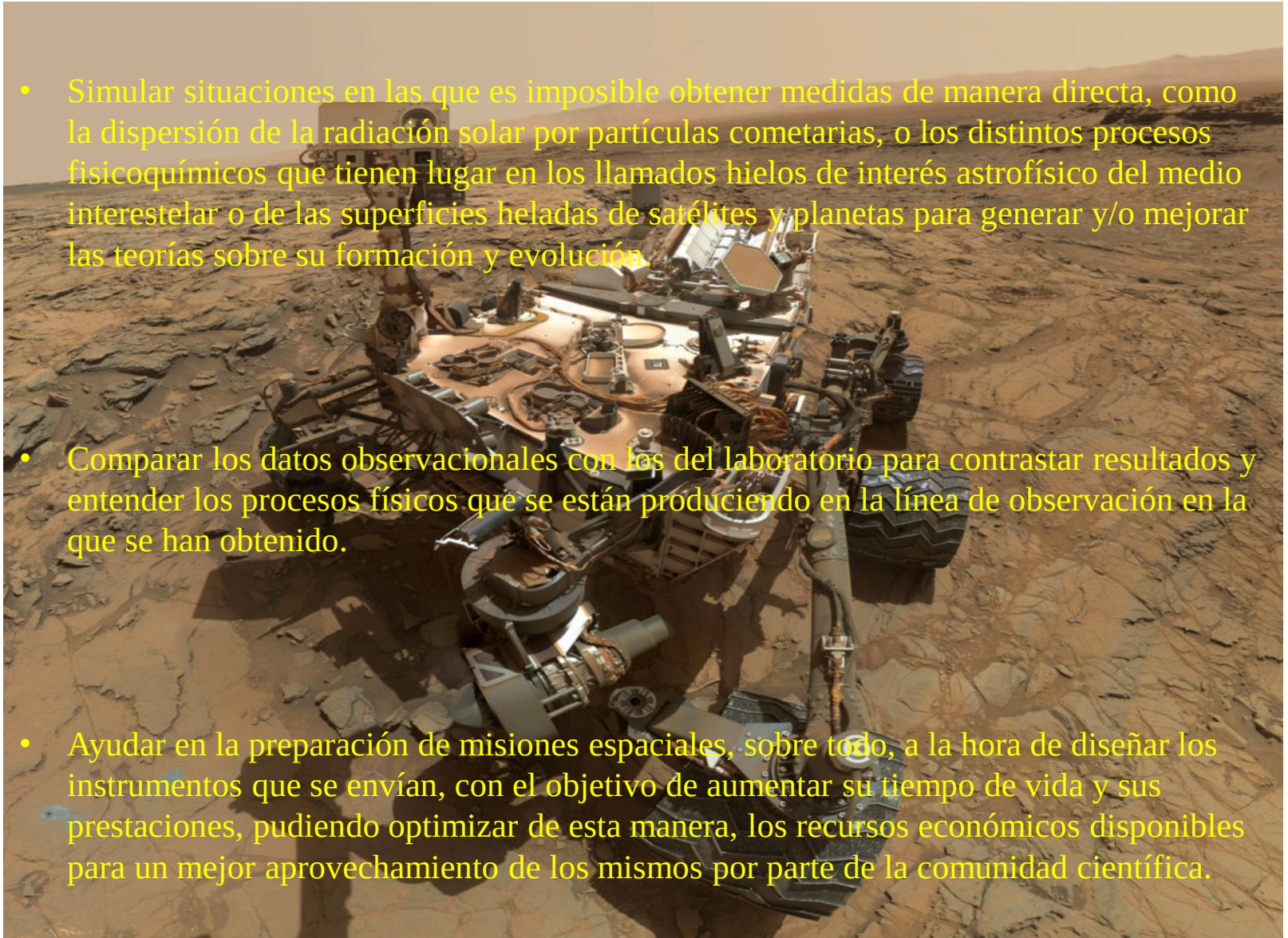
Laboratorio de hielos del IEM



Laboratorio de plasmas fríos del IEM

Objetivos del laboratorio de astrofísica

- Simular situaciones en las que es imposible obtener medidas de manera directa, como la dispersión de la radiación solar por partículas cometarias, o los distintos procesos fisicoquímicos que tienen lugar en los llamados hielos de interés astrofísico del medio interestelar o de las superficies heladas de satélites y planetas para generar y/o mejorar las teorías sobre su formación y evolución.
- Comparar los datos observacionales con los del laboratorio para contrastar resultados y entender los procesos físicos que se están produciendo en la línea de observación en la que se han obtenido.
- Ayudar en la preparación de misiones espaciales, sobre todo, a la hora de diseñar los instrumentos que se envían, con el objetivo de aumentar su tiempo de vida y sus prestaciones, pudiendo optimizar de esta manera, los recursos económicos disponibles para un mejor aprovechamiento de los mismos por parte de la comunidad científica.



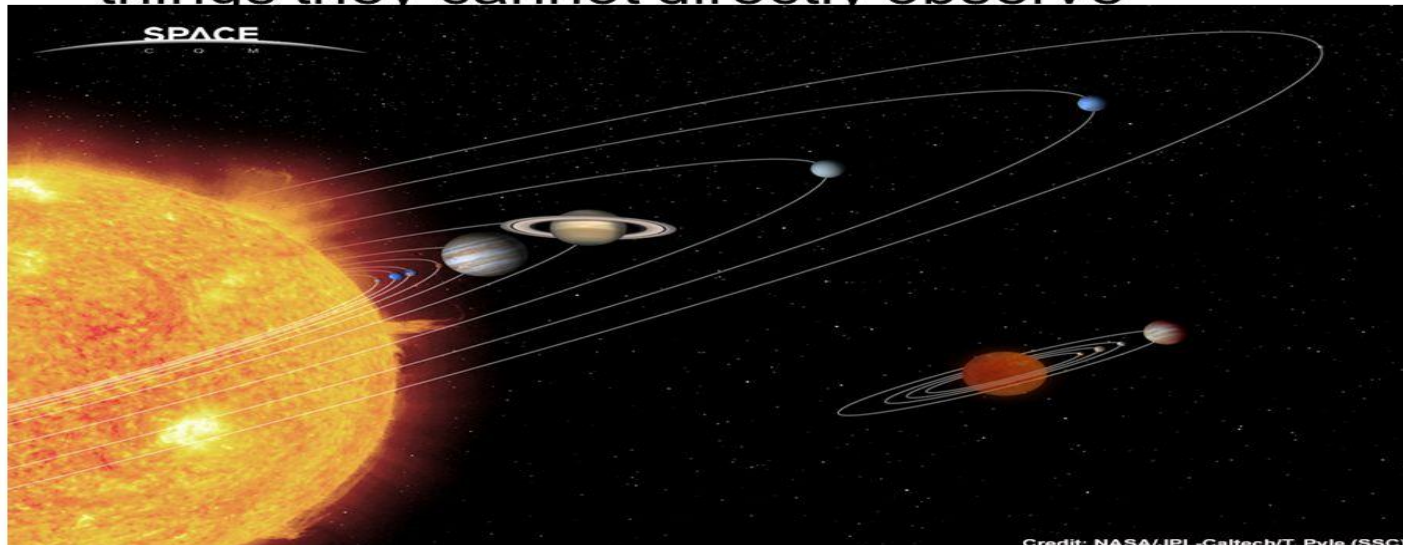
¿Que es la modelización?

La modelación es el proceso mediante el cual se crea una representación o modelo para investigar la realidad.

Es un instrumento de la investigación de carácter material o teórico, creado para reproducir el objeto que se está estudiando. Constituye una reproducción simplificada de la realidad que cumple una función heurística que permite descubrir nuevas relaciones y cualidades del objeto de estudio.

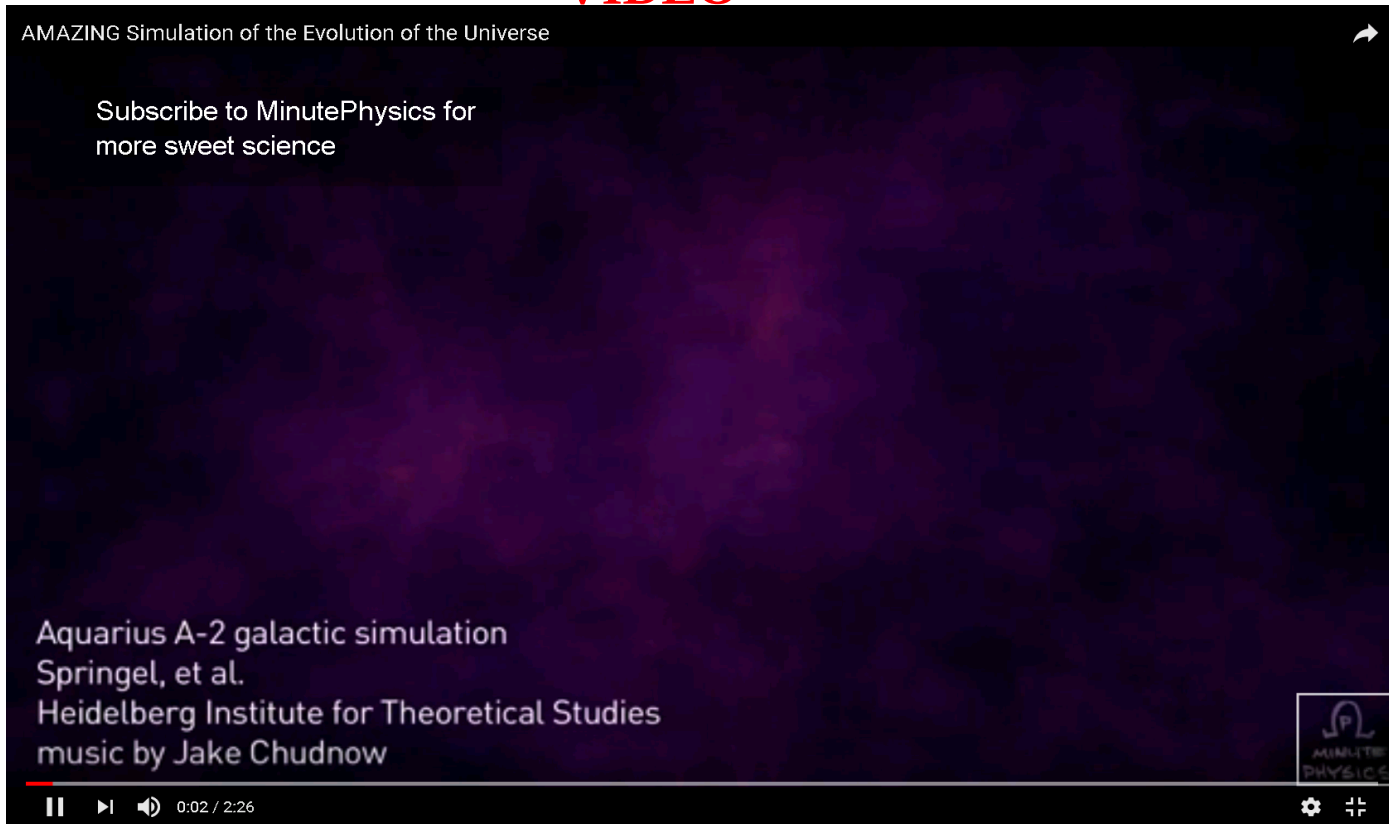
Scientific Modeling

A. Scientists develop models to explain things they cannot directly observe



¿Que hacemos con la modelización?

VIDEO



Simular la evolución de todo el universo

La motivación de realizar experimentos computacionales

Medida y Experimento:

- Muestra
- Instrumento
- Calibración
- Medición



Experimento computacional¹

- Modelo
- Programa
- Prueba del programa
- Cálculos
- Resultados (análisis datos)



Ventajas:

- Mas baratos que los experimentos.
- Uso en condiciones extremas.
- Son predictivos.
- No interacción con aparato medida.

Inconvenientes:

- Tamaño del sistema.
- Modelo
- Tiempo.
- Aproximaciones teoría.

[1] William J. Kaufmann y Larry L. Smarr, Supercomputing and the Transformation of Science, Scientific American Library, New York, 1993.

Simulación atómica mediante el uso de la Física Cuántica

La ecuación de Schrodinger

Si se logra resolver la ecuación para un sistema entonces conoceremos todo acerca del mismo:

$$\vec{p} \Leftrightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \quad \text{or} \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \nabla^2 \Rightarrow$$
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \Psi = \frac{i\hbar \partial \Psi}{\partial t}$$

Ψ es la función de onda, donde esta el contenido de toda la información del sistema mecánico-cuántico



Schrödinger

Para obtener propiedades moleculares necesitamos calcular la función de onda del sistema compuesto por varios núcleos y electrones, $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$. Donde $\mathbf{R}$ son las coordenadas nucleares y $\mathbf{r}$ las electrónicas.

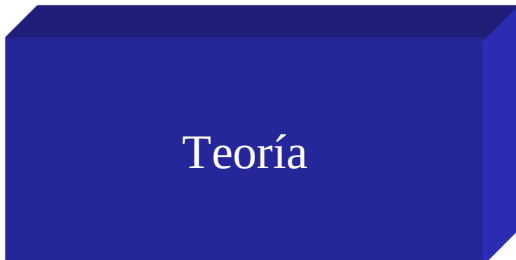
Apliquemos todo esto a la astrofísica



Observación



Experimento



Teoría

IEM

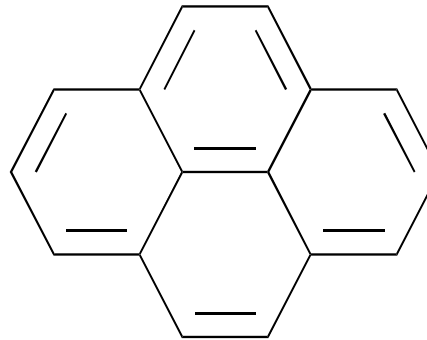
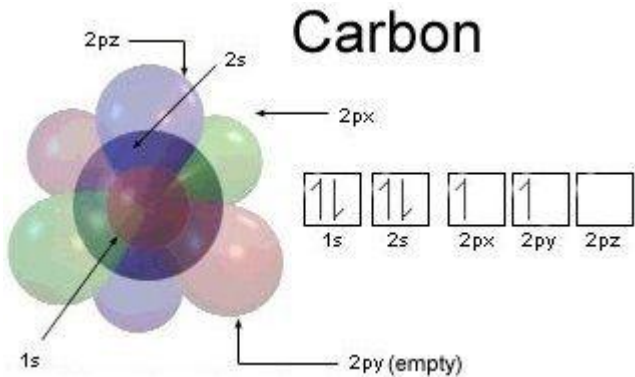
Espectroscopía Infrarroja, Raman y Plasmas fríos (Mis compañeros): Isabel Tanarro, Victor Herrero, Belen Mate, Miguel Angel Moreno, German Molpeceres y José Domenech, Raul Martinez, Dionisio Bermejo, José María Fernandez y Guzman Tejeda.

Teoría (My campo): **Vicente Timón**, Rafael Escribano, Francisco Colmenero and German Molpeceres, Juan Ortigoso y Julio Santos

¿Que investigamos?

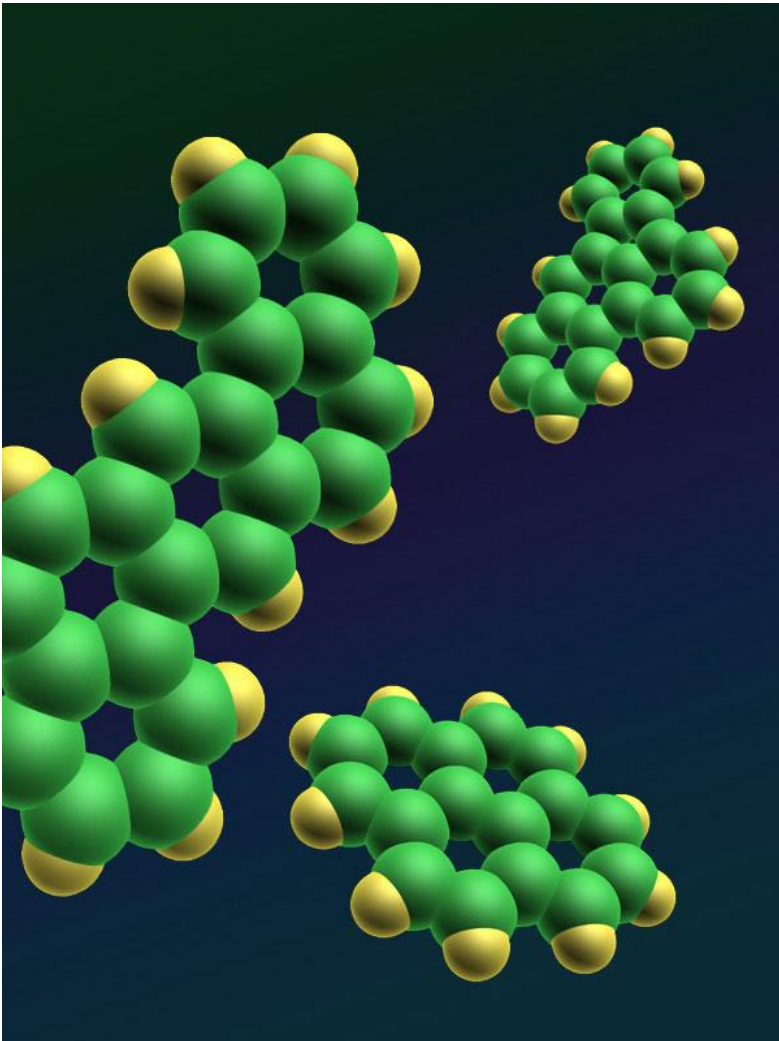
El Carbono

- Hay mucho carbono en el universo



pyreno

Hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs)



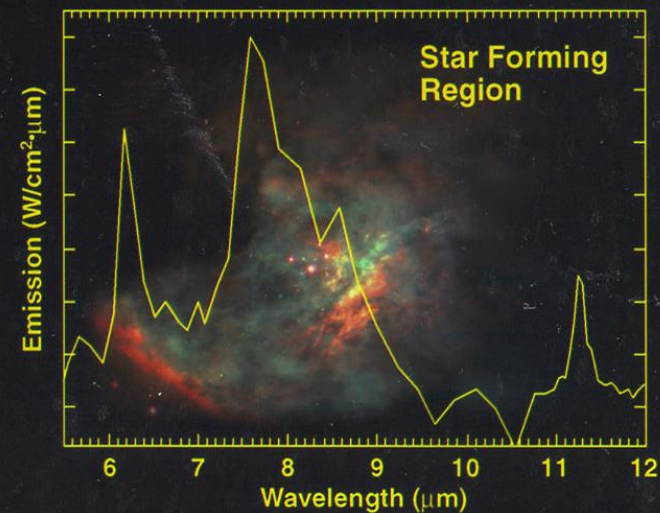
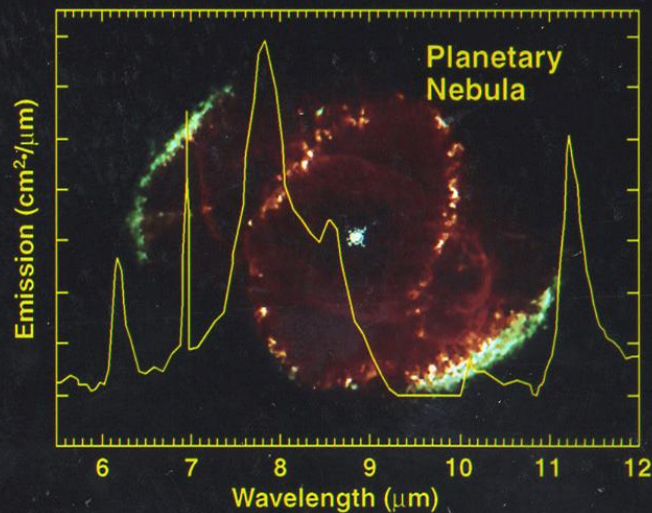
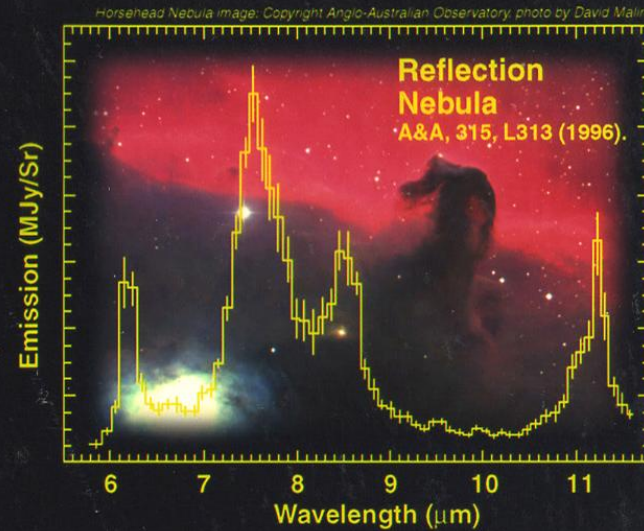
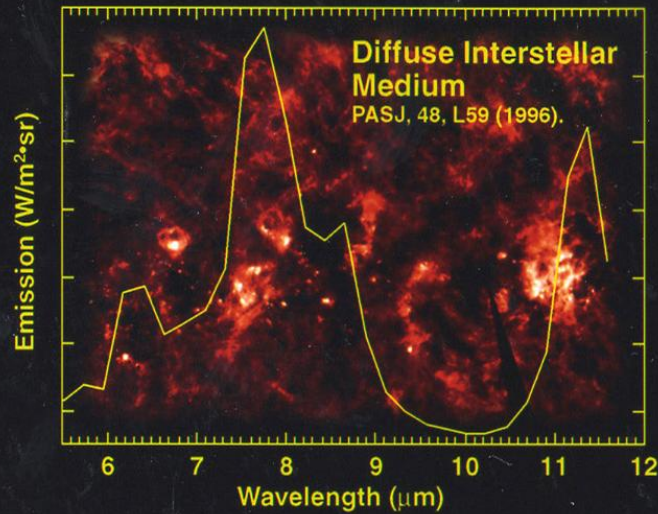
- * Hidrocarburos cíclicos enlazados fuertemente unidos ("aromáticos")
- * Funciones prominentes de emisión no térmica
- * Forma en estrellas de carbono (Una **estrella de carbono** es una **estrella** de tipo tardío similar a las gigantes rojas (u ocasionalmente enana roja) cuya atmósfera contiene más **carbono** que oxígeno (a diferencia de las **estrellas** "normales")
- * El mecanismo de reacción está muy bien estudiado experimentalmente

Extremadamente estables:

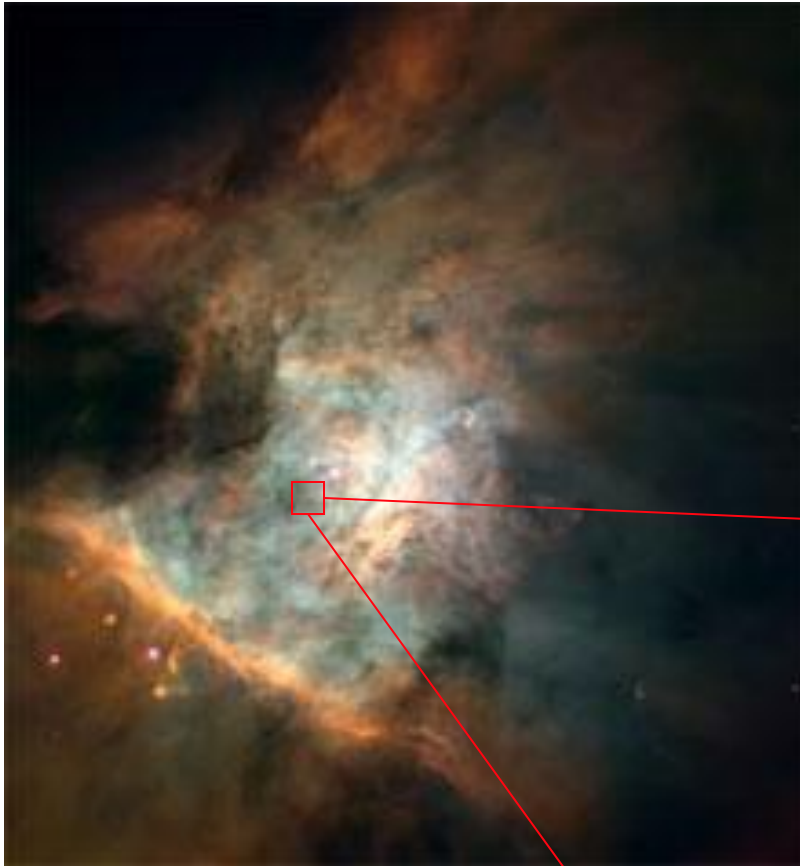
- Condiciones oxidación/reducción
- Altas temperaturas
- Radiación UV

En ISM: ~10% of C es PAHs

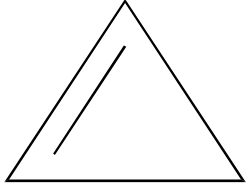
PAHs en entornos astrofísicos



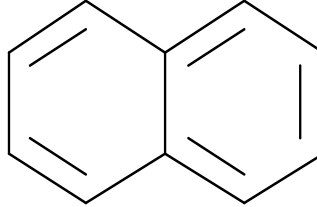
“Discos protoplanetarios”



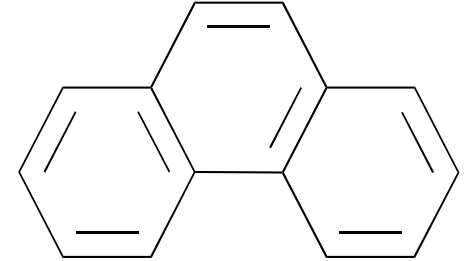
PAH y compuestos relativos



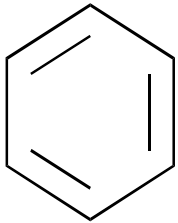
Ciclopropeno



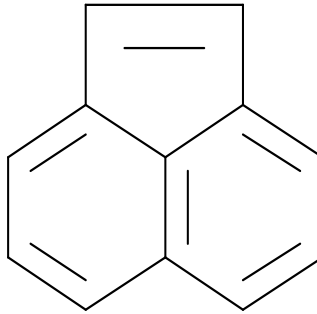
Naftaleno



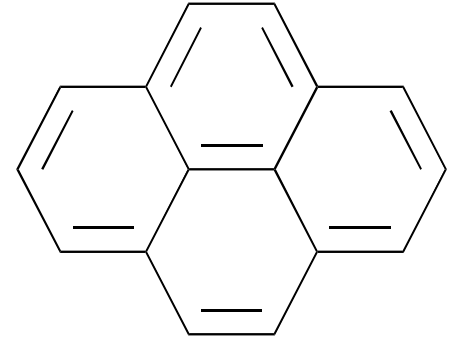
Fenantreno



Benzeno



Acenanteno



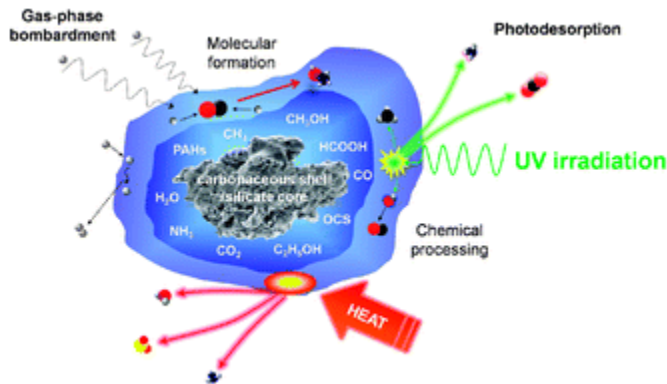
Pireno

IEM-Carbono amorfo hidrogenado (a-C:H)

HAC (a-CH)*

Motivation

Se sabe que una gran cantidad de carbono interestelar forma hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAC`s) y granos de polvo carbonáceo. Se cree que la composición de estos granos es similar a la del carbono amorfo hidrogenado (HAC).



Grano de polvo interestelar con hielo**



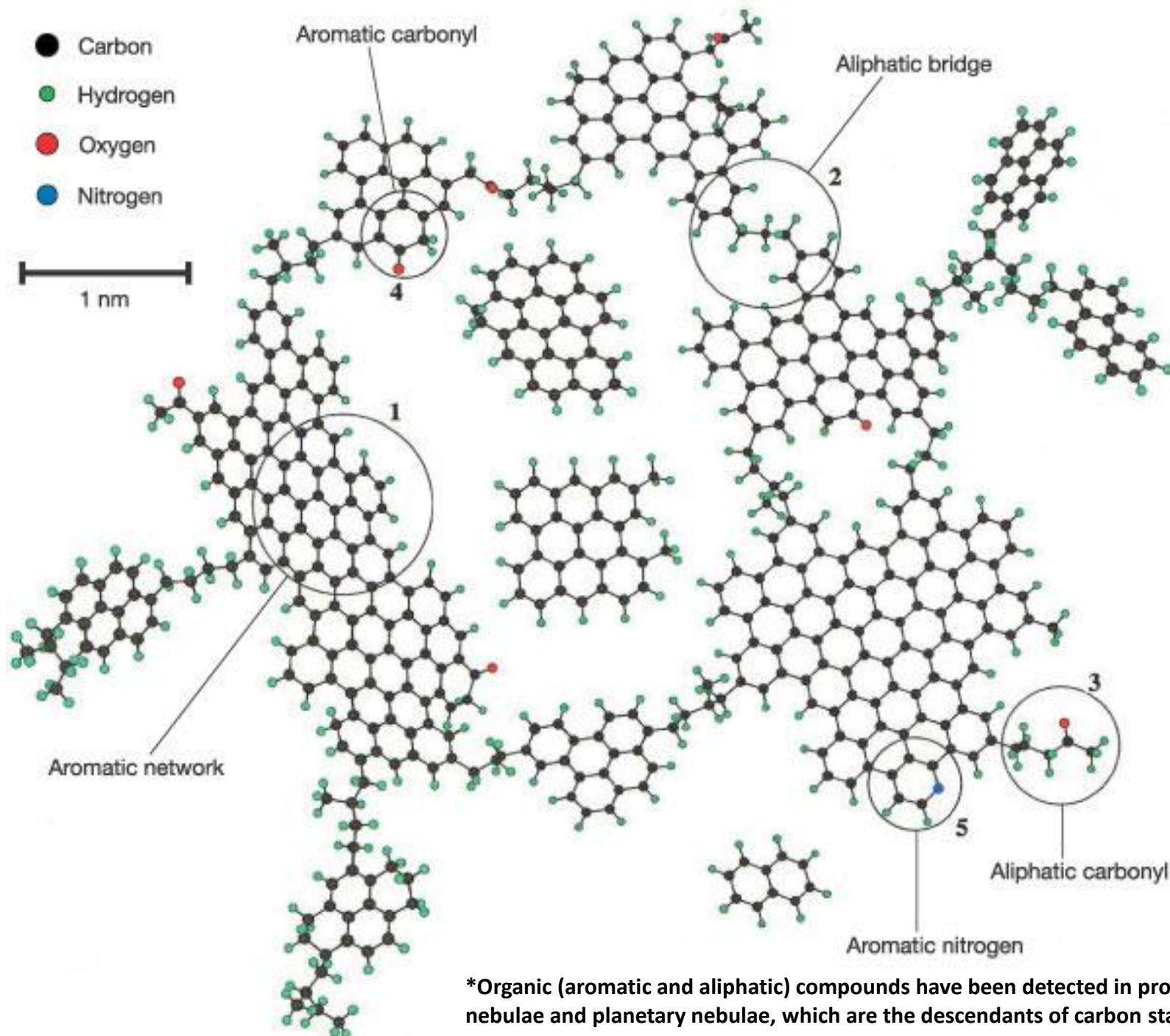
Luminous infrared galaxy WISE J2246-0526. Image credit: NASA / JPL-Caltech

Granos carbonaceos en galaxias
luminosas (visión infrarroja)***

*Timon, V., et al. (2015). "Theoretical model of the interaction of glycine with hydrogenated amorphous carbon (HAC)." *Physical Chemistry Chemical Physics* **17**(43): 28966-28976.

Burke, D. J. and W. A. Brown (2010). "Ice in space: surface science investigations of the thermal desorption of model interstellar ices on dust grain analogue surfaces." *Physical Chemistry Chemical Physics* **12(23): 5947-5969.

***E. Dartois¹ and G. M. Muñoz-Caro, Carbonaceous dust grains in luminous infrared galaxies, *A&A* **476**, 1235-1242 (2007)



***Kwok, Nature 430, 895 (2004)**

***Organic (aromatic and aliphatic) compounds have been detected in proto-planetary nebulae and planetary nebulae, which are the descendants of carbon stars.**

Carbono amorfo hidrogenado en el IEM

Set up. La deposición de la película de carbono amorfo hidrógeno (a-C: H) se desarrolló mediante deposición de vapor químico mejorada con plasma (PECVD) en un reactor de descarga de RF acoplado inductivamente *

Objetivo: Carbono interestelar.

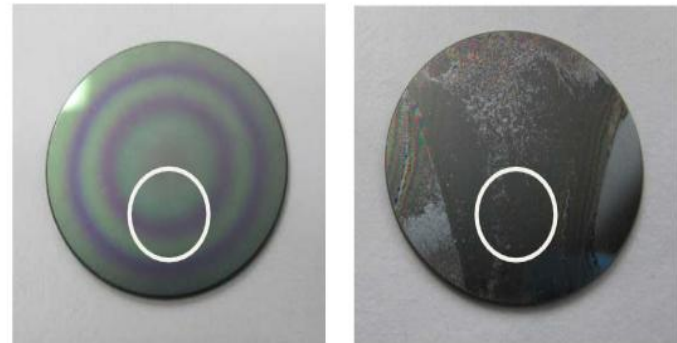
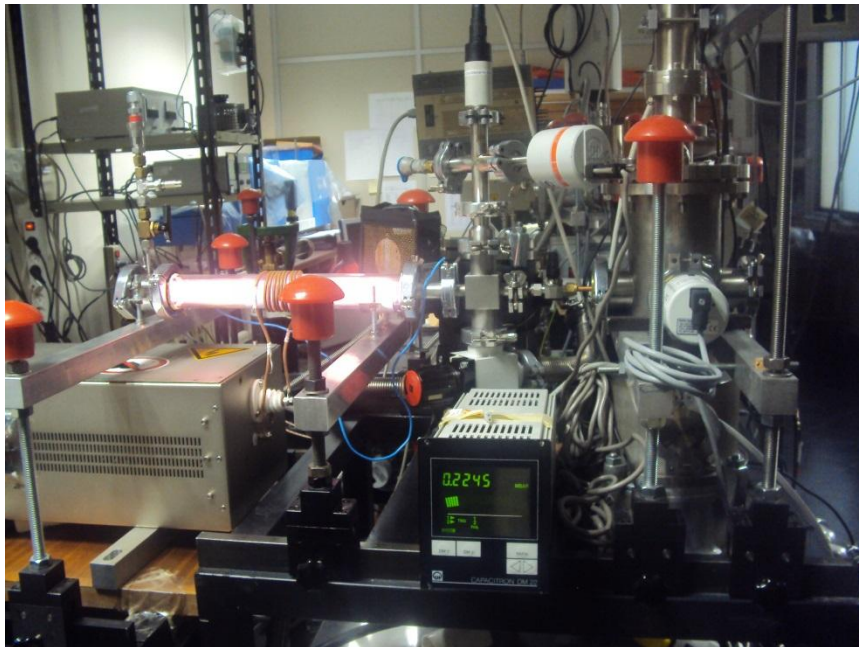
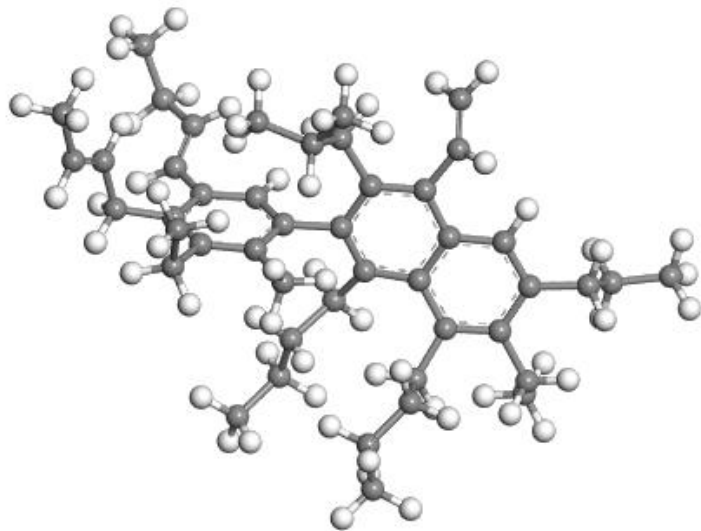


Fig. 1: Samples of hydrogenated amorphous carbon deposited on Si by PECVD in the inductively coupled RF discharge reactor. Left sample: HAC1, grown outside the inductive coil. Right sample: HAC2, grown inside the inductive coil (see text). The circles indicate the regions used for spectroscopic and/or processing experiments and for the deposition of glycine.

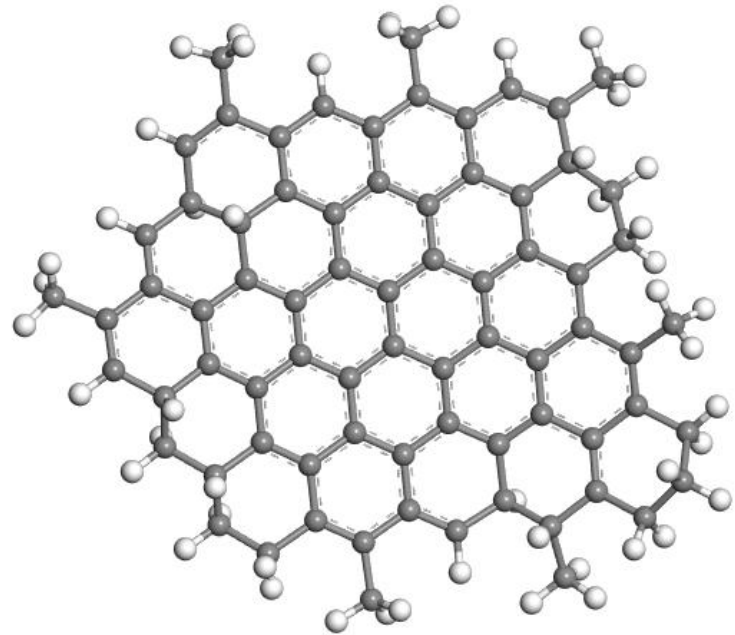
*B. Maté, I. Tanarro, M.A. Moreno, M. Jiménez-Redondo, R. Escribano, and V.J. Herrero, Faraday Discuss 168, 267 (2014).

Estructuras propuestas para los HAC's según observaciones

Cadenas y anillos (RC)



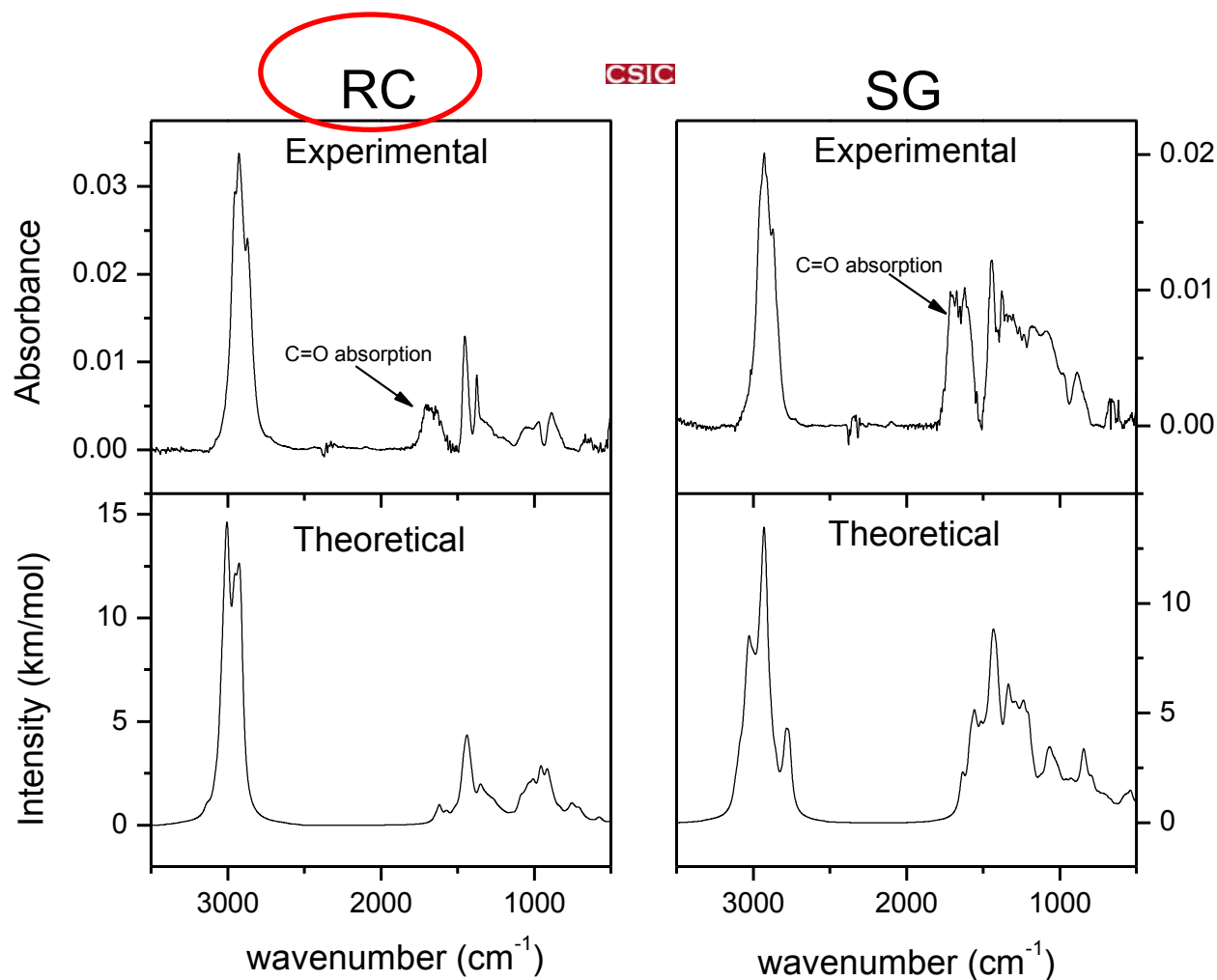
Grafito sustituido (SG)



Dartois, Muñoz Caro, Deboffle, Montagnac & D'Hendecourt. 2005, *Astron. Astrophys.*, 432, 895–908

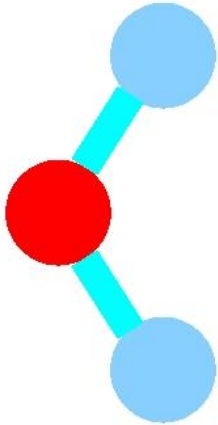
Steglich, Jäger, Huisken, et al. 2013, *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 208, 26

Infrared Spectra

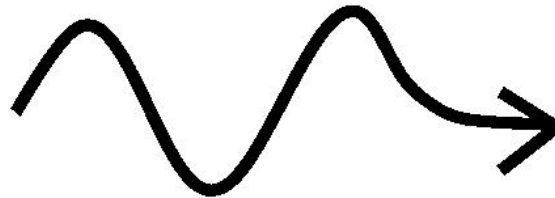


El Agua (H₂O)

MOLECULA
DE AGUA



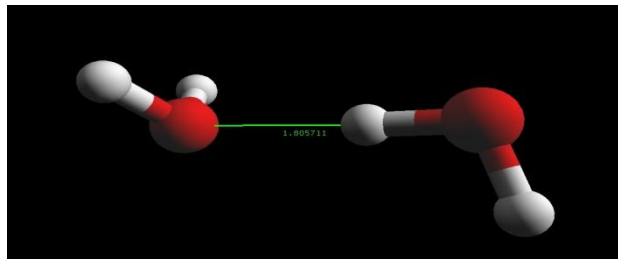
ONDA DE
RADIO



22235.080 MHz

RADIO UNAM FM = 96.1 MHz

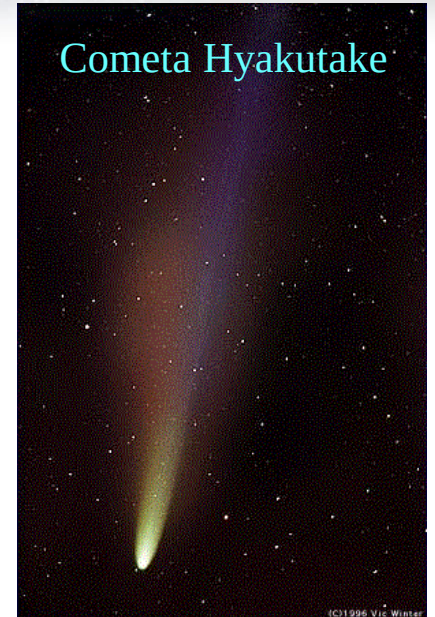
- Hay mucha agua en el universo



VIDEO



Cometa Hyakutake

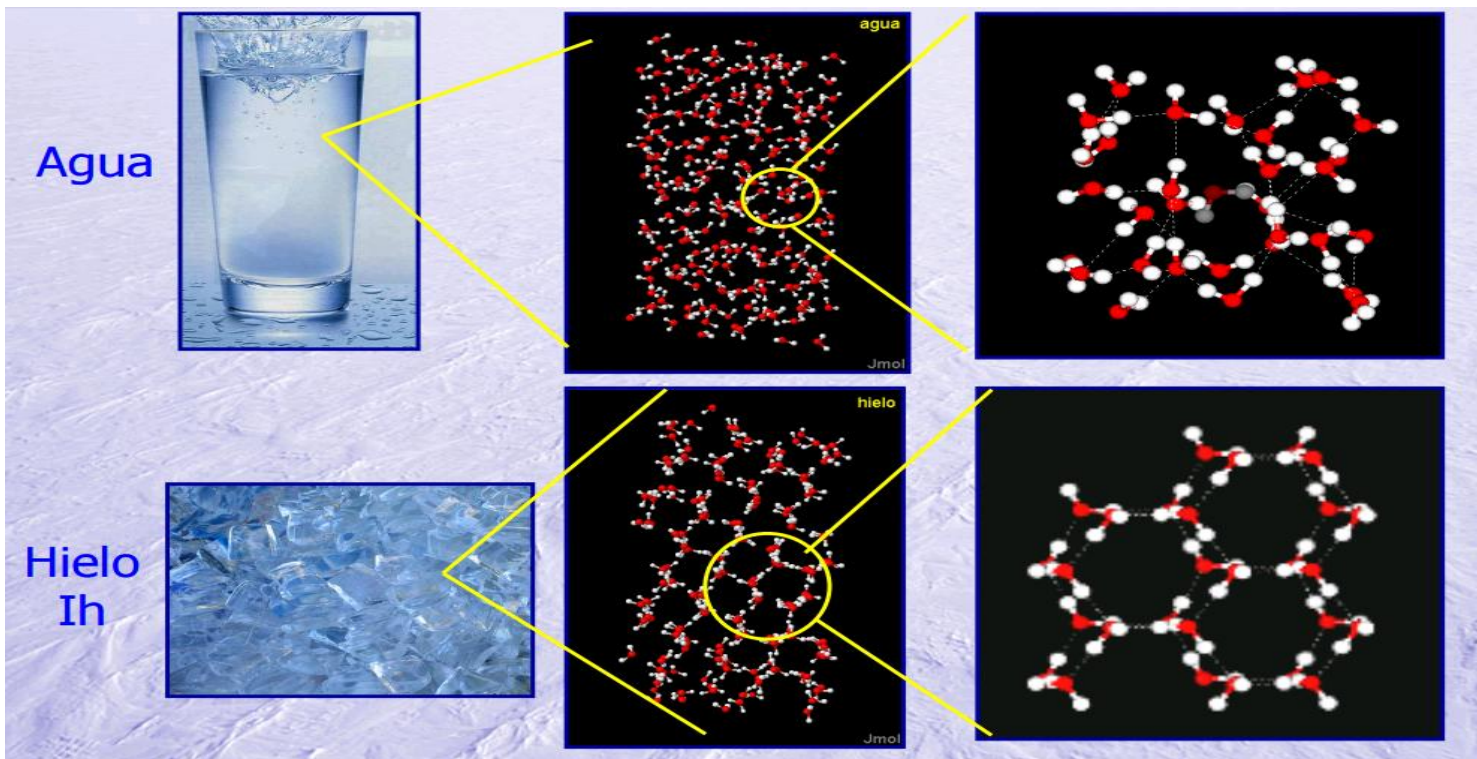
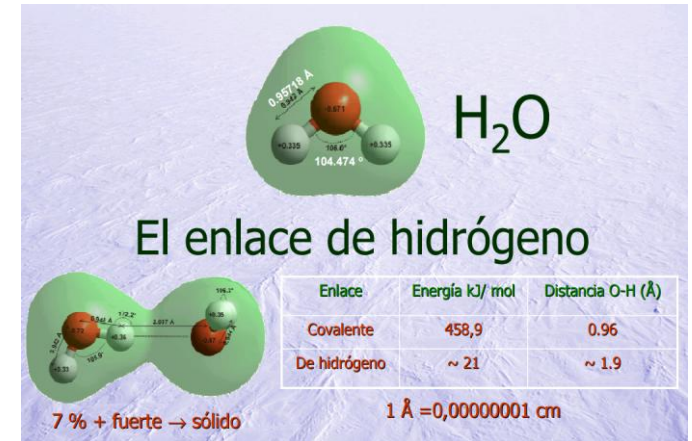


Agua vs Hielo

Definición Científica

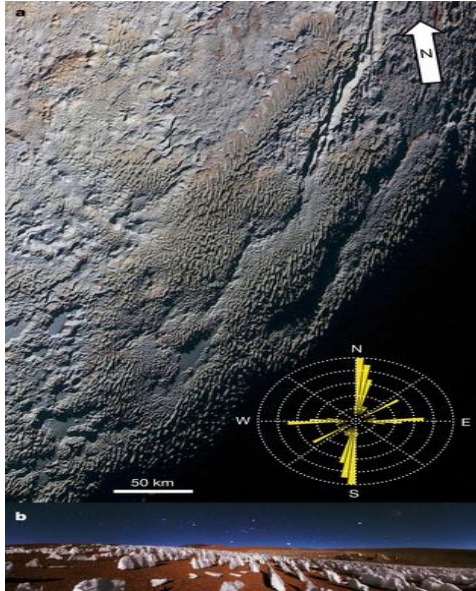
Hielo: se dice de una fase sólida, normalmente cristalina, de una sustancia que se presenta en estado líquido o gas a temperatura ambiente. Diferentes sustancias heladas.

Sin embargo la palabra “hielo” normalmente se refiere al “hielo de agua”, más correctamente a una de sus 15 fases cristalinas conocidas, la denominada Ih.



MOTIVACION $\text{H}_2\text{O} + \text{CH}_4$ Hielos (Plutón)

ICES: CH_4 C_2H_6 H_2O N_2

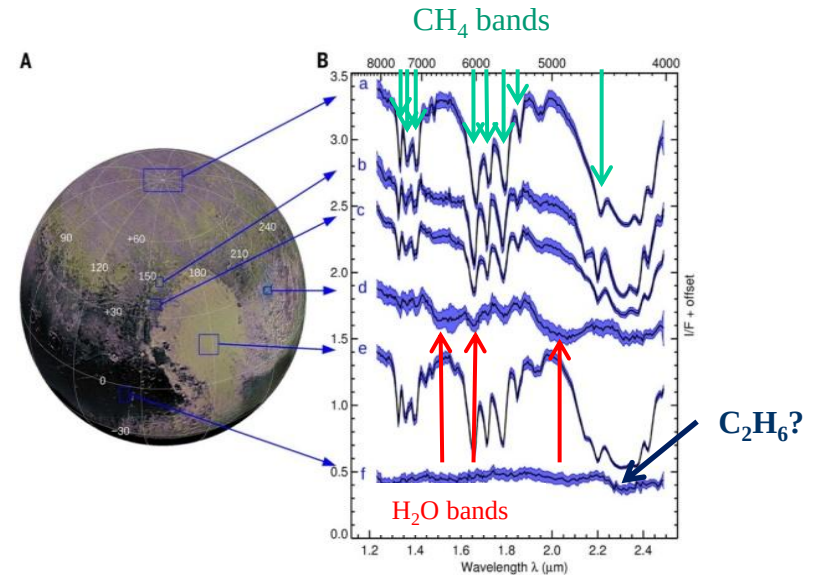


a, Imagen de la región PIA19957 de Plutón adquirida con la cámara Ralph / Multispectral Visual Imaging

b, Penitentes en el desierto de Atacama en América del Sur en la Tierra, mostrando hileras alineadas de cuchillas orientadas hacia la dirección media del Sol [1]

[1] Moores, J. E.; Smith, C. L.; Toigo, A. D.; Guzewich, S. D., Penitentes as the origin of the bladed terrain of Tartarus Dorsa on Pluto. *Nature* **2017**, *541* (7636), 188-190.

[2] W.M. Grundy et al. *Science* **2016**, *351*, 1283.



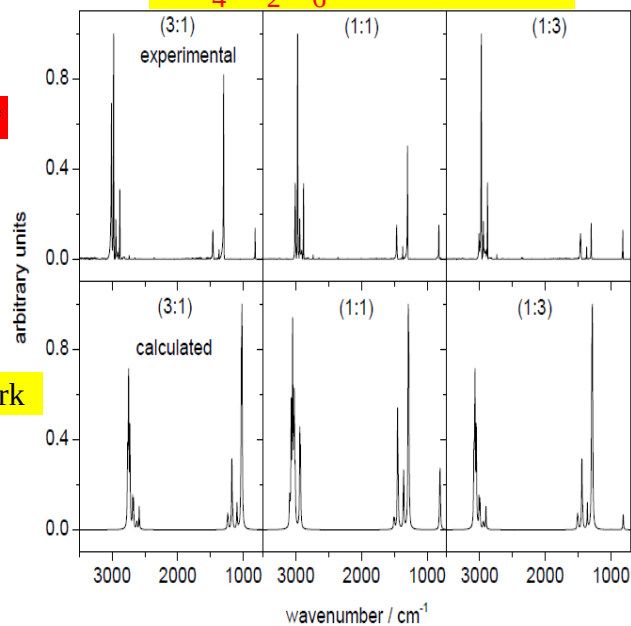
Motivacion: Grundy et al [2] muestran espectros LEISA de regiones seleccionadas de Plutón que muestran una gran diversidad.

Observaciones especiales: "a" polo norte de Plutón: fuertes absorciones por hielo CH_4 ; "D" cráter Pulfrich: absorciones de hielo H_2O a 1.5, 1.65 y 2 μm y absorciones de hielo de CH_4 comparativamente débiles; "E" el centro de Sputnik Planum: fuertes bandas de CH_4 , absorción de hielo de N_2 a 2.15 μm y absorción de hielo de CO a 1.58 μm .

RESULTADOS: Comparación de espectros

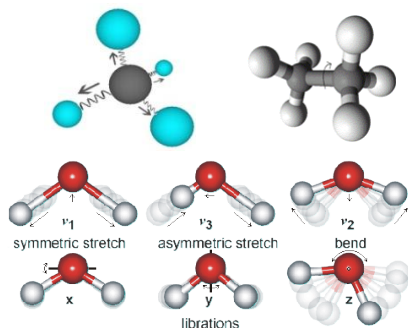
CH₄/C₂H₆ ice mixtures

Exp*



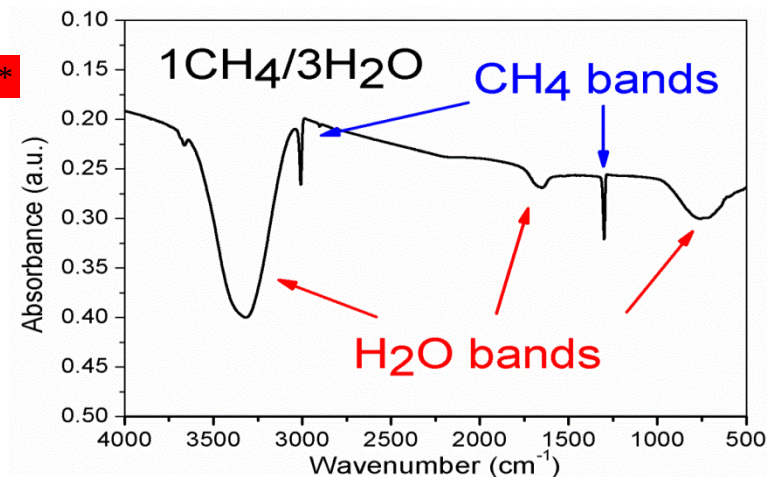
This work

*Experimental from Molpeceres et al [1]



CH₄/H₂O ice mixtures

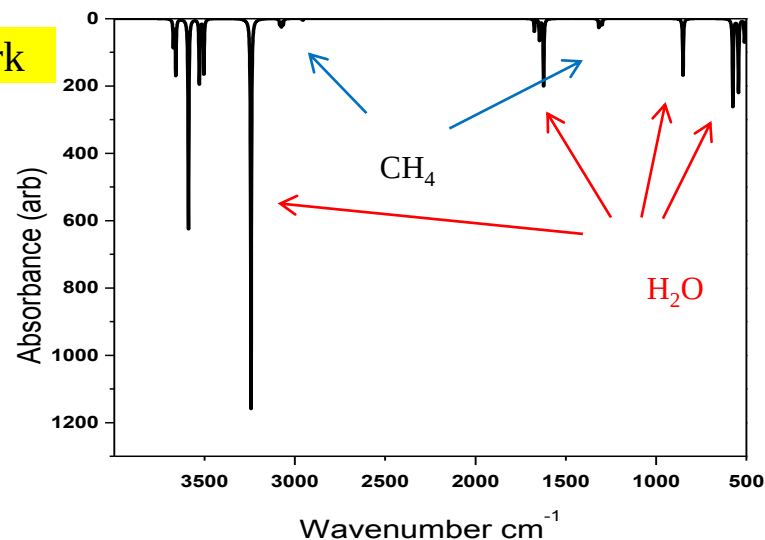
Exp**



CSIC

**Experimental from Gálvez et al [2]

This work

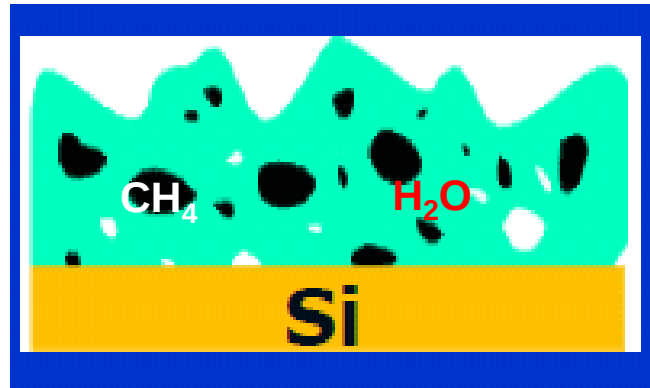


[1] G. Molpeceres et al, Ap.J., 825:156, 2016

[2] O. Gálvez et al, Ap.J., 703:2101, 2009

El hielo metano/agua la activación ν_1 ¹

Espectro IR de metano (molécula tetraédrica grupo Td) + hielo amorfo baja densidad(LDA)



14K vs 10^{-6} mbar
LDA- Low density amorphous ice

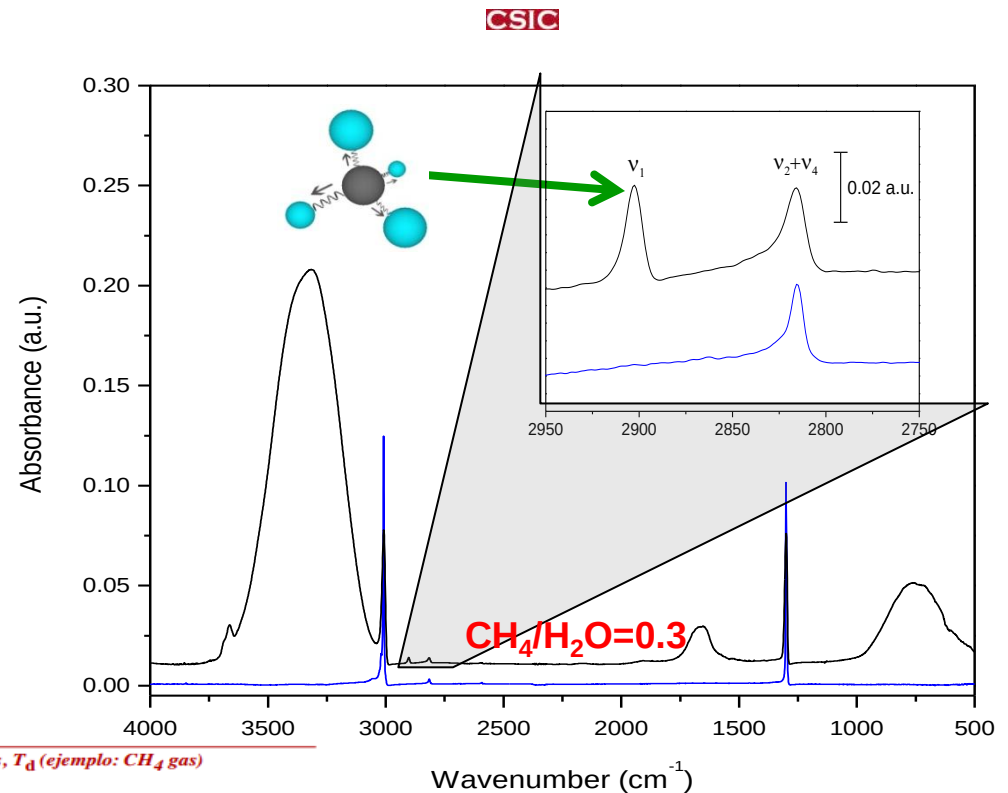
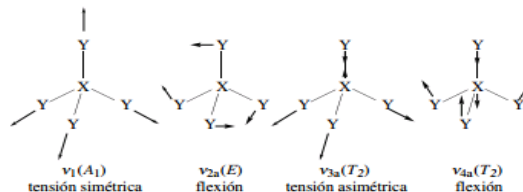


Tabla 2.3. Modos normales y su actividad en IR y Raman para moléculas tetraédricas, T_d (ejemplo: CH_4 gas)

Vibración	Simetría	Actividad	ν (cm^{-1})
ν_1 (tensión)	A_1	Raman	2917
ν_{2a} (flexión)	E	Raman	1534
ν_{2b} (flexión)			
ν_{3a} (tensión)	T_2	IR y Raman	3019
ν_{3b} (tensión)			
ν_{3c} (tensión)			
ν_{4a} (flexión)	T_2	IR y Raman	1306
ν_{4b} (flexión)			
ν_{4c} (flexión)			



Resultados de la modelización [1]:

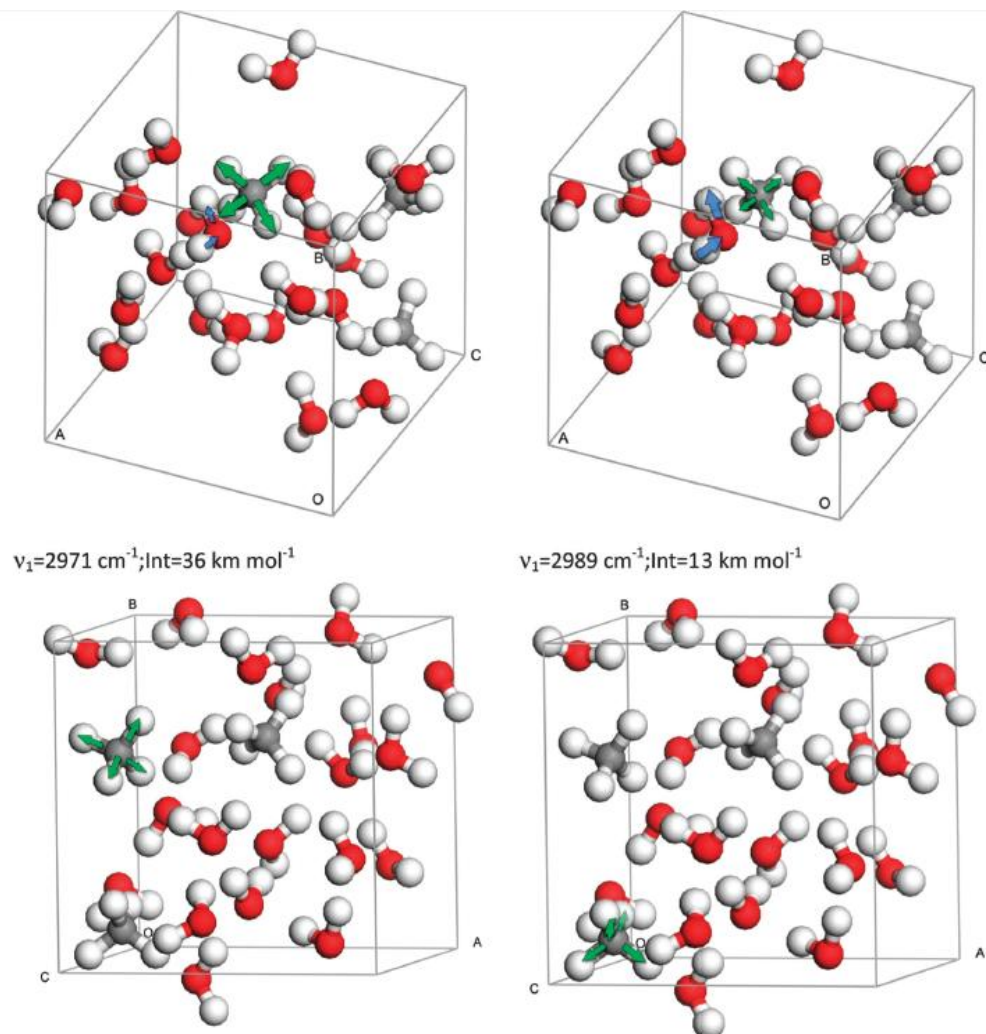


Fig. 3 Schematic representation of the ν_1 modes of structure HD_3-1. Top: the ν_1 mode of one of the three CH_4 molecules is heavily mixed with one H_2O vibration; the left diagram shows larger contribution of ν_1 , in green, and the right diagram, larger contribution of $\nu(\text{O}-\text{H})$, in blue. Bottom: in the ν_1 modes of the other CH_4 molecules there is no relevant contribution of other H_2O vibrations.

Conclusión:

- Activación es consecuencia de la interacción con moléculas de agua en las paredes de los poros que estas forman.
- Otro posible mecanismo es el del acoplamiento que se produce cuando la tensión de enlace ν_1 (CH_4) y la del agua ν_s (H_2O) coinciden en frecuencia.

Otras moléculas: Isocianato de Metilo

La molécula prebiótica el isocianato de metilo (CH_3NCO) se detectó recientemente en la superficie del cometa 67P / CG [1] y poco después en fase gaseosa en el medio interestelar [2,3]. Se encontró que su abundancia estimada con respecto al agua era muy alta (1.3%) en el cometa.

- ¿Cuál era la estructura cristalina de CH_3NCO ?

Video del medio interestelar

Rosetta orbitador y módulo Philae en el cometa
Churyumov-Gerasimenko (67P)



Resultados de la modelización y el experimento*:

Celda unidad de la estructura cristalina propuesta del isocianato de metilo con simetría monoclinica P21 / m, grupo espacial 11

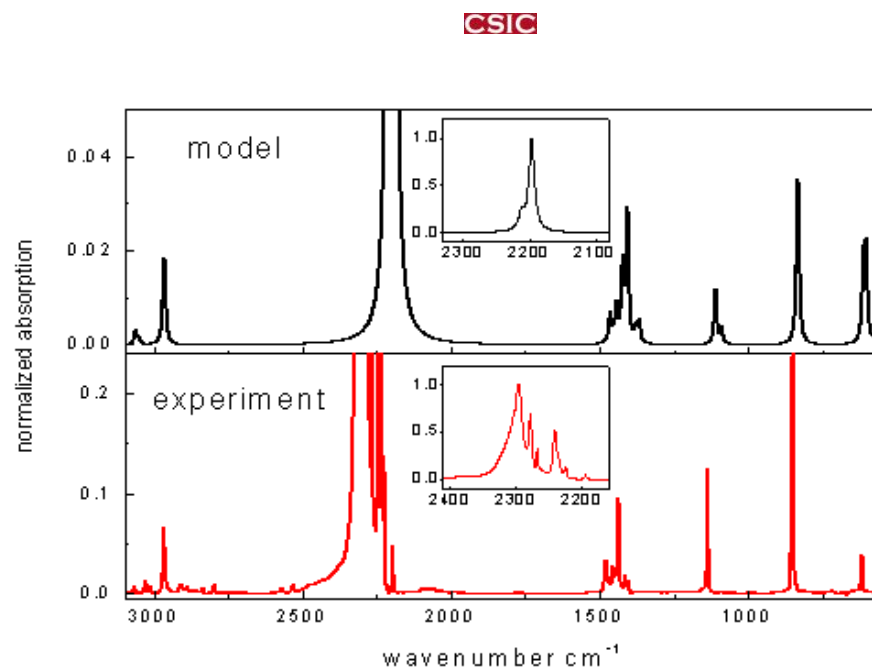
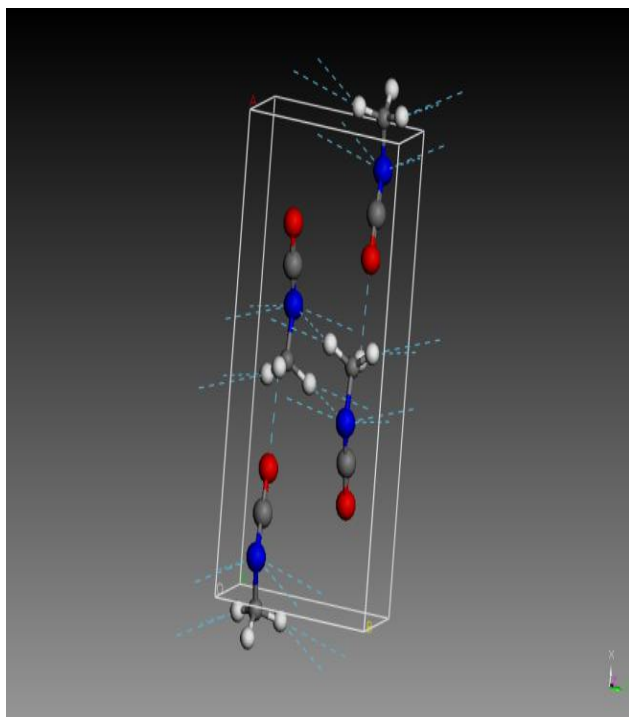


Figure . Comparacion de los espectros calculado (panel superior) y experimental (panel inferior) para el cristal del CH₃NCO.

* Maté, Belén ; Molpeceres, Germán; Timón, Vicente ; Tanarro, Isabel ; Escribano, Rafael ; Guillemin, Jean-Claude; Cernicharo, José ;Herrero, Victor J.Laboratory study of methyl isocyanate ices under astrophysical conditions, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 470: 4222–4230 (2017)

Otras moléculas, hielos, cristales*:



PCCP

PAPER



Cite this: *Phys. Chem. Chem. Phys.*,
2016, **18**, 25756

Received 2nd March 2016,
Accepted 28th August 2016

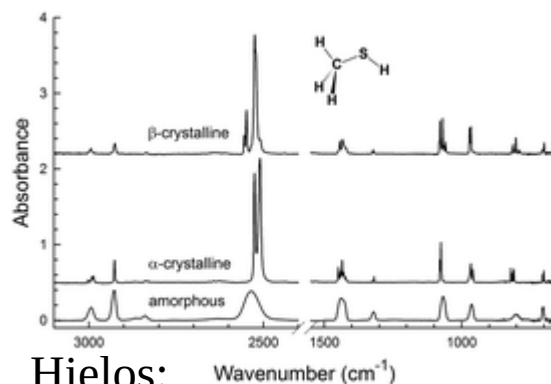
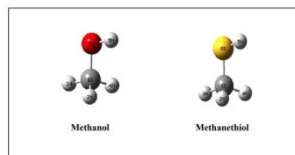
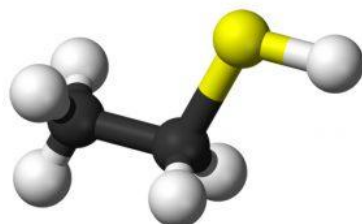
DOI: 10.1039/c6cp01475e

www.rsc.org/pccp

Infrared spectra and band strengths of CH₃SH, an interstellar molecule

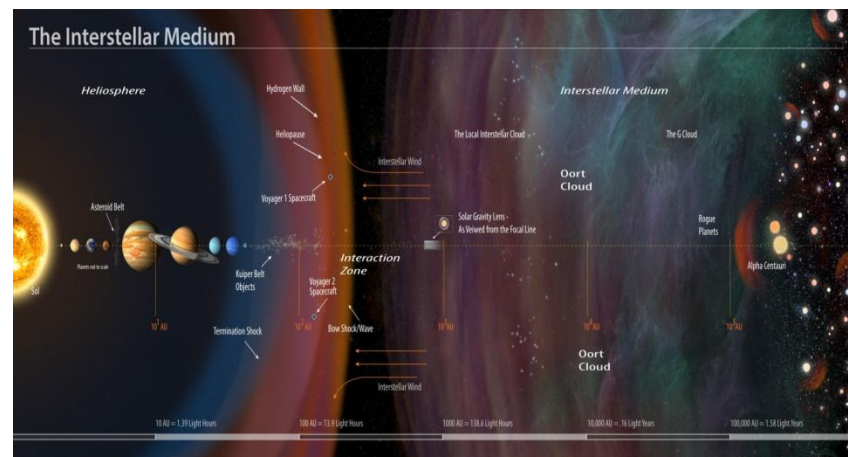
R. L. Hudson

Three solid phases of CH₃SH (methanethiol or methyl mercaptan) have been prepared and their mid-infrared spectra recorded at 10–110 K, with an emphasis on the 17–100 K region. Refractive indices have been measured at two temperatures and used to estimate ice densities and infrared band strengths. Vapor pressures for the two crystalline phases of CH₃SH at 110 K are estimated. The behavior of amorphous CH₃SH on warming is presented and discussed in terms of Ostwald's step rule. Comparisons to CH₃OH under similar conditions are made, and some inconsistencies and ambiguities in the CH₃SH literature are examined and corrected.



Hielos:

- Fases?
- Estructura?



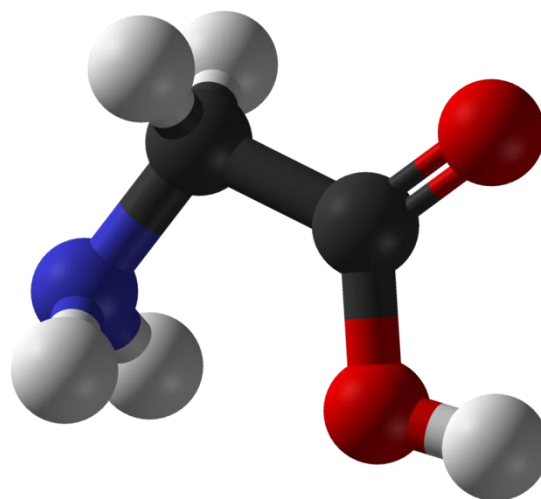
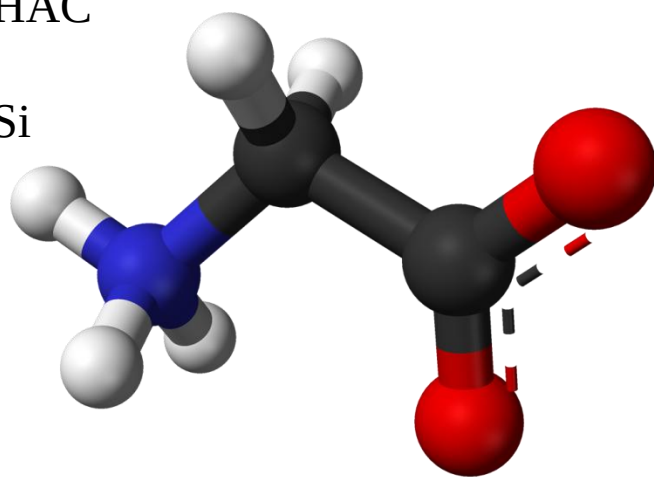
* Hudson, R. L., Infrared spectra and band strengths of CH₃SH, an interstellar molecule. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2016, **18** (36), 25756-25763.

Otras moléculas, hielos, cristales*:

El descubrimiento de glicina (aminoácido mas sencillo) en el espacio en el año 2003 por Yi-Jehng, Steven y col., sugiere que las moléculas interestelares pueden haber desempeñado un papel fundamental en la química prebiótica de la Tierra nos invita a pensar en posibles materiales de transporte espacial.

- HAC

- Si



1. Yi-Jehng, K., B. C. Steven, H. Hui-Chun, T. Wei-Ling and K. Zbigniew (2003). "Interstellar Glycine." *The Astrophysical Journal* **593**(2): 848.

* Timón V, Gálvez Ó, Maté B, Tanarro I, Herrero VJ, Escribano R, Theoretical model of the interaction of glycine with hydrogenated amorphous carbon (HAC). *Phys Chem Chem Phys*. 2015 Nov 21;17(43):28966-76.

El sonido del Big-bang



VIDEO

... y ahora tenemos tiempo para

Algunas cuestiones y discusión



IEM



Gracias por su atención