

# SUL4LIFE: TRAS EL AROMA DE LA VIDA

El proyecto “The trail of sulphur: from molecular clouds to life” (SUL4LIFE) (IP: Asunción Fuente) ha sido seleccionado por la Unión Europea para su financiación dentro del programa ERC AdG 2022 – Grant Agreement No101096293 (<https://cab.inta-csic.es/proyectos/the-trail-of-sulphur-from-molecular-clouds-to-life-sul4life/>). El objetivo de este proyecto es determinar cómo llegó el azufre a nuestro planeta, un paso fundamental para comprender la aparición de la vida. Para ello, emplearemos una metodología innovadora para determinar la evolución química de este elemento en el medio interestelar y seguir su rastro hasta la formación de los planetas.



## SUL4LIFE

Asunción Fuente

Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA  
[afuente@cab.inta-csic.es](mailto:afuente@cab.inta-csic.es)

Marina Rodríguez Baras

Observatorio Astronómico Nacional (OAN, IGN)  
[m.rodriguez@oan.es](mailto:m.rodriguez@oan.es)

## ¿POR QUÉ ES IMPORTANTE CONOCER LAS ABUNDANCIAS DE LOS ELEMENTOS EN EL ESPACIO?

El estudio de las abundancias de los elementos es esencial para entender la química cósmica y la evolución del universo. Durante el Big Bang, se formaron los átomos de hidrógeno (H), helio (He) y trazas de otros elementos ligeros como litio (Li) y berilio (Be). Los elementos más pesados se forman en el interior de estrellas masivas y se dispersan posteriormente en el medio interestelar.

El Sol contiene más del 99% de la masa del Sistema Solar, y su composición química puede considerarse similar a la de la nube interestelar natal a partir de la cual se formó hace más de 4 mil millones de años. Sin embargo, la composición química del resto de los objetos del Sistema Solar, desde planetas y satélites hasta asteroides y cometas, difiere notablemente del estándar solar. Esta variación tiene su origen en la compleja sucesión de procesos físico-químicos que se desarrollaron desde el colapso de la nube materna hasta la formación de los cuerpos celestes individuales. Investigar estas discrepancias composicionales ofrece valiosas perspectivas sobre la formación de la Tierra y el resto de los cuerpos de nuestro sistema planetario.

Hoy creemos que una fracción de la materia prima a partir de la cual se formó la vida pudo tener un origen exógeno, es decir, llegó a la Tierra con el intenso bombardeo de cuerpos cometarios que sufrió hace unos 3800 millones de años (el llamado “Bombardeo intenso tardío”) (ver Fig. 1). Se considera que la composición de estos cometas es similar a la de los hielos que cubrían los granos de polvo en la nebulosa protosolar inicial. Por lo tanto, conocer la composición química del azufre en las nubes interestelares nos proporcionará una información clave para comprender cómo se incorporaron los átomos de azufre a nuestro planeta y, finalmente, a la vida.

El estudio de las abundancias elementales nos brinda una ventana única para comprender los procesos físicos y químicos que dieron origen a los planetas y, por extensión, a la vida misma. La utilización de observaciones con alta resolución espacial como las obtenidas con los interferómetros milimétricos ALMA del Observatorio Europeo Austral (ESO), NOEMA del Instituto de Radioastronomía Milimétrica (IRAM) y el EVLA del Observatorio Nacional de Radioastronomía (NRAO) de Estados Unidos, nos permite abordar

problemas tan importantes como la composición química de la materia durante las primeras etapas de la formación de planetas en un disco protoplanetario. El Telescopio Espacial James Webb (JWST) y, en los próximos años, la misión espacial ARIEL de la Agencia Espacial Europea (lanzamiento previsto para 2029) proporcionarán información detallada sobre la composición química de las atmósferas de numerosos exoplanetas. Por primera vez, los astrónomos podremos trazar la evolución de los elementos desde el nacimiento de las estrellas hasta el origen de los planetas y la vida.

### ¿POR QUÉ EL AZUFRE?

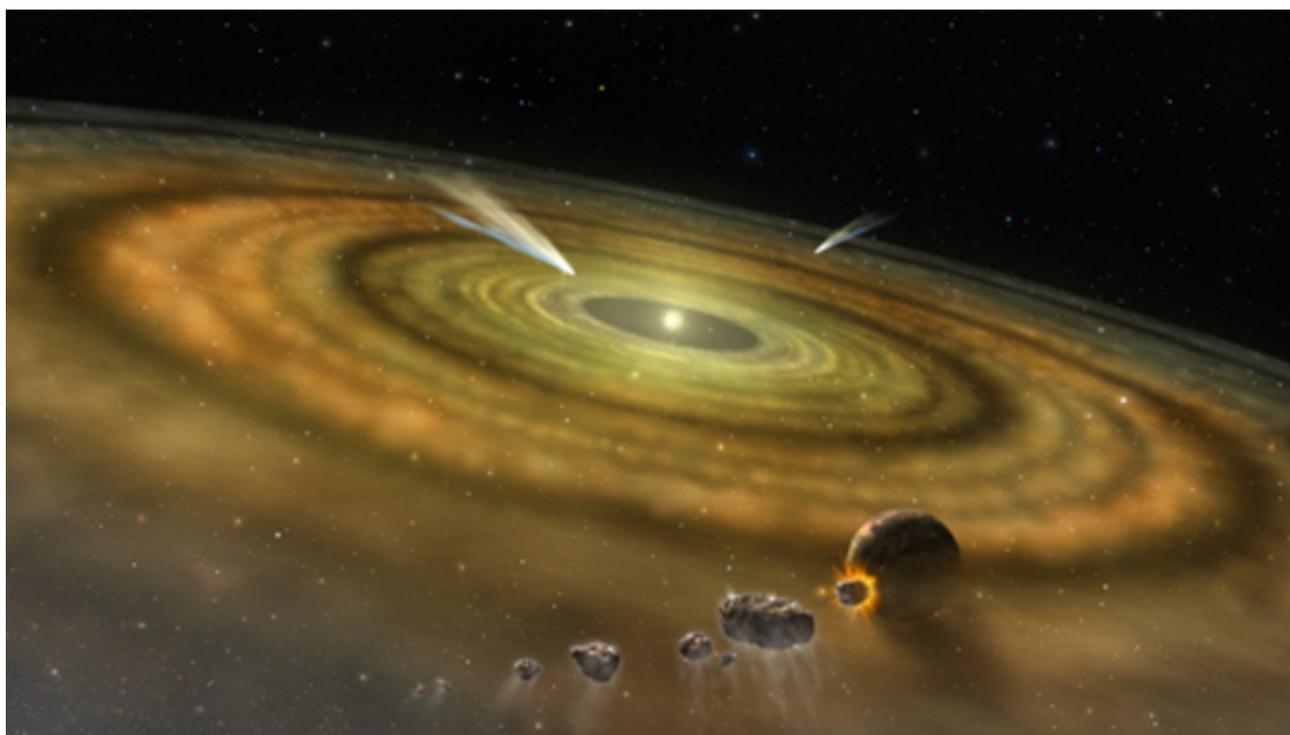
Hay seis elementos que son especialmente importantes para nosotros porque están ligados al origen de la vida: carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno, fósforo y azufre (CHONPS). El azufre representa el 0.2% del peso del cuerpo humano y se encuentra en una amplia variedad de biomoléculas, como aminoácidos, ácidos nucleicos, azúcares y vitaminas. Se considera, además, que algunos compuestos de azufre como el  $H_2S$  han sido necesarios como

catalizadores para la formación de aminoácidos en el medio interestelar [1]. A pesar de que se ha investigado mucho sobre la química del azufre, aún quedan muchas preguntas cruciales que responder. Por ejemplo, no sabemos cuánto azufre hay y cómo se distribuye entre el gas y el polvo en las zonas donde se forman los planetas. Realizar un gran proyecto que investigue la historia del azufre en el espacio y cómo llegó a nuestro Sistema Solar, y a otros sistemas exoplanetarios, es necesario para determinar los compuestos y los procesos químicos a partir de los cuales se originó de la vida.

### UN ELEMENTO MISTERIOSO

El desconocimiento de la química del azufre en el medio interestelar no se debe a un desinterés por parte de los astrónomos y astroquímicos, sino a la dificultad que entraña su estudio. Los astroquímicos utilizamos los telescopios como herramientas básicas para conocer la composición química del universo. Sabemos que todas las especies gaseosas emiten a frecuencias características del espectro electromagnético (una especie de huella dactilar). Un análisis detallado

Figura 1. Visión artística del bombardeo de un planeta por cuerpos cometarios en el disco protoplanetario progenitor. Créditos de la imagen: NASA/FUSE/Lynette Cook.



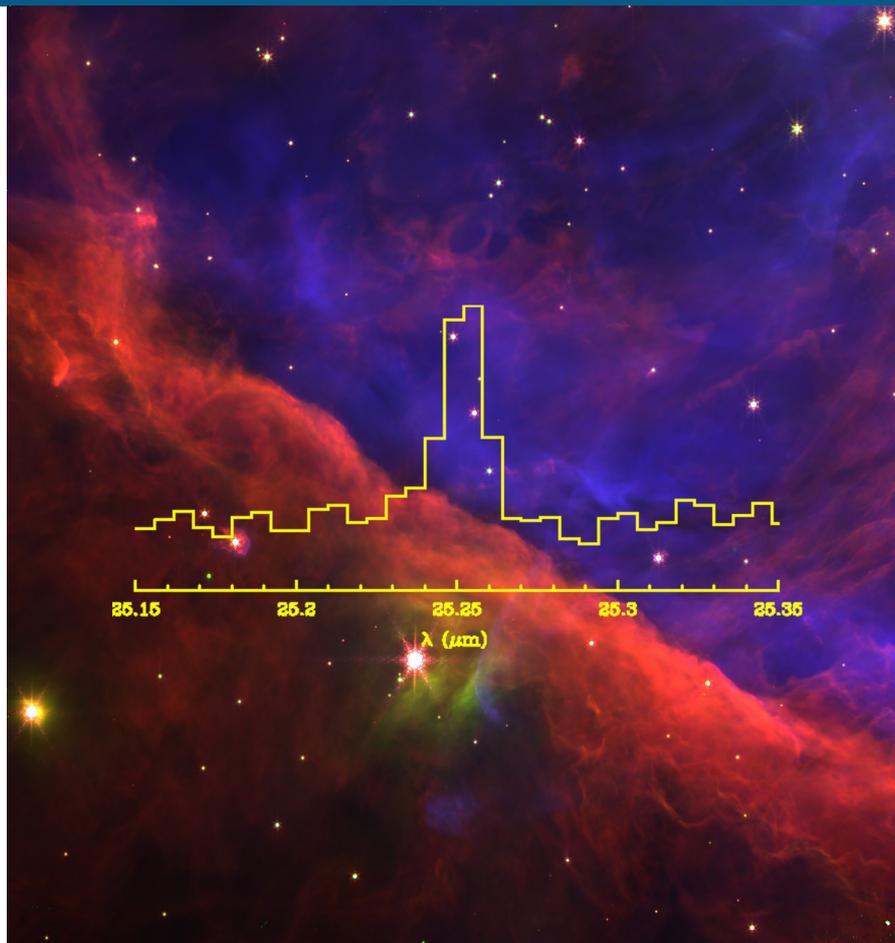


Figura 2. Espectro de la línea [S I]  $3P^1 \rightarrow 3P^2$  a 25.2490 micras en la región de fotodisociación conocida como “Barra de Orión” observada con el JWST [8]. La Barra de Orión es la característica diagonal bastante recta que marca la transición del gas caliente ionizado cerca de las estrellas del Trapecio (azul) a la nube molecular fría (rojo) al otro lado de la barra. La imagen de fondo es una composición RGB en la que el color azul muestra la emisión del gas caliente ionizado (filtro NIRCcam F187N), el color rojo muestra la emisión de grandes moléculas carbonosas (filtro NIRCcam F335M), y el color verde traza el polvo caliente y el gas molecular (filtro NIRCcam F470N) [19]. Créditos de la imagen de fondo: NASA/ESA/CSA, E. Dartois, E. Habart, PDRs4All ERS team.

de los espectros observados con la instrumentación de vanguardia (NOEMA, ALMA, e-VLA, JWST) nos permite determinar la composición química de diferentes objetos, ya sean una nube de gas y polvo interestelar o una atmósfera planetaria. A partir de la comparación entre unos objetos y otros podemos reconstruir la evolución química que sufre la materia en el proceso de formación de estrellas y planetas.

A pesar de los extraordinarios avances que se han producido en la instrumentación astronómica en los últimos años, nuestro conocimiento de la química del azufre en el espacio sigue siendo muy limitado. La principal razón es que los compuestos de azufre más abundantes en el medio interestelar, el azufre atómico neutro (S) y el hielo de  $H_2S$  (a partir de ahora lo llamaremos s- $H_2S$ ), no se pueden observar de manera extensiva. Esta limitación se debe a que estas

especies no tienen transiciones que sean suficientemente intensas para ser detectadas, en las condiciones físicas que imperan en el medio interestelar. En el caso del azufre atómico, su transición  $3P^1 \rightarrow 3P^2$  a 25.2490 micras solo se espera que sea observable en regiones densas y calientes, que son una fracción muy pequeña de la masa de gas en el medio interestelar. La gran sensibilidad del JWST ha permitido detectar azufre atómico en la nebulosa de Orión, proporcionando información valiosa sobre la abundancia de este elemento en el gas molecular caliente ( $T > 50$  K) que rodea la región ionizada (ver Fig. 2, [2]). Siendo éste un gran paso en nuestro conocimiento de la abundancia del azufre atómico, aún seguimos desconociendo su abundancia en regiones más frías del medio interestelar como pueden ser las condensaciones pre-estelares o la parte externa de los discos protoplanetarios. El s- $H_2S$  es la especie

azufrada más abundante en cometas [3]. En el medio interestelar solo puede ser detectada a través de su banda a  $3.92 \mu\text{m}$ . A pesar de los sucesivos intentos de detección, esta especie no ha sido observada aún y solo tenemos límites superiores a su abundancia [4]. Las observaciones más recientes del JWST sugieren que su abundancia es menor que 0.6% respecto al  $\text{H}_2\text{O}$  en la nube molecular Chamaleon I [5]. Cabría esperar que s- $\text{H}_2\text{S}$  pudiera presentar mayores abundancias en otros entornos. El solapamiento de esta banda de s- $\text{H}_2\text{S}$  con una banda más intensa de s- $\text{CH}_3\text{OH}$ , un componente mayoritario del hielo interestelar, dificulta enormemente su detección.

Afortunadamente, existen muchos otros compuestos azufrados que se pueden observar rutinariamente en el medio interestelar utilizando grandes telescopios milimétricos. Hasta ahora, se han detectado 38 especies gaseosas [6] (<https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/molecules>) y una especie sólida (s-OCS, [7]). Las abundancias de estos compuestos se utilizan para determinar la cantidad de azufre en el gas y en el hielo interestelar, así como su composición química detallada. Aunque las especies observadas son numerosas, la cantidad de azufre contenido en

ellas es menos del 5% del total [13]. Determinar la composición química de todo el azufre a partir de las observaciones de estas moléculas es como intentar determinar la composición química del océano sin saber la cantidad de agua que contiene.

### UN ENFOQUE INNOVADOR

El objetivo de SUL4LIFE es mejorar nuestro conocimiento de la química del azufre utilizando una metodología innovadora, capaz de sortear los obstáculos observacionales anteriormente descritos, para determinar la evolución química de este elemento hasta la formación de la vida. En SUL4LIFE utilizaremos experimentos de laboratorio que reproducen las condiciones físicas en el medio interestelar para simular evolución química de este elemento en el espacio. Estos experimentos se realizarán en el laboratorio de hielos del Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA, [8] donde investigaremos cómo varían las abundancias de las moléculas azufradas contenidas en los hielos bajo irradiación con radiación UV y rayos X (Fig. 3). Estas condiciones son las que sufren los hielos en la superficie de los discos protoplanetarios donde se están formando los planetas y, por tanto, es uno de nuestros objetivos prioritarios.

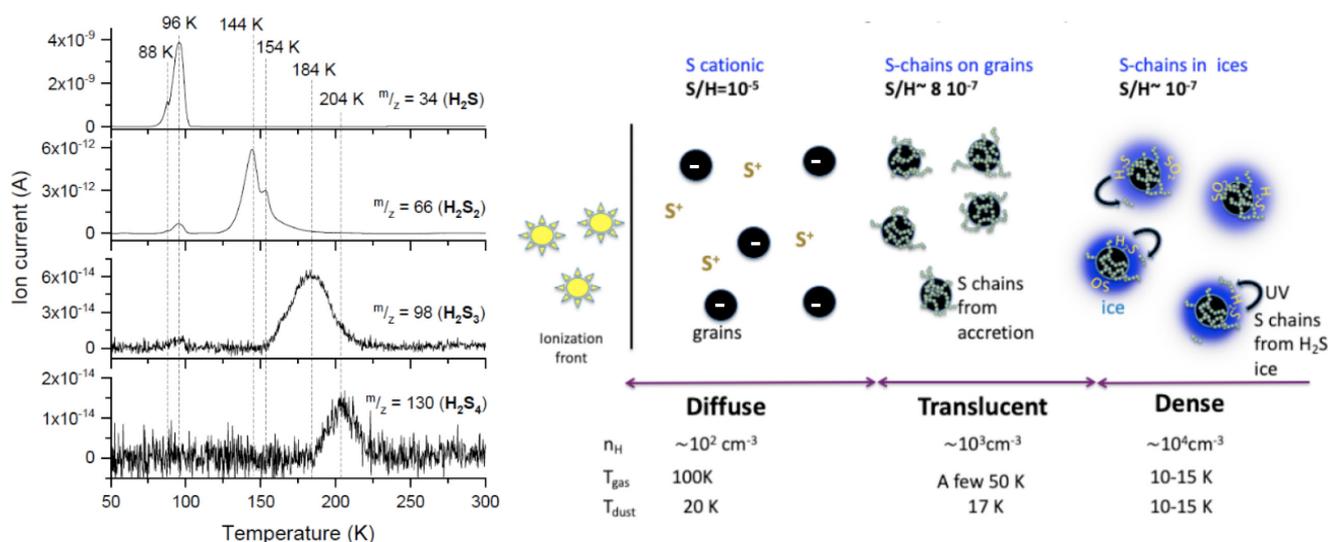


Figura 3. A la izquierda podemos observar la desorción térmica de las especies formadas en un hielo puro de  $\text{H}_2\text{S}$  que ha sido irradiado con fotones ultravioleta. Se observa la formación de moléculas con dobles y triples enlaces de azufre ( $\text{H}_2\text{S}_2$ ,  $\text{H}_2\text{S}_3$ ) [18]. A la derecha vemos un esquema propuesto en [12] para explicar la depleción de azufre en nubes oscuras. Se propone que la formación de alótropos de azufre ( $\text{S}_n$ ) en la parte traslúcida de las nubes moleculares puede explicar la baja abundancia de los compuestos azufrados observada en fase gaseosa.

Estos experimentos se combinarán con cálculos químicos mecano-cuánticos que permitirán determinar las tasas de las reacciones de formación y destrucción de las diferentes moléculas azufradas tanto en el gas [9] como en el hielo. Los modelos químicos utilizados en astroquímica contienen decenas de miles de reacciones en fase gaseosa [10]. La selección de las reacciones a investigar es en sí misma un objetivo, pues la importancia relativa de cada una de ellas es dependiente de las condiciones físicas y químicas en un tiempo determinado.

Aunque la evolución de la materia interestelar desde la nube materna a la formación del disco protoplanetario dura unos pocos millones de años, pensamos que la composición química del disco está determinada en gran medida por la composición química de la nube molecular progenitora y su evolución dinámica durante el colapso. En consecuencia, debemos rastrear el contenido de azufre desde la nube natal hasta los discos protoplanetarios para entender cuánto y en qué forma se incorpora el azufre a las lunas, planetas y, eventualmente, a la vida. Desde el punto de vista teórico, este rastreo se realizará mediante el uso de simulaciones magnetohidrodinámicas (MHD) y químicas que nos permitan seguir la evolución química de la materia durante el colapso y la formación del disco protoplanetario [11] (ver Fig. 4).

Estas simulaciones tan complejas solo se pueden realizar extensivamente utilizando inteligencia artificial para acelerar los cálculos y reducir el tiempo de computación. El poder predictivo de estas simulaciones será contrastado y mejorado mediante la comparación exhaustiva de sus predicciones con nuestra extensa base de datos observacionales, que incluye observaciones de la máxima calidad de una muestra amplia de moléculas azufradas en objetos astronómicos en diferentes estadios evolutivos: nubes moleculares [12, 13], objetos estelares jóvenes [14, 15] y discos protoplanetarios [16, 17].

El éxito de este proyecto requiere un esfuerzo continuo en el desarrollo de técnicas de observación, experimentos de laboratorio, cálculos *'ab initio'* y simulaciones numéricas cada vez más complejas que nos permitan reproducir la realidad con fidelidad. Este esfuerzo solo es posible con un equipo multidisciplinar que trabaje coordinadamente hacia la consecución de los objetivos.

## HACIA EL FUTURO

Gracias a la financiación de la Unión Europea (ERC-AdG-2022 SUL4LIFE), hemos podido crear un equipo multidisciplinar capaz de abordar este ambicioso proyecto. SUL4LIFE se posiciona así en la primera línea de la investigación sobre la química del azufre en el espacio, uniendo observaciones de vanguardia, experimentos de laboratorio y simulaciones teóricas para resolver uno de los mayores misterios de la astrobiología: cómo uno de los elementos esenciales para la vida llegó a formar parte de planetas como la Tierra.

Además, nuestro proyecto se sincroniza perfectamente con el desarrollo instrumental. Combinando las observaciones de ALMA y otros telescopios de alta resolución, como los interferómetros NOEMA y EVLA, podremos abordar algunas de las cuestiones más importantes sobre las primeras etapas de la formación planetaria. Además, el JWST y la futura misión ARIEL de la Agencia Espacial Europea nos proporcionarán conocimientos increíbles sobre la composición química de las atmósferas de muchos exoplanetas.

En conclusión, SUL4LIFE representa un enorme esfuerzo que involucra investigadores de diferentes disciplinas trabajando colaborativamente para investigar la historia del azufre en el cosmos, explorar la evolución este elemento vital durante la formación de las estrellas y revelar cómo se acaba integrando en los mundos donde la vida puede emerger.

## REFERENCIAS

- [1] Canavelli, P., Islam, S., & Powner, M. W., 2019, *Nature*, 571, 546
- [2] Fuente, A., Roueff, E., Le Petit, F., et al., 2024, *A&A*, in press (arXiv:2404.09235)
- [3] Calmonte, U., Altwegg, K., Balsiger, H., et al., 2016, *MNRAS*, 462, S253
- [4] Jiménez-Escobar, A. & Muñoz-Caro, G. M., 2011, *A&A* 536, A91
- [5] Mc Clure, M. K., Rocha, W. R. M., Pontoppidan, K. M., et al., 2023, *Nature Astronomy*, 7, 431
- [6] Endres, C.P., Schlemmer, S., Schilke, P., Stutzki, J., & Müller, H. S. p., *he Cologne Database for Molecular Spectroscopy, CDMS, in the Virtual Atomic and Molecular Data Centre, VAMDC J. Mol. Spectrosc.* 327, 95–104 (2016)
- [7] Boogert, A. C. A., Brewer, K., Brittain, A. et al., 2022, *ApJ*, 941, 32

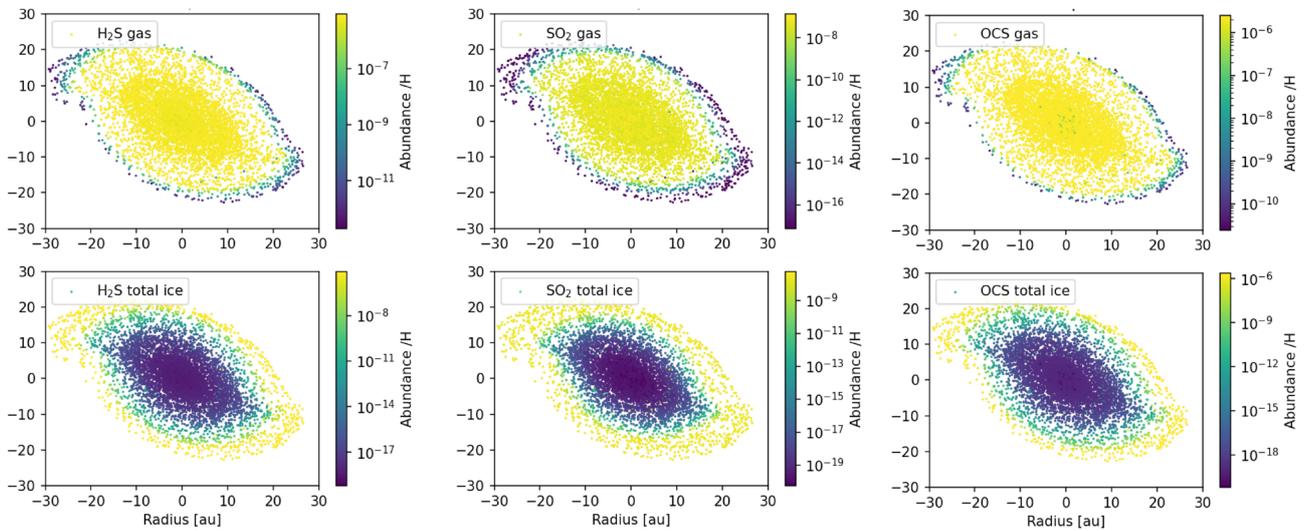


Figura 4. Predicciones de las abundancias de especies azufradas en fase gaseosa y en el hielo en el disco recién formado al inicio de la etapa Clase 0 de la formación de una estrella de masa similar al Sol. Estas predicciones están basadas en simulaciones MHD acopladas a un complejo modelo químico [11]. El azufre que permanece congelado en la superficie de los granos interestelares en las zonas frías de la nube molecular se sublima incorporándose a la fase gaseosa en la zona interna del disco.

- [8] Muñoz-Caro, G. M., Jiménez-Escobar, A., Martín-Gago, J. A., et al. 2010, A&A, 522, A108
- [9] Rocha, C. M. R., Roncero, O., Bulut, N., et al., 2023, A&A, 677, A41
- [10] Ruaud, M., Wakelam, V., & Hersant, F., 2016, MNRAS 459, 4, 3756
- [11] Navarro-Almáida, D., Lebreuilly, U., Hennebelle, P., et al., 2024, A&A, in press (arXiv:2403.01905)
- [12] Fuente, A., Navarro, D. G., Caselli, P., et al., 2019, A&A, 624, A105
- [13] Rodríguez-Baras, M., Fuente, A., Rivière-Marichalar, P., et al., 2021, A&A, 648, A120
- [14] Valdivia-Mena, M. T., Pineda, J. E., Segura-Cox, D. M., et al. 2022, A&A, 667, A12
- [15] Esplugues, G., Rodríguez-Baras, M., San Andrés, D., et al., 2023, A&A, 678, A199
- [16] Rivière-Marichalar, P., Fuente, A., Esplugues, G., et al., 2022, A&A, 665, A61
- [17] Semenov, D., Henning, Th., Guilloteau, S., et al., 2024, A&A, in press (arXiv:2402.14653)
- [18] Cazaux, S., Carrascosa, H., Muñoz-Caro, G.M., et al., 2022, A&A, 657, A100
- [19] Habart, E., Peeters, E., Berné, O., et al., 2024, A&A, 685, A73

