

El rol fundamental de los métodos *ab initio* en Astroquímica

María Luisa Senent

Resumen: Los cálculos *ab initio* de alto nivel representan una herramienta fundamental y a veces insustituible de interpretación de las observaciones astrofísicas para detección de moléculas. En los últimos treinta años, se han detectado más de 150 especies moleculares de tamaños que van desde diatómicas a grandes fullerenos e hidrocarburos policíclicos aromáticos. Estas especies, cuyo número se espera aumentar con los nuevos instrumentos de observación, son auténticas sondas de las condiciones físico-químicas de las fuentes. Se describen cuatro campos de aplicación de los cálculos *ab initio* a la astroquímica para sistemas en fase gas.

Palabras clave: *ab initio*, astroquímica, espectroscopia, colisiones, medio interestelar.

Abstract: High level *ab initio* calculations represent basic and unique tools for the interpretation of astrophysical observations concerning molecular detection. During the last thirty years, more than 150 different species have been detected. Their properties and size varies from diatomics to large fullerenes and polycycle hydrocarbons. The detected species, which number is expected to augment with the new observatories, let us predict the chemical-physics conditions of the sources. Four lines of application of gas phase *ab initio* calculations to astrochemical problems are described.

Keywords: *ab initio*, astrochemistry, spectroscopy, collision, interstellar medium.