

# Hielos astrofísicos

**Belén Maté**

Departamento de Física Molecular  
IEM-CSIC

*[belen.mate@csic.es](mailto:belen.mate@csic.es)*

# ¿A qué llamamos hielo?



Hielo: Agua en estado sólido

## Definición Científica

Hielo: se dice de una fase sólida de una sustancia que se presenta en estado líquido o gas a temperatura ambiente.

Por ejemplo: metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ), nitrógeno ( $\text{N}_2$ )...

# Hielo en objetos astrofísicos

Predomina el hielo de agua, con pequeñas cantidades de moléculas sencillas congeladas ( $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{N}_2$  and  $\text{CH}_4$ ).

- Planetas y Satélites del Sistema Solar

- Núcleos cometarios



- Nubes densas del medio interestelar

# Plutón: Objeto del cinturón de Kuiper

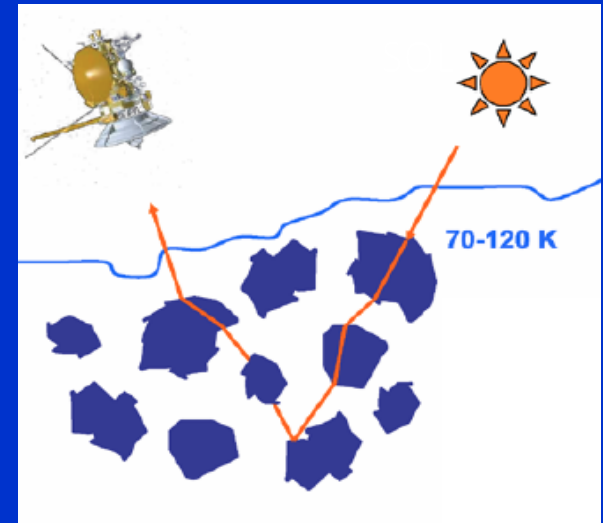
Distancia al Sol : 39,264 UA ( $5,9 \times 10^9$  km)

Misión New Horizont de la NASA.

Lanzamiento: Jan 19, 2006. Máximo acercamiento: 14 Julio 2015.



Imagen tomada 14 de julio de 2015.  
La nave estaba a 450,000 km.  
Long Range Reconnaissance Imager (LORRI):  
visible (350-850 nm)  
(NASA/JHUAPL/SwRI).

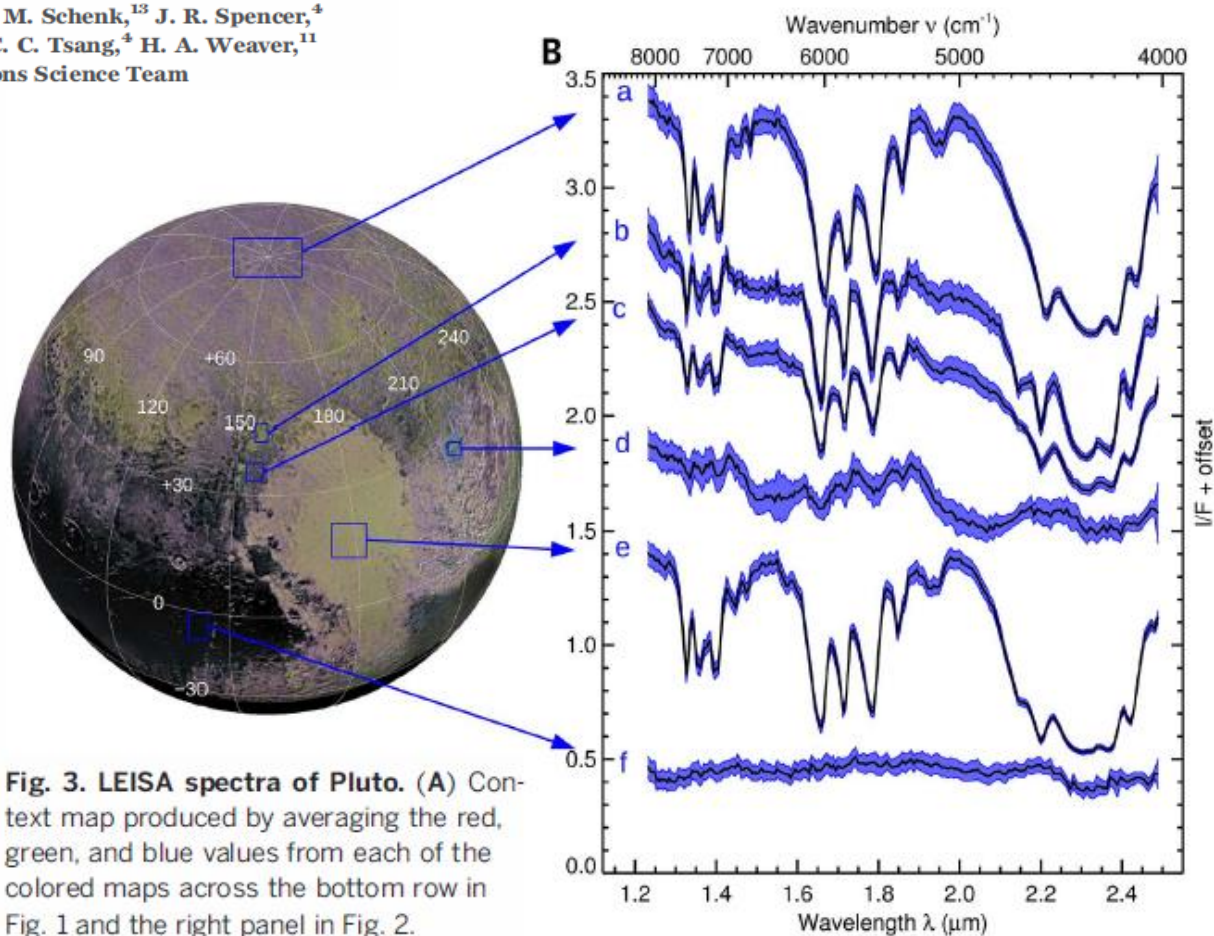
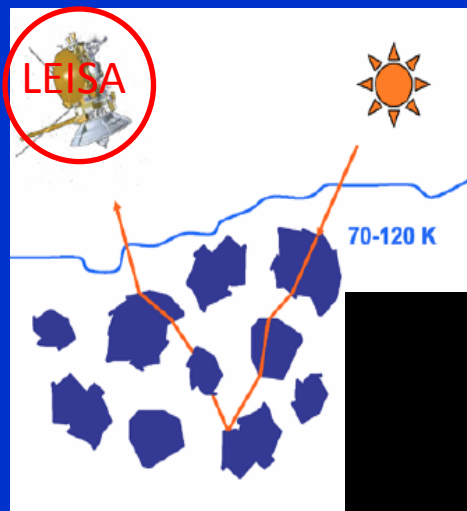


La luz solar que recibe Plutón es 1000 veces mas tenue que en la Tierra

## PLANETARY SCIENCE

# Surface compositions across Pluto and Charon

W. M. Grundy,<sup>1\*</sup> R. P. Binzel,<sup>2</sup> B. J. Buratti,<sup>3</sup> J. C. Cook,<sup>4</sup> D. P. Cruikshank,<sup>5</sup>  
 C. M. Dalle Ore,<sup>5,6</sup> A. M. Earle,<sup>2</sup> K. Ennico,<sup>5</sup> C. J. A. Howett,<sup>4</sup> A. W. Lunsford,<sup>7</sup>  
 C. B. Olkin,<sup>4</sup> A. H. Parker,<sup>4</sup> S. Philippe,<sup>8</sup> S. Protopapa,<sup>9</sup> E. Quirico,<sup>8</sup> D. C. Reuter,<sup>7</sup>  
 B. Schmitt,<sup>8</sup> K. N. Singer,<sup>4</sup> A. J. Verbiscer,<sup>10</sup> R. A. Beyer,<sup>5,6</sup> M. W. Buie,<sup>4</sup> A. F. Cheng,<sup>11</sup>  
 D. E. Jennings,<sup>7</sup> I. R. Linscott,<sup>12</sup> J. Wm. Parker,<sup>4</sup> P. M. Schenk,<sup>13</sup> J. R. Spencer,<sup>4</sup>  
 J. A. Stansberry,<sup>14</sup> S. A. Stern,<sup>4</sup> H. B. Throop,<sup>15</sup> C. C. C. Tsang,<sup>4</sup> H. A. Weaver,<sup>11</sup>  
 G. E. Weigle II,<sup>16</sup> L. A. Young,<sup>4</sup> and the New Horizons Science Team



**Fig. 3. LEISA spectra of Pluto.** (A) Context map produced by averaging the red, green, and blue values from each of the colored maps across the bottom row in Fig. 1 and the right panel in Fig. 2.

**LEISA:**  
**1 - 3  $\mu\text{m}$**   
**Infrarrojo cercano**

# Nubes moleculares del medio interestelar

## Gran riqueza química.

### Mas de 200 moléculas observadas

Densidad “alta” ( $10^4$ -  $10^6$   $\text{cm}^{-3}$ ) y  
temperatura baja (10-50 K)

Los granos de polvo (silicatos,  
carbonáceos) se recubren de  
capas de “hielos” (volátiles)

**Nota:**  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  en superficie terrestre



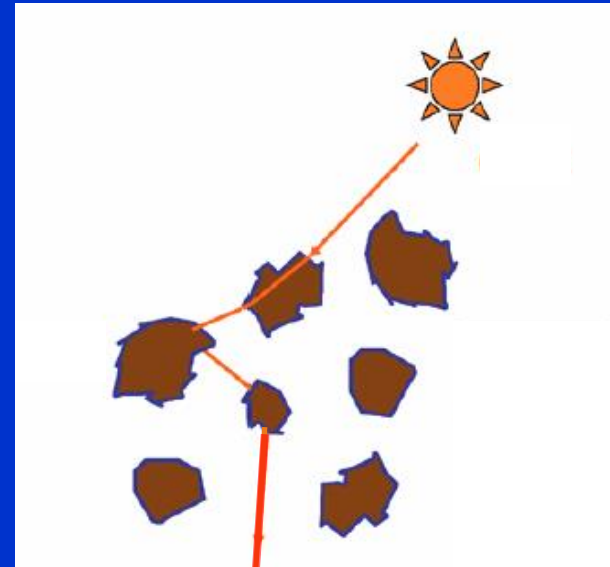
# Nubes moleculares densas

## Imagen de luz visible



Barnard 68 . (FORS Team, 8.2-meter VLT Antu, ESO)

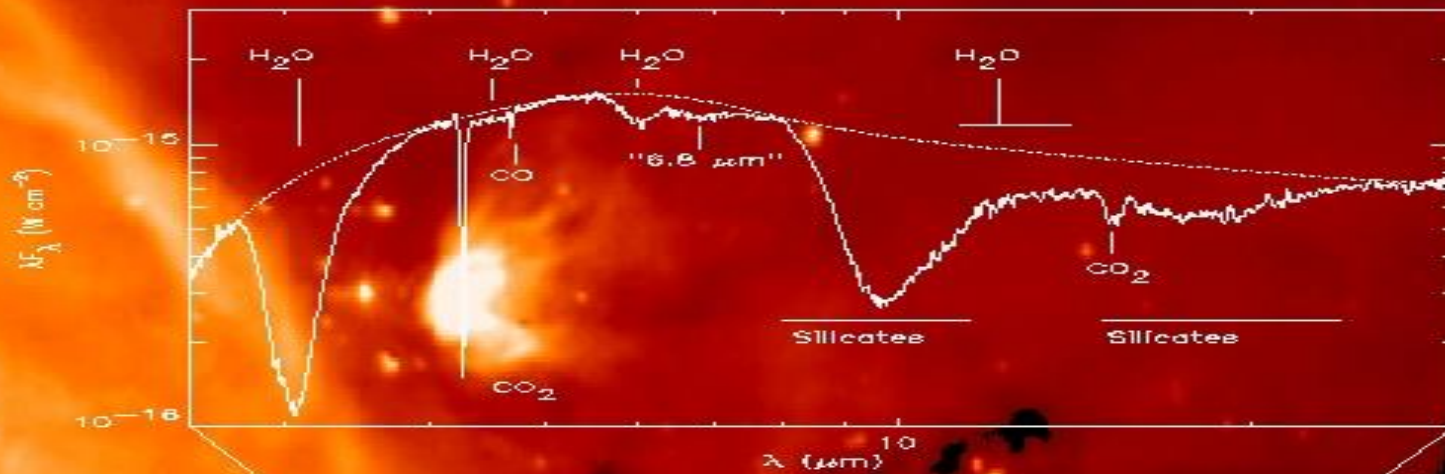
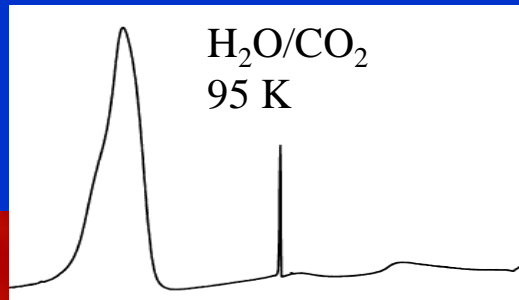
Estrella de fondo



**Radiación  
infrarroja**

Hielo de laboratorio

**Los datos de laboratorio son necesarios para la interpretación de las observaciones espaciales**





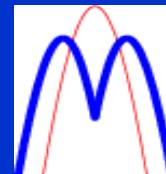
# Técnicas de Investigación

Experimental



Simulación en el laboratorio de los distintos sistemas astrofísicos.

Teórica

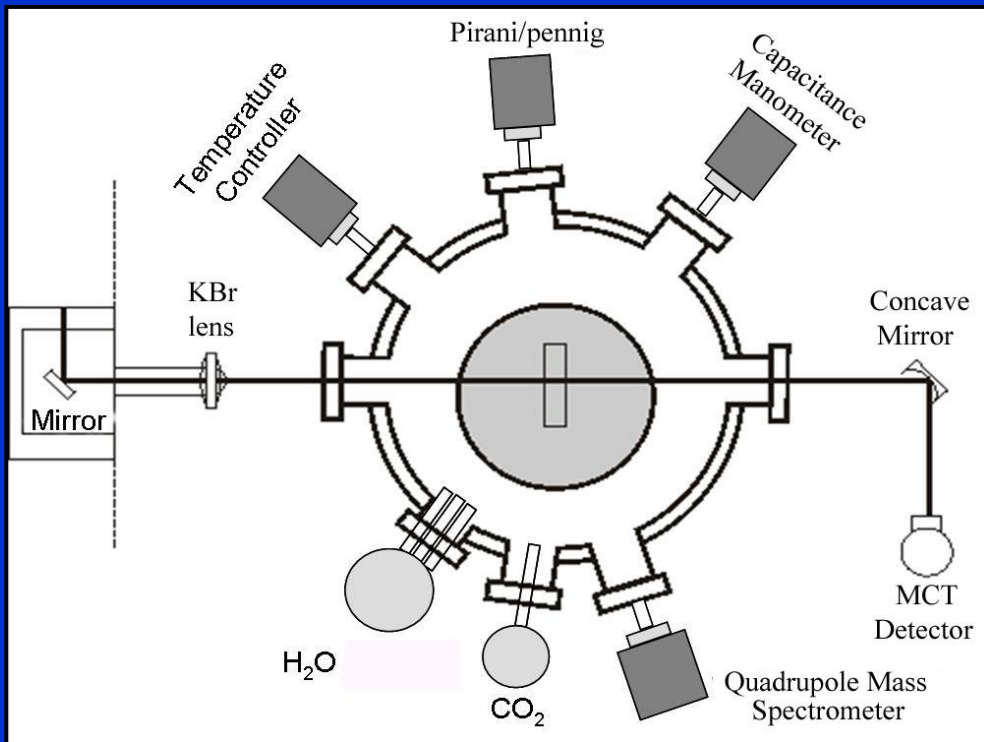


Diferentes programas *ab initio*: (SIESTA, CASTEP, GAUSSIAN, MOLPRO...)

# Sistema experimental

Cámaras de:  
alto vacío (  $10^{-8}$  mbar ) y ultra alto vacío ( $10^{-10}$  mbar)

Temperatura controlada entre: 6 -300 K



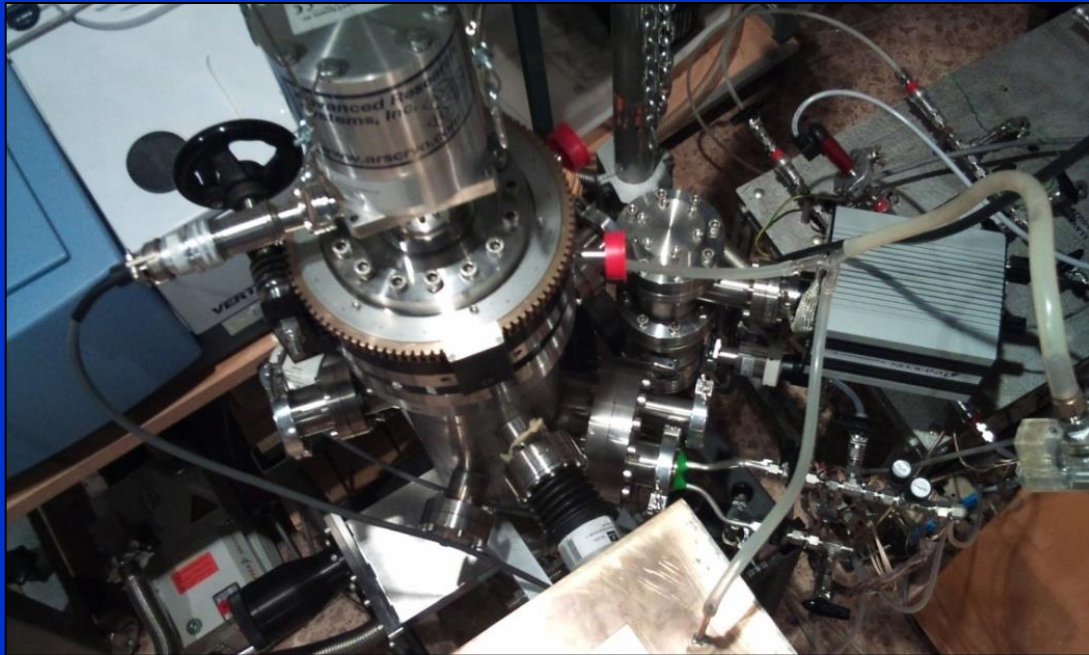
**CARACTERIZACIÓN:**

**ESPECTROSCOPIA  
INFRARROJA  
TRANSMISIÓN O  
REFLEXIÓN-ABSORCIÓN**

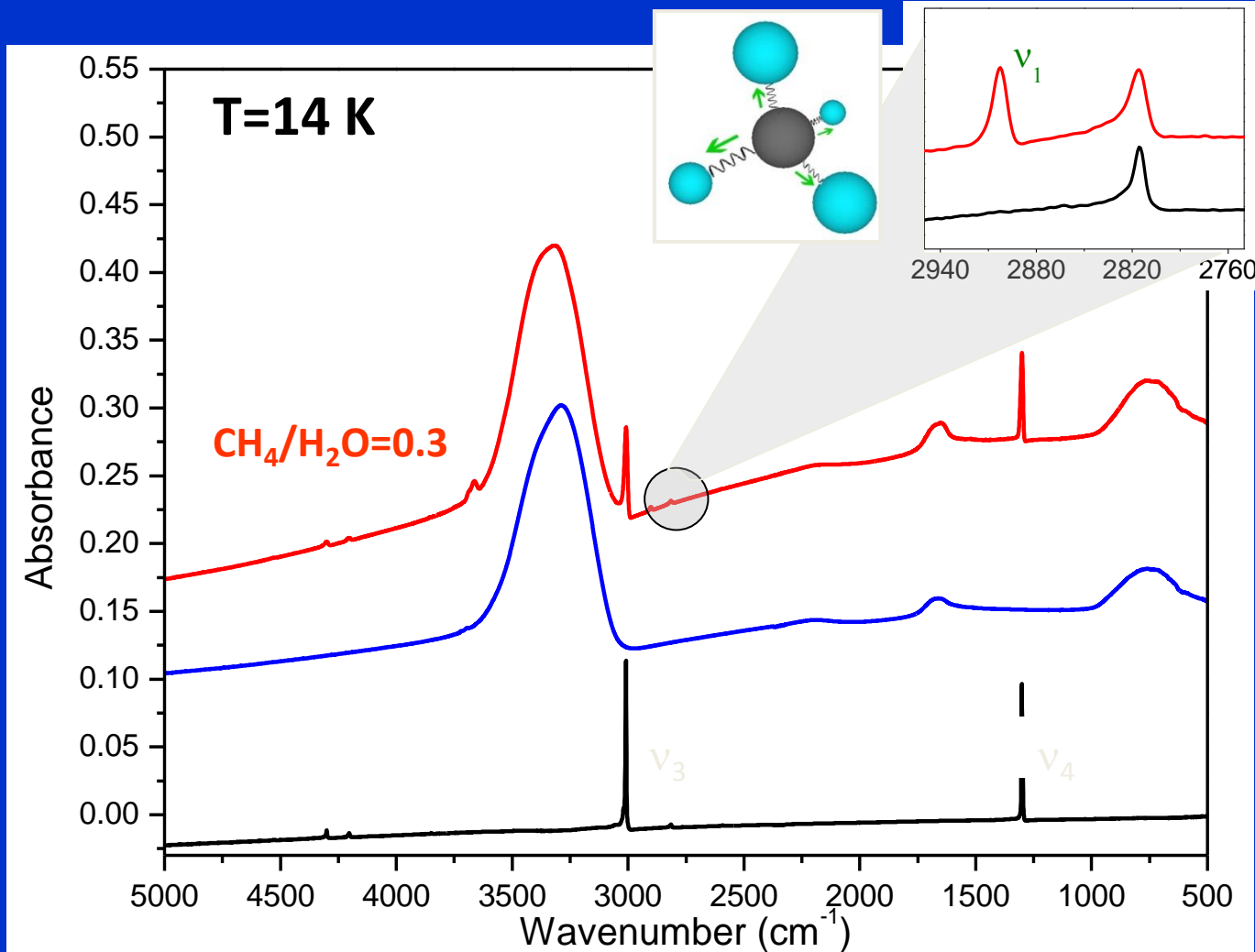
**ESPECTROMETRÍA  
DE MASAS**

# Sistema experimental

Simulación de entornos astrofísicos



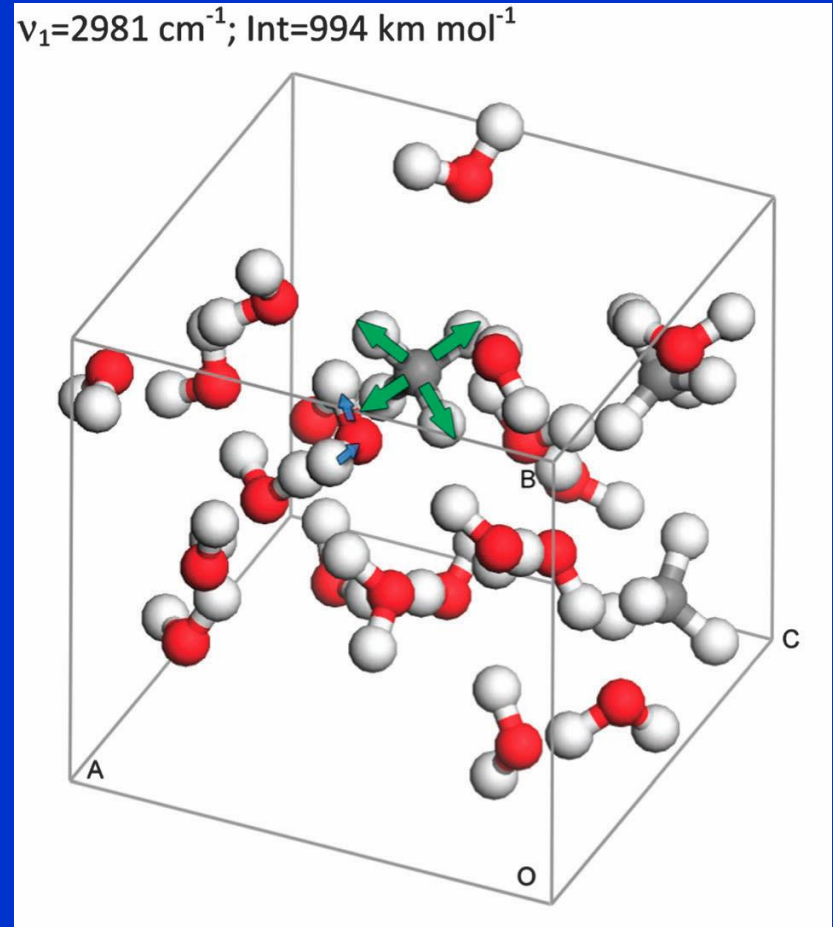
# Ejemplo: Hielo de metano y agua a 14 K



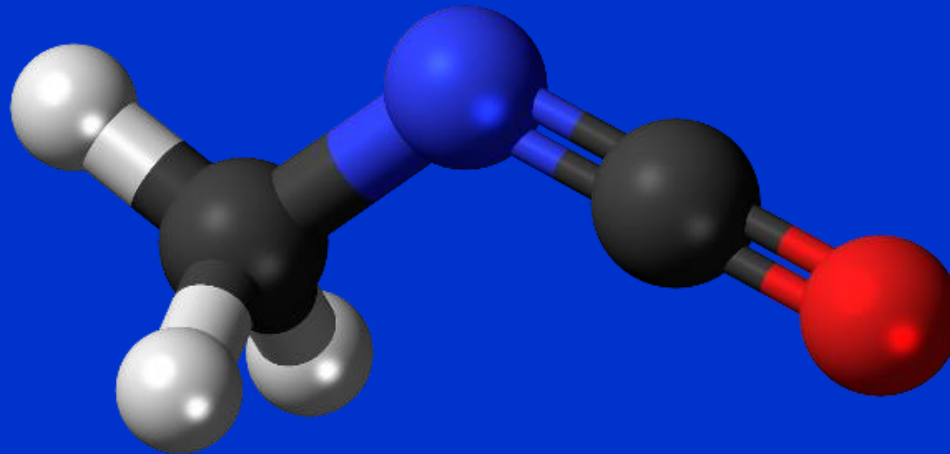
# Cálculos $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O}$

Se ha usado Amorphous Cell y los módulos CASTEP del software Materials Studio. Hemos construido un modelo de hielo de agua amorfa, con densidad  $0.7 \text{ g cm}^{-3}$ . Las moléculas de metano se introdujeron en estas estructuras amorfas buscando reproducir las estequiometrias con  $\text{CH}_4/\text{H}_2\text{O}$  entre  $1/20$  and  $1/8$ . La geometría de las muestras se optimizó y se predijeron los espectros infrarrojos.

Se aplicó teoría del funcional de densidad (DFT) con funcionales GGA-RPBE.



Ejemplo:  
Hielos de isocianato de metilo



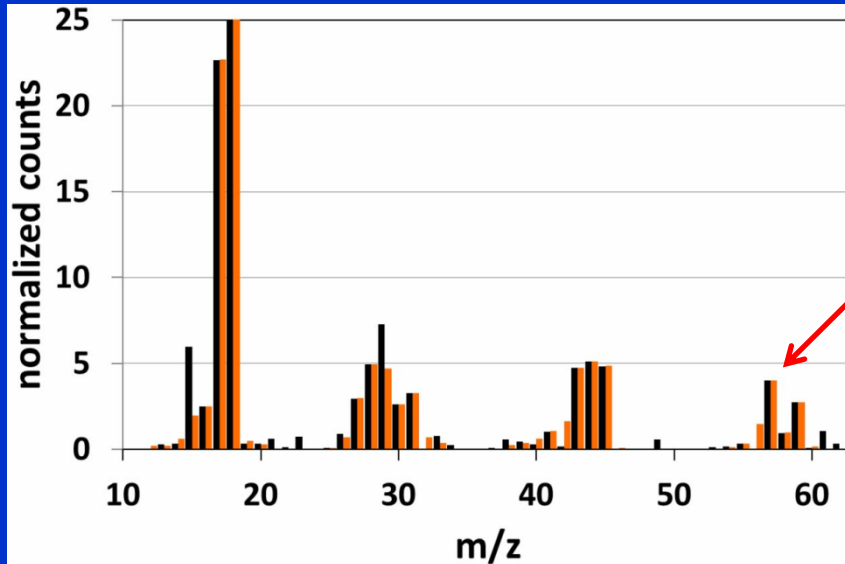
# Mision Rossetta al cometa 67P/Churyumov-Gerasimenko"

Lanzamiento: 2 Marzo 2004

Llegada al cometa: 6 Agosto 2014

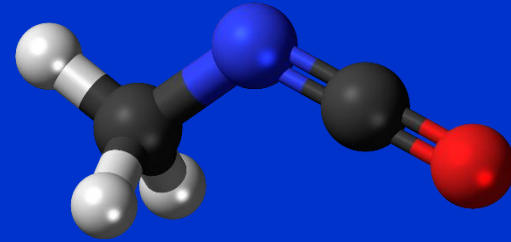


*Credits: ESA/Rosetta/MPS for OSIRIS Team  
MPS/UPD/LAM/IAA/SSO/INTA/UPM/DASP/IDA*



| Formula                                       | Molar mass (u) | MS fraction | Relative to water |
|---|----------------|-------------|-------------------|
| H <sub>2</sub> O                              | 18             | 80.92       | 100               |
| CH <sub>4</sub>                               | 16             | 0.70        | 0.5               |
| HCN   | 27             | 1.06        | 0.9               |
| CO  | 28             | 1.09        | 1.2               |
| CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>               | 31             | 1.19        | 0.6               |
| CH <sub>3</sub> CN                            | 41             | 0.55        | 0.3               |
| HNCO  | 43             | 0.47        | 0.3               |
| CH <sub>3</sub> CHO                           | 44             | 1.01        | 0.5               |
| HCONH <sub>2</sub>                            | 45             | 3.73        | 1.8               |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NH <sub>2</sub> | 45             | 0.72        | 0.3               |
| CH <sub>3</sub> NCO                           | 57             | 3.13        | 1.3               |
| CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub>             | 58             | 1.02        | 0.3               |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO             | 58             | 0.44        | 0.1               |
| CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub>             | 59             | 2.20        | 0.7               |
| CH <sub>2</sub> OHCHO                         | 60             | 0.98        | 0.4               |
| CH <sub>2</sub> (OH)CH <sub>2</sub> (OH)      | 62             | 0.79        | 0.2               |

## CH<sub>3</sub>NCO se ha detectado:



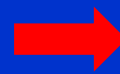
- En la superficie del cometa 67P/Churimov-Gerasmenko.

F. Goesmann et al., Science, 2015

- En fase gas en la nube densa hacia la protoestrella IRAS 16293-22422 B

R. Martín-Doménech et al., MNRAS, 2017

**Puede estar presente en los mantos de hielo del  
Las nubes densas del medio interestelar???**

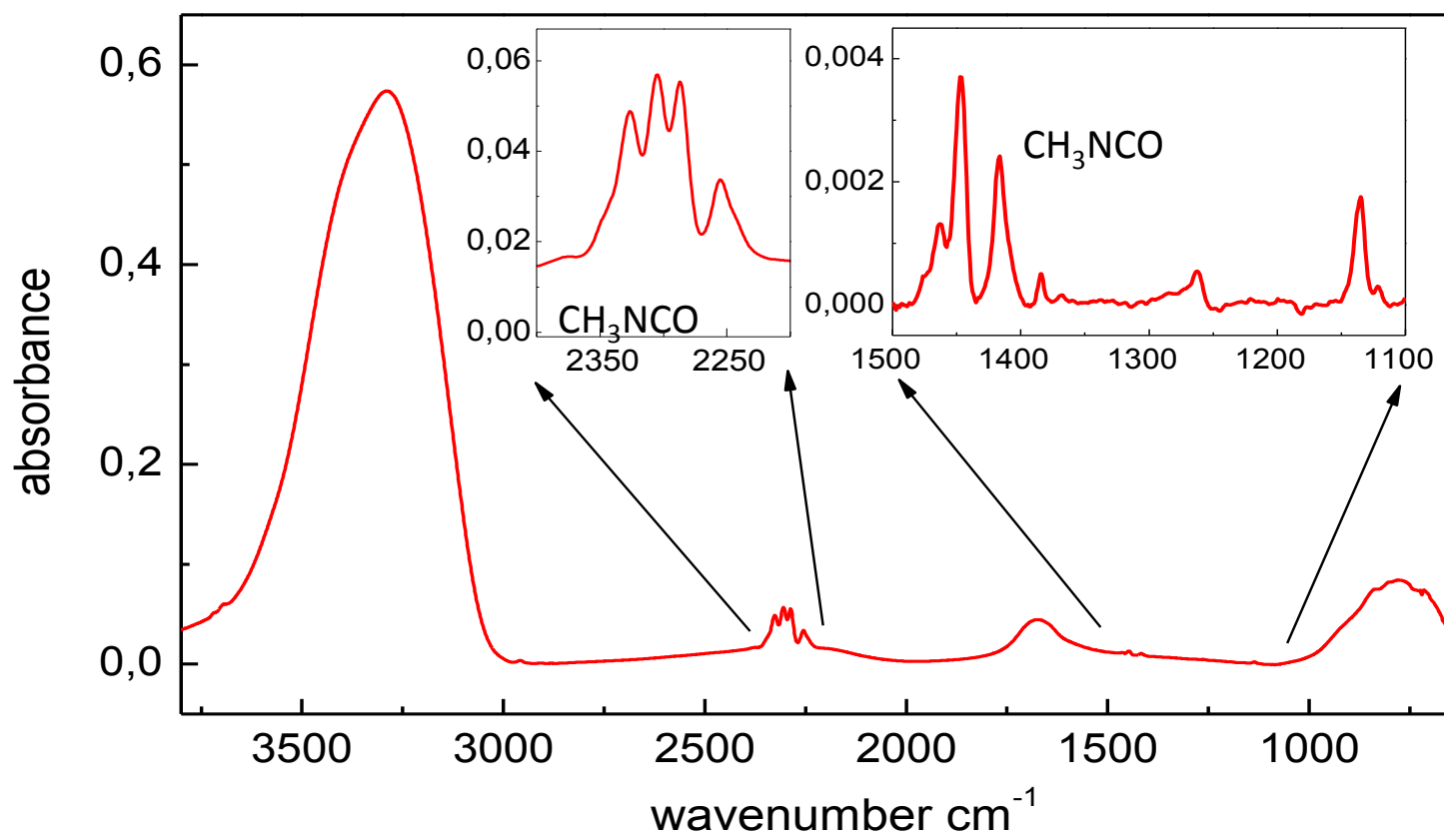


**Es necesario conocer las características espectrales en el IR del hielo de esta especie**



# Metil isocianato diluido en agua a 20 K

$\text{H}_3\text{NCO}$  (1.3%) /  $\text{H}_2\text{O}$



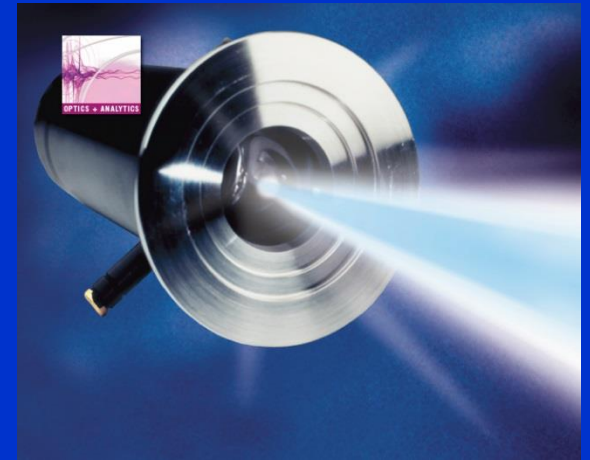
La misma  
proporcion de  
agua que en el  
cometa 67P/CG.

Posee una  
banda  
característica  
claramente  
reconocible  
 $\nu_a$ -NCO

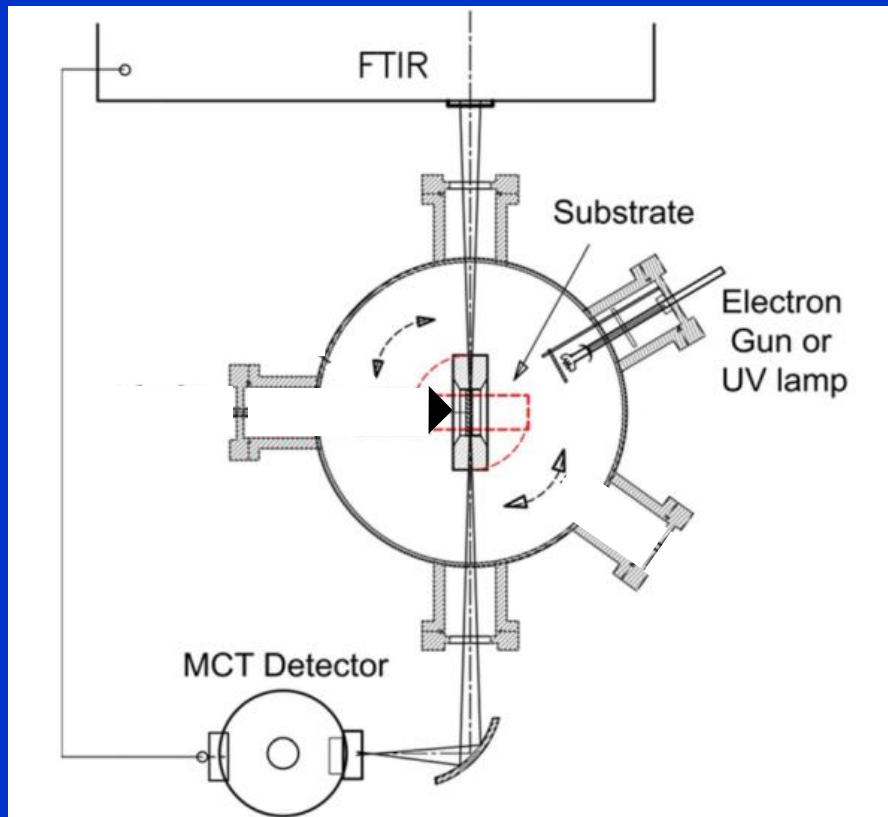
La molécula es un buen candidato para futuras búsquedas astronómicas  
Buscar una banda cuádruple entre 4.11-4.63  $\mu\text{m}$

# Procesado energético con radiación UV o electrones de 5 keV

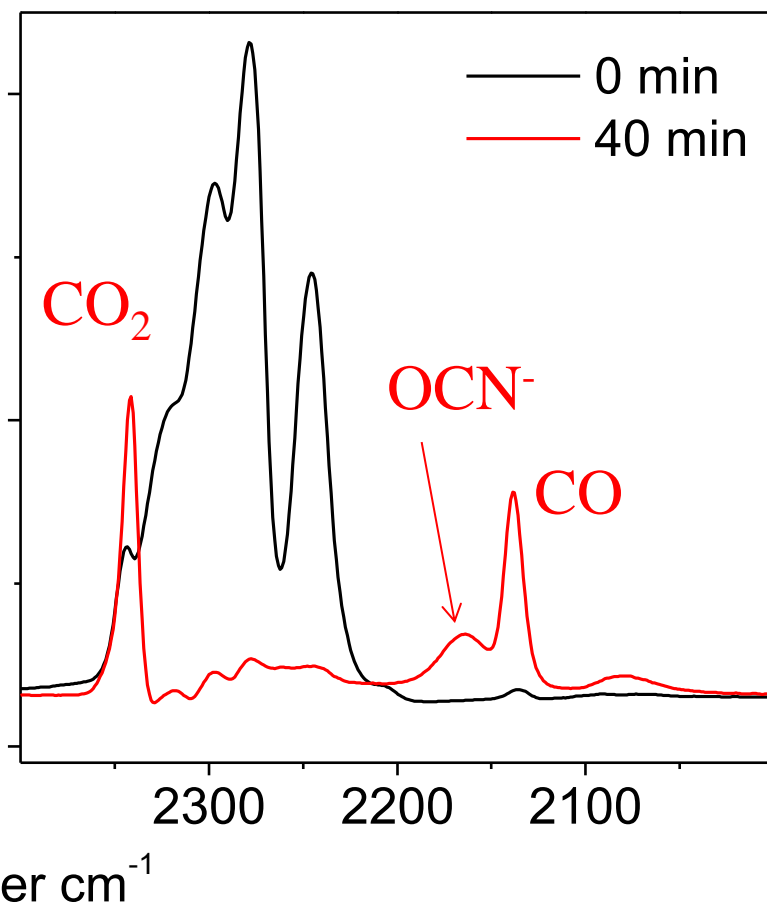
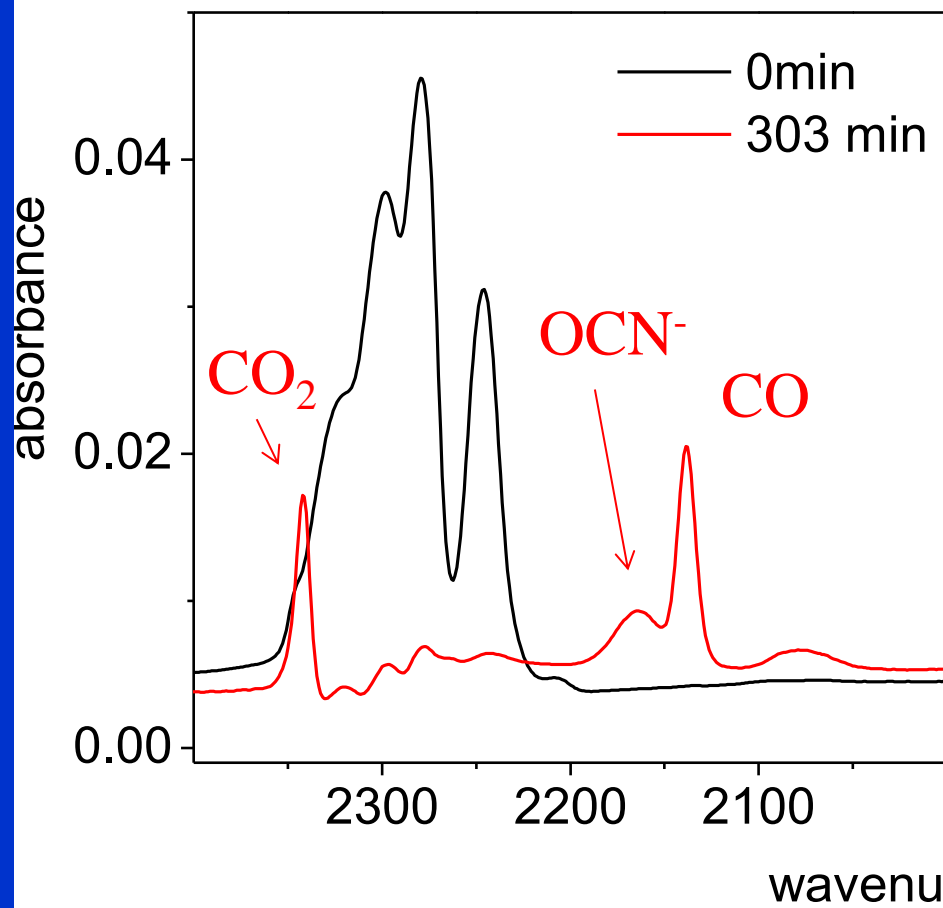
Simulamos el campo UV en el medio interestelar o Rayos cósmicos.



*lámpara UV*



*cañón de electrones*



Se forman CO<sub>2</sub>, OCN<sup>-</sup>, y CO.

## Vida media de CH<sub>3</sub>NCO diluido en hielo de agua Estimada para diferentes entornos astrofísicos

| Location of ices<br>in space | Lifetime<br>(yr)          | UV <sup>a</sup> Dose rate<br>(eV (16amu)<br>molec <sup>-1</sup> yr <sup>-1</sup> ) | UV<br>CH <sub>3</sub> NCO<br>half-life (yr) | CR <sup>a</sup> Dose rate<br>(eV (16amu)<br>molec <sup>-1</sup> yr <sup>-1</sup> ) | CR<br>CH <sub>3</sub> NCO<br>half-life (yr) |
|------------------------------|---------------------------|--|---|--|---|
| Cold dense<br>Cloud (15 K)   | <b>3 x 10<sup>7</sup></b> | 4 x 10 <sup>-7</sup>   | <b>2.8 x 10<sup>8</sup></b>                 | 1.6 x 10 <sup>-7</sup>   | <b>2.5 x 10<sup>7</sup></b>                 |

<sup>a</sup> from Moore, M. H., Hudson, R. L., & Gerakines, P. A., *Spectrochim. 2001, Acta A, 57, 843*

Con las vidas medias obtenidas, CH<sub>3</sub>NCO en los mantos de hielo de nubes densas sería destruido principalmente por rayos cósmicos, y llegaría a sobrevivir hasta el colapso gravitatorio de la nube.



Germán Molpeceres  
Víctor Herrero  
Rafael Escribano  
Isabel Tanarro  
Juan Ortigoso  
Vicente Timón  
Miguel Jimenez Redondo

**IEM**



<http://www.iem.cfmac.csic.es/fismol/fmap/>

