

Title: Formación de Gliceraldehído y Dihidroxiacetona en hielo amorfo (ASW) del medio interestelar (ISM) mediante química radical difusiva

Rosell Martín Gómez (Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA; Departamento de I. Química y Química Física, Universidad de Extremadura)

Sala de Tesis. Edificio José María Viguera Lobo (Facultad de Ciencias)

Viernes 24 de abril de 2026. 12.00 h

Abstract:

Una de las preguntas más fundamentales de la astrobiología es si las biomoléculas necesarias para el origen de la vida pudieron haberse formado en el medio interestelar (ISM) antes de ser entregadas a la Tierra a través de impactos de meteoritos (Cooper et al., 2001). En este contexto, los azúcares de tres carbonos como son el gliceraldehído (GLY) y la dihidroxiacetona (DHA) juegan un papel relevante como intermediarios clave en la reacción de Formosa y como precursores directos de la ribosa, el azúcar presente en el ARN (Larralde et al., 1995; Ricardo et al., 2004).

A pesar de que azúcares de dos carbonos, como el glicolaldehído (GA) (Jørgensen et al., 2012) y su derivado el etilenglicol (EG) (Hollis et al. 2002), así como azúcares de cuatro carbonos (Jiménez-Serra, et al. 2026), han sido detectados en el medio interestelar (ISM), el GLY y DHA permanecen sin detectar en regiones de formación estelar. Las observaciones de alta sensibilidad llevadas a cabo por Jiménez-Serra et al. (2020) en la nube molecular G+0.693–0.027 y en la protoestrella IRAS16293–2422 B establecieron límites superiores de abundancia por debajo de los de sus análogos de dos carbonos. Esta ausencia observacional plantea la siguiente pregunta: ¿pueden los mecanismos de formación sobre superficies de hielo interestelar explicar la ausencia de estas especies?

En este trabajo se lleva a cabo un estudio computacional de la formación de GLY y DHA sobre superficies de agua sólida amorfa (ASW) en las condiciones del ISM. Proponemos dos rutas de recombinación de radicales: la formación de GLY a partir de los radicales $\text{HOCH}_2\text{C}\cdot\text{HOH}$ + $\text{HC}\cdot\text{O}$, y la formación de DHA a partir de $\text{HOCH}_2\text{C}\cdot\text{O}$ + $\cdot\text{CH}_2\text{OH}$. Como modelo de ASW se seleccionó un cluster de 33 moléculas de agua generado previamente por (Rimola et al., 2018). Para estudiar la asociación de ambos radicales se supuso que distintos rotámeros de $\text{HOCH}_2\text{C}\cdot\text{O}$ y $\text{HOCH}_2\text{C}\cdot\text{HOH}$ están preabsorbidos en la superficie del cluster de ASW y los radicales $\text{HC}\cdot\text{O}$ y $\cdot\text{CH}_2\text{OH}$ son los fragmentos móviles que se aproximan a los radicales de mayor tamaño. En total se estudiaron 300 aproximaciones para cada rotámero seleccionado y para cada pareja de radicales. Con esta metodología no se discriminó entre mecanismos de

Eley-Rideal y Langmuir-Hinshelwood, ya que se cubrieron todas las posibles aproximaciones de los radicales móviles a los preabsorbidos.

Los resultados muestran eficiencias de formación globales del 20% para GLY y del 23% para DHA, comparables a las descritas para otras moléculas orgánicas complejas en condiciones similares (Lamberts et al., 2019, Sanz-Novo et al., 2025). Aunque las reacciones son altamente exotérmicas (entre -94 y -116 kcal/mol), las probabilidades de deserción química son bajas ($P_{CD}^i < 1.20$), lo que implica que aproximadamente el 80% de las moléculas formadas permanecen atrapadas en el manto de hielo. Este resultado muestra que, aunque su formación no es excesivamente eficiente, debería justificar su detección en regiones de choque del ISM, por lo que aún está por demostrar si estas especies pueden resistir en la superficie del hielo tras el impacto de rayos cósmicos.

Referencias

1. Cooper, G., Kimmich, N., Belisle, W., Sarinana, J., Brabham, K., & Garrel, L. (2001). Carbonaceous meteorites as a source of sugar-related organic compounds for the early Earth. *Nature*, *414*(6866), 879-883.
2. Larralde, R., Robertson, M. P., & Miller, S. L. (1995). Rates of decomposition of ribose and other sugars: implications for chemical evolution. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, *92*(18), 8158-8160.
3. Ricardo, A., Carrigan, M. A., Olcott, A. N., & Benner, S. A. (2004). Borate minerals stabilize ribose. *Science*, *303*(5655), 196-196.
4. Jørgensen, J. K., Favre, C., Bisschop, S. E., Bourke, T. L., Van Dishoeck, E. F., & Schmalzl, M. (2012). Detection of the simplest sugar, glycolaldehyde, in a solar-type protostar with ALMA. *The Astrophysical Journal Letters*, *757*(1), L4.
5. Hollis, J. M., Lovas, F. J., Jewell, P. R., & Coudert, L. H. (2002). Interstellar antifreeze: ethylene glycol. *The Astrophysical Journal Letters*, *571*(1), L59-L62.
6. Jiménez-Serra, I., et al. (2026). *Bajo supervisión*.
7. Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rivilla, V. M., Rodríguez-Almeida, L., Alonso Alonso, E. R., Zeng, S., ... & Testi, L. (2020). Toward the RNA-world in the interstellar medium—detection of urea and search of 2-amino-oxazole and simple sugars. *Astrobiology*, *20*(9), 1048-1066.
8. Rimola, A., Skouteris, D., Balucani, N., Ceccarelli, C., Enrique-Romero, J., Taquet, V., & Ugliengo, P. (2018). Can formamide be formed on interstellar ice? An atomistic perspective. *ACS Earth and Space Chemistry*, *2*(7), 720-734.
9. Lamberts, T., Fedoseev, G., Puletti, F., Ioppolo, S., Cuppen, H. M., & Linnartz, H. (2016). Low-temperature chemistry between water and hydroxyl radicals: H/D isotopic effects. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, *455*(1), 634-641.
10. Sanz-Novo, M., Molpeceres, G., Rivilla, V. M., & Jiménez-Serra, I. (2025). Conformational isomerism of methyl formate: New detections of the higher-energy trans conformer and theoretical insights. *Astronomy & Astrophysics*, *698*, A36.