

# Más allá de Moléculas exóticas y azúcares: ASTROQUÍMICA Y LA BÚSQUEDA DEL ORIGEN DE LA VIDA

• *Dr. Luis Alvarez-Thon*

*Dr. en Física*

• *Dra. Natalia Inostroza-Pino*

*Dra. Físicoquímica Molecular, Universidad Autónoma de Chile, Facultad de Ingeniería,  
Núcleo de Astroquímica & Astrofísica.*

*La rama de la astronomía encargada de detectar y estudiar moléculas en el espacio interestelar se llama astroquímica. Lo fascinante es que existen moléculas exóticas imposibles de encontrar en la Tierra y que podrían tener un interés tecnológico, por otro lado, existe la curiosidad de encontrar moléculas clave para la existencia de vida. En este artículo se describe cómo las técnicas de la química computacional pueden ayudar a los astrónomos a identificar moléculas que están a millones de años luz de la Tierra.*

Existen más de 230 tipos de moléculas identificadas en nuestra galaxia y en las atmósferas de los planetas [1]. Algunas de estas moléculas no existen en la Tierra y solo pueden formarse en las condiciones extremas del medio interestelar. Un ejemplo muy conocido es el ión molecular  $H_3^+$ , una molécula simple compuesta solo de tres átomos de hidrógeno. Esta fue descubierta en las atmósferas de Júpiter, Saturno y Urano, pero en la Tierra no existe en forma natural porque es muy reactiva (se combina rápidamente con otras moléculas para formar otras). Esta molécula es considerada como la piedra angular de la Química Interestelar ya que es la iniciadora de reacciones químicas para la generación de moléculas más grandes. La referencia 2, "*La molécula que creó el universo*", es un artículo del tema que fue publicado en Ingeniería al Día.

La astroquímica es una rama muy activa de la astronomía que se dedica a la detección y estudio de moléculas en el medio interestelar. Estas moléculas aportan información única relativa al origen mismo de la vida en este planeta.

Este medio interestelar consta de grandes nubes moleculares. Un ejemplo muy conocido es la nebulosa *Ojo de Gato*, en la constelación del Dragón a unos 3000 años luz de la Tierra [3]. Esta importante nebulosa, fue descubierta por el astrónomo inglés William Herschel en 1786 y ha sido ampliamente estudiada en tiempos modernos ya que posee una gran luminosidad.

Si bien es cierto que siempre ha existido la curiosidad de saber si las moléculas que existen en la Tierra también se encuentran fuera de esta, por ejemplo, el agua, el metano u otras moléculas fundamentales para la existencia de la vida, también existe un interés tecnológico de encontrar moléculas exóticas [4].

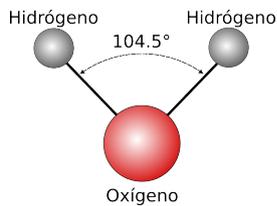
En efecto, con el tiempo se ha descubierto que las famosas moléculas asociadas a la nanotecnología (cintas de grafeno, nanotubos de carbono y fullerenos) también se han encontrado en el medio interestelar [5,6].

El mayor problema con la detección de moléculas en el medio interestelar es que no podemos colocarlas en un tubo de ensayo para estudiarlas (las distancias son literalmente astronómicas). Sin embargo, los telescopios y radiotelescopios de observación pueden percibir la luz (radiación) emitida por esas moléculas cuando vibran. Particularmente, cuando esas moléculas están expuestas a radiación infrarroja, los aparatos terrestres pueden registrar las frecuencias de vibración. En otras palabras, se puede registrar la huella digital de estas (las moléculas al vibrar emiten radiación que viaja a través de espacio y llegan a la Tierra).

Para los químicos modernos, ha sido un gran desafío tratar de determinar la composición molecular de las sustancias existentes en la Tierra. Esta composición está basada en los átomos que forman estas moléculas, y estos átomos son todos aquellos que encontramos en la tabla periódica de los elementos. Por ejemplo, ya es conocido que el agua está formada por moléculas que están compuestas por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno, cuya fórmula es  $H_2O$ . Para llegar a esta conclusión tuvo que pasar mucho tiempo hasta que *Antoine de Lavoisier* (1743-1794), mediante un experimento ingenioso, concluyó que el agua estaba compuesta de una parte de oxígeno y dos partes de hidrógeno. Esto fue un descubrimiento extraordinario pues en aquella época todavía no existía el concepto de átomo tal como lo conocemos hoy.

En la actualidad existe una gran variedad de modernas técnicas usadas por los científicos para analizar y determinar la composición molecular de las sustancias o materiales. Estas técnicas reciben el nombre de *espectroscopias*. Algunos ejemplos comunes de estas técnicas son: difracción de rayos X, resonancia magnética nuclear, espectroscopia de masas, espectroscopia de emisión/absorción atómica, etc.

Una las técnicas espectroscópicas más comúnmente utilizadas por los científicos para caracterizar una molécula, a saber, es la espectroscopia infrarroja. En la figura 1 se muestra una representación de la molécula de agua ( $H_2O$ ) donde se puede observar que los tres átomos forman una "v" con un ángulo aproximado de  $104.5^\circ$ .



**Figura 1**

La molécula de agua está compuesta por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno ( $H_2O$ ) y el ángulo promedio formado por los tres átomos es de  $104.5^\circ$ .

El agua en la figura 1 está representada como una estructura rígida, lo cual es una idealización. Lo cierto es que tanto las distancias interatómicas como el ángulo están variando continuamente. En efecto, en la realidad, la molécula está sujeta a influencias externas que la hacen “vibrar”, por lo tanto, la geometría de esta puede variar en todo momento.

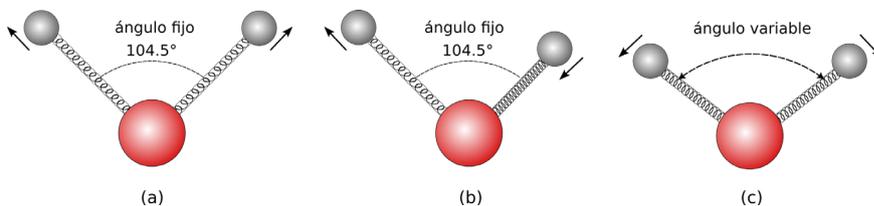
Básicamente, las moléculas vibran cuando son sometidas a un tipo especial de radiación electromagnética (luz) llamada radiación infrarroja. Este tipo de radiación (luz) no es visible para el ojo humano, pero esta puede ser percibida en forma de calor. De hecho,

*Todas las moléculas poseen una “huella digital” que las caracteriza. Aunque no somos capaces de mirar los átomos que componen una molécula, sí podemos obtener información de su huella digital, por lo tanto, la podemos identificar.*

cuando el famoso astrónomo inglés William Herschel la descubrió en 1800, la bautizó como “rayos calóricos”. Entonces, si queremos determinar la composición de una sustancia desconocida, podemos someter esa sustancia a este tipo de radiación y mediante un aparato (espectrómetro) podemos registrar las frecuencias de vibración y así comparar esas frecuencias con alguna base de datos de sustancias ya conocidas.

La figura 2 ilustra la idea de la vibración molecular, donde se muestran los tres *modos fundamentales* de vibración del agua. Estas tres formas fundamentales de vibración son características de la molécula de agua, pero además cada vibración tiene asociado un valor numérico llamado frecuencia de vibración, que se mide en unidades de hertz (Hz) o  $cm^{-1}$ . Estas tres frecuencias son únicas y caracterizan al agua, por lo tanto, constituyen su huella digital. Aunque no seamos capaces de mirar los átomos que componen una molécula, se tiene la posibilidad de determinar su huella digital. Es así que es factible identificar una sustancia desconocida solo encontrando sus frecuencias de vibración para luego compararlas con frecuencias ya identificadas.

<sup>1</sup> El telescopio espacial lleva el nombre de James Webb, quien fuera el destacado director de la NASA entre 1961 y 1968.



**Figura 2**

Los tres modos fundamentales de vibración de una molécula de agua. (a) Vibración simétrica, (b) Vibración antisimétrica, (c) Variación angular, donde las distancias de enlace permanecen constantes.

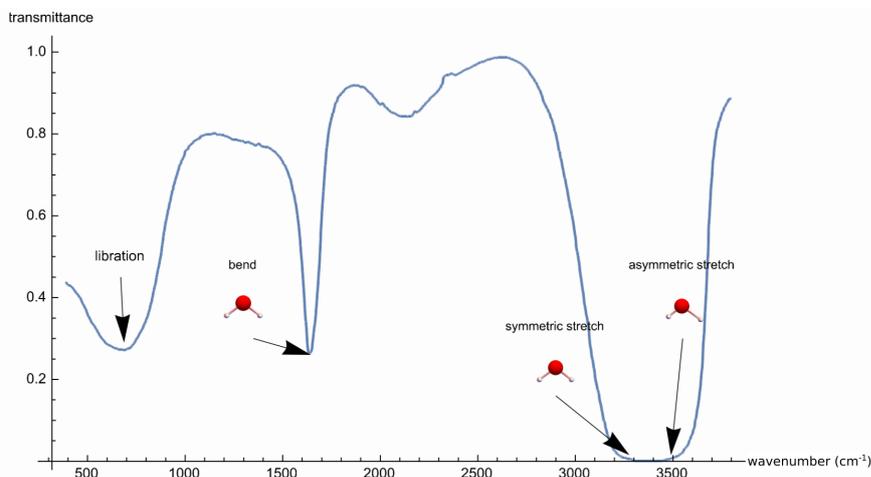
### ¿Cómo es que las moléculas vibran?

Solo como modo de ilustración, la figura 3 presenta un gráfico con el registro del espectro infrarrojo del agua [7]. El lector de este artículo no debe intimidarse por este gráfico, pues lo único que hay que fijarse es la forma única de este (¡no hay otra

sustancia cuyo espectro sea igual este!). A partir de este espectro, los científicos especialistas pueden determinar las frecuencias de vibración. De este modo, si sometemos

una sustancia desconocida a la radiación infrarroja y el registro tiene la misma forma de esta figura, entonces esa sustancia es efectivamente agua.

La reciente puesta en marcha del Telescopio Espacial James Webb<sup>1</sup>, abre una gran ventana de posibilidades para la búsqueda de nuevas moléculas en el Espacio interestelar. Las espectaculares imágenes recibidas fueron captadas en la zona infrarroja del espectro electromagnético, por lo tanto, tuvieron que ser manipuladas utilizando filtros de colores para que el ojo humano las pueda distinguir.



**Figura 3**

Espectro infrarrojo de la molécula de agua. La forma única de esta curva caracteriza al agua y constituye su huella digital (Fuente: Simulación en Wolfram.com, referencia 6).

### ¿Qué puede fallar en la detección de moléculas usando las técnicas espectroscópicas?

Esto es muy común, porque no todas las moléculas son sensibles a las diferentes radiaciones y la obtención de un espectro de emisión (por ejemplo, de frecuencias de vibración) sería muy difícil. También existe la dificultad de que casi nunca las moléculas de un tipo se encuentran aisladas de otros tipos. Entonces la señal que detectan los aparatos terrestres puede ser muy débil o caótica con mucho “ruido” o interferencia. Esto es comprensible, pues las moléculas estudiadas se encuentran a millones de años luz y la radiación emitida por ellas tiene que superar muchos obstáculos en el camino. Por lo general, en astroquímica se recurre a más de una técnica de detección para que los resultados sean corroborables.

### La química teórica/computacional

En la actualidad es muy común que los científicos de todas las áreas del saber recurran a modelos matemáticos apoyados por simulaciones computacionales para predecir o calcular propiedades físicas o químicas [8,9]. En particular, los químicos pueden modelar (diseñar) nuevas moléculas y predecir si estas podrían existir en forma estable en las condiciones normales del medioambiente o si tienen una

lidad práctica. Con estos *experimentos virtuales* se puede ahorrar mucho tiempo de experimentación y también dinero gastado en reactivos químicos en el laboratorio. Esto es muy útil porque los científicos deben descartar muchas hipótesis antes de comprobar alguna que sea útil. En este contexto, el astrónomo puede apoyarse en estas técnicas para corroborar o descartar el descubrimiento de nuevas moléculas en el medio interestelar.

### La química como herramienta de la astronomía

Como ya se mencionó anteriormente, hay más de 200 moléculas cuya existencia en el medio interestelar ha sido confirmada. Sin embargo, todavía hay otras cuya existencia es dudosa porque la información astronómica obtenida es difusa para llegar a conclusiones definitivas. En el contexto del proyecto FONDECYT N° 1191019, de los autores de este artículo, fue posible estudiar moléculas de interés astronómico con el objetivo de establecer un criterio confiable que respalde las observaciones astronómicas. El desarrollo del estudio fue realizado en la UCEN, en colaboración con la Universidad Autónoma de Chile, la Universidad de Mississippi y el Ames Research Center de la NASA. Los resultados de este estudio fueron publicados en la prestigiosa revista de astronomía *Astronomy & Astrophysics*, con el título "*Quantification of molecular aromaticity as a predictive factor of astrophysical significance*" [10].

*El grado de aromaticidad en una molécula es un criterio muy usado por los químicos para predecir la existencia estable de una molécula.*

El proyecto FONDECYT mencionado, tiene como objetivo principal estudiar el concepto de *aromaticidad*<sup>2</sup> y para ello se utilizan computadores ("clusters") de última generación, pues se requiere resolver complicadas ecuaciones de la mecánica cuántica<sup>3</sup>. En un artículo anterior de esta revista "*Magnetismo y Química Cuántica*"

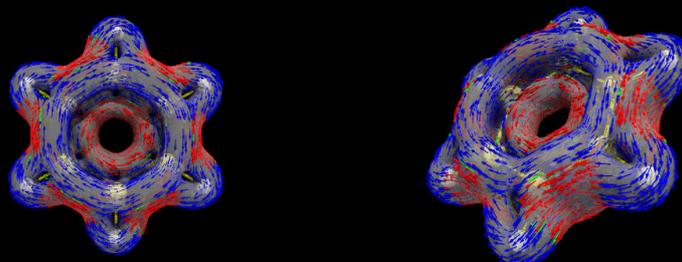
<sup>2</sup> El término *aromaticidad* es por razones históricas. El benceno es un líquido incoloro con un olor característico, pero eso no quiere decir que todas las moléculas aromáticas tengan olor.

<sup>3</sup> La *mecánica cuántica* es una rama fundamental de la física que estudia los fenómenos a escala atómica y molecular.

<sup>4</sup> El *índice de aromaticidad* es un valor (número) que cuantifica este concepto. Esta cuantificación sigue la misma idea del índice de acidez de las sustancias (escala pH).

<sup>5</sup> El *benceno* es la molécula aromática de referencia, por lo tanto, cualquier otra molécula cuyo índice de aromaticidad sea mayor (menor) al del benceno es más (menos) aromática.

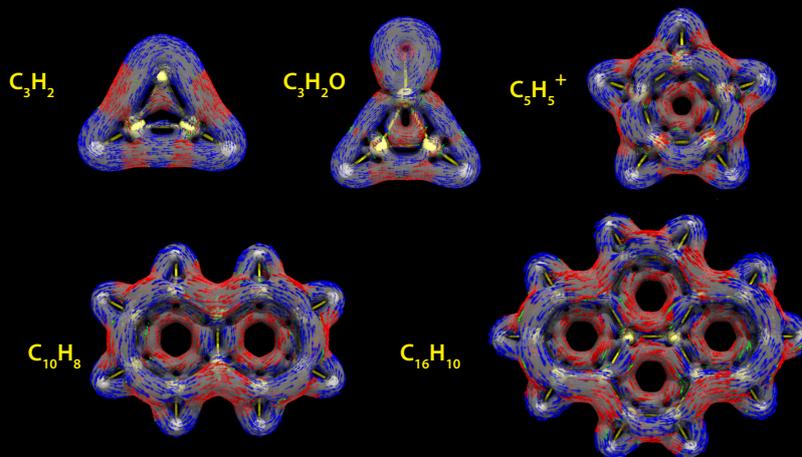
[11] se describió el concepto de aromaticidad como la capacidad de reacción de los electrones de una molécula cuando esta es sometida a un campo magnético externo. Como consecuencia del campo magnético aplicado, los electrones libres de la molécula tienden a "circular" alrededor de esta. Entonces el grado de mayor o menor movilidad de los electrones indica el grado de aromaticidad de la molécula. Por lo general se habla de aromaticidad en moléculas cuya estructura geométrica forme un anillo. El ejemplo más emblemático es la molécula de benceno, que está formada por un anillo de seis átomos de carbono y seis átomos de hidrógeno ( $C_6H_6$ ). La figura 4 muestra una reproducción de una figura del artículo emanado de la colaboración [10]. En ella se muestra la molécula de benceno, donde claramente se observa un "flujo de electrones" (representado por flechas) circulando alrededor de la molécula.



**Figura 4**

Dos vistas de la representación 3D de la aromaticidad en benceno ( $C_6H_6$ ). La existencia y estabilidad de esta molécula podría ser explicada por el flujo de electrones, formando una "corriente eléctrica" que circula alrededor del anillo molecular.

La conclusión principal del mencionado artículo [10], explica que la metodología utilizada tiene el potencial de ser una herramienta auxiliar importante para futuras observaciones astronómicas. Moléculas como el benceno y otras moléculas aromáticas tienen la particularidad de ser estables (no se destruyen y no se combinan fácilmente con otras), de tal modo que pueden ser detectadas. Es por eso que es muy importante determinar un *índice de aromaticidad*<sup>4</sup> para las moléculas estudiadas. Adicionalmente, el estudio abarcó un conjunto de moléculas de interés astronómico, algunas de las cuales todavía no se tiene certeza de su existencia en el medio interestelar. La figura 5 muestra una pequeña selección de las moléculas estudiadas. Como característica común, todas ellas forman un "anillo" compuesto por átomos de carbono e hidrógeno (*Polycyclic aromatic hydrocarbons en inglés*). Este índice de aromaticidad, aplicado a moléculas en el medio interestelar, puede incentivar a los astrónomos a la búsqueda de moléculas cuyo índice de aromaticidad indique una probable formación o estabilidad de estas en el espacio interestelar<sup>5</sup>.



**Figura 5**

Selección de moléculas estudiadas en la referencia 8. Como característica principal Todas ellas forman un circuito cerrado a través del cual fluyen los electrones, indicando su grado de aromaticidad.

El estudio referenciado [10], resultó de una colaboración insospechada entre varios científicos. Específicamente, la experticia combinada de los 4 autores permitió publicar un estudio teórico orientado a la comunidad astroquímica mundial y con ello contribuir con un grano de polvo en la comprensión global del origen la de vida en el Universo.

Agradecimientos: El estudio referenciado [10] en este artículo ha sido posible gracias al financiamiento del proyecto FONDECYT °N 1191019.

## Referencias

- [1] Alessandra Candian, Junfeng Zhen, and Alexander G. G. M. Tielens, "The aromatic universe", *Physics Today* 71, 38-43 (2018) <https://doi.org/10.1063/PT.3.4068>
- [2] Alvarez, L. "H3+: La molécula que creó el universo", *Ingeniería al día*, Vol. 6, (2018) p18-20.
- [3] Wesson R., Liu X.-W. (2004), Physical conditions in the planetary nebula NGC 6543, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 351, p.1026
- [4] Inostroza. N. et al., *Chemical Physics Letters*, (2012), 524, 25-31.
- [5] J. Cami et al., *Science* 329, 1180 (2010)
- [6] E. K. Campbell et al., *Nature*, 523, 322 (2015)
- [7] D. Meliga and S. Z. Lavagnino "Infrared-Active Vibrational Modes in Water", <http://demonstrations.wolfram.com/InfraredActiveVibrationalModesInWater/>  
Wolfram Demonstrations Project, Published: January 10 2020
- [8] Inostroza, N. et al. *Astronomy & Astrophysics* (2022). <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202243520>.

- [9] Inostroza, N. et al., *J. Chem. Phys.* (2011) 135(24), 244310.
- [10] Alvarez-Thon, L. et al., *A&A* 662 A106 (2022), DOI: 10.1051/0004-6361/202243253
- [11] Alvarez, L. "Magnetismo y Química Cuántica", *Ingeniería al día*, Vol. 7, N.o1 (2017)

Figura: nebulosa Ojo de Gato. (CatsEye\_HubblePohl\_960.jpg)

Creditos de la imagen: NASA, ESA, Hubble Legacy Archive; Chandra X-ray Obs.; Processing & Copyright: Rudy Pohl.  
Tomada con el telescopio espacial Hubble.

Imagen de la nebulosa Carina: IMAGE: NASA, ESA, CSA, STScI

Carina Nebula. -STScI-01G7ETQCAQ2HBGGHTYCQ53FGG.png

Unless otherwise specifically stated, no claim to copyright is being asserted by STScI and material on this site may be freely used as in the public domain in accordance with NASA's contract. However, it is requested that in any subsequent use of this work NASA and STScI be given appropriate acknowledgement.



Universidad  
Central

# CONOCE NUESTRA ESCUELA DE INGENIERÍA



**UNIVERSIDAD CENTRAL**  
**ACREDITADA EN NIVEL AVANZADO**  
EN LAS ÁREAS DE GESTIÓN INSTITUCIONAL, DOCENCIA DE PREGRADO,  
VINCULACIÓN CON EL MEDIO HASTA ENERO 2026



Facultad de Ingeniería y Arquitectura - Finarq UCEN



@Finarq\_UCEN



@finarq.ucen



Universidad Central



[www.ucentral.cl](http://www.ucentral.cl)



**RADIO**  
**UCENTRAL**  
107.1 FM