

Astroquímica: La Química del Espacio

Hernández Velázquez Edson Daniel (1), Trinidad Hernández Miguel Ángel (2)

1 Licenciatura en Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato | Dirección de correo electrónico: ed.hernandezvelazquez@ugto.mx

2 Departamento de Astronomía, División de Ciencias Naturales y Exactas, Campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato | Dirección de correo electrónico: trinidad@astro.ugto.mx

Resumen

En el medio interestelar, las condiciones son totalmente diferentes a las encontradas en cualquier laboratorio de experimentación, de tal forma que algunas moléculas que no son obtenidas con facilidad en un laboratorio, se dan naturalmente en este tipo de medios, donde la temperatura baja hasta los 10 K y las densidades son del orden de 10^3 cm^{-3} ; de este modo la reactividad de las moléculas se encuentra restringida por el poco o nulo contacto con otras especies y es gobernada por la radiación procedente de estrellas y cuantificada por las transiciones existentes en cada especie. En este trabajo estudiamos la química en la nube molecular DR21 y un disco circumestelar conocido como DM Tau, para lo cual realizamos una búsqueda en la literatura astronómica de las moléculas en estas regiones, así como de las condiciones con las que se han formado y las posibles rutas de reacción. Finalmente se propone una lista de moléculas que, dada la naturaleza de la región, puede aventurarse a su presencia, a pesar de no ser detectadas al día de hoy.

Abstract

In the interstellar medium, the conditions are totally different respect an experimentation laboratory, so many molecules of difficult formation in a laboratory, it form naturally in this type of medium, where the temperature is around the 10 K, and density it's from of 10^3 cm^{-3} , therefore, the molecular reactivity is restricted, for the interaction little or non-existent with other species, controlled for the radiation of the stars, and quantified for the existent transitions in the same. In this work, we analyze the chemistry of the molecular cloud or HII region, DR21, and a circumstellar disc, known as DM Tau, make a molecular search, the conditions whereby this species appear and the possible way of formation. Finally we propose molecules, where, the nature of the region can permit his formation, but they are no detected today.

Palabras Clave

Medio Interestelar, Región Foto-Dominada, Disco Circumestelar, Granos de Polvo, Nube Molecular

INTRODUCCIÓN

En el ISM, existen regiones de altas densidades y temperaturas diferentes al resto del espacio, donde se lleva a cabo la formación de nuevas estrellas, y son llamadas nubes moleculares.

DR21 es parte de una nube molecular donde se lleva a cabo el proceso de formación estelar,

conocida también como una región HII, encontrada en la constelación Cygnus, región X, a una distancia aproximada de 1.5 kpc (4.6259×10^{16} Km) de la tierra, tiene una masa aproximada de 3000 veces la masa del sol ($5,967 \times 10^{33}$ Kg) y una luminosidad de 50000 veces la luminosidad solar (1.923×10^{31} W). [1] En esta región se han estudiado 5 zonas de especial interés debido a la presencia de cúmulos densos, Jets moleculares y máseres, entre otros componentes, que permiten un mejor conocimiento

de la zona, las cuales son (imagen 2) FIR1, (OH), W, O y C.

DR21 presenta densidades de hidrógeno del orden de 10^3 cm^{-3} , la cual es una densidad mucho menor a cualquier densidad obtenida por un vacío dinámico en la tierra (10^7 cm^{-3}), aunque presenta también cúmulos de densidad del orden de $10^5 \text{ (cm}^{-3})$ donde la materia se ha compactado debido a la fuerza gravitacional y es posible la presencia de una futura protoestrella.

Cuando un cúmulo obtiene suficiente masa, la materia cercana al mismo comienza a sufrir un colapso gravitacional, formando un disco de acreción alrededor de la futura estrella. Este componente es conocido como disco circumestelar.

DM Tau es uno de ellos, el cual se muestra en la imagen 4. Se encuentra en la región de Taurus-Auriga, a una distancia de aproximadamente 140 pc, la estrella tiene una masa de aproximadamente la mitad de la masa del sol, una luminosidad de una cuarta parte de la solar, temperatura superficial de aproximadamente 3720 K, la cual la coloca en la clasificación de estrella del tipo espectral M1 [2]. En cuanto al disco, tiene un radio de aproximadamente 850 UA (Unidad Astronómica¹) (Distancia entre la tierra y el sol) y con temperaturas del orden de 10 – 20 K es sus zonas más frías, presenta densidades más elevadas que una nube molecular y su estructura presenta 3 zonas de diferente temperatura, y composición: Antes de 4 UA de la estrella, el disco es plano y ópticamente difuso, presenta gran cantidad de gas y polvo; en 4 UA se encuentra un muro de aproximadamente 0.5 UA de grosor, que se extiende perpendicular al plano del disco, con temperaturas del orden de 20 K, finalmente, después de 4 UA se presenta un disco circumestelar grueso estándar.

Estas características especiales de DR21 y DM Tau, han favorecido la formación de diferentes moléculas, las cuales serán caracterizadas, con la finalidad de analizar las posibilidades de reacción a partir de 2 posibles mecanismos: reacción en fase gaseosa y/o sobre la superficie de granos de polvo. Se determinaron las moléculas presentes en las regiones, haciendo uso de los espectros rotacionales y vibracionales procedentes de estas fuentes, a la vez que se postulan nuevas moléculas de presencia probable en DR21, pero aún no confirmadas, debido a dificultades al momento del

análisis del espectro y otros factores comunes que impiden su identificación.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para realizar el estudio de DR21 y DM Tau se consultaron las bases de datos, The SAO/NASA Astrophysics Data System, Centre de Données astronomiques de Strasbourg, SIMBAD Astronomical data base, UMIST RATE2012, data base for Astrochemistry y NIST Chemical Kinetics Database. En estos sitios se buscaron artículos que aportan información respecto a la naturaleza de las zonas de interés, moléculas detectadas en el medio interestelar y posibles reacciones propuestas para las mismas, de forma que puedan proponerse y/o descartarse posibilidades de reacción, llegando a obtener moléculas con altas posibilidades de formarse basándose en las características de las zonas y los precursores de moléculas ya confirmados. Se analizaron 44 artículos en la búsqueda de propiedades de las regiones y datos espectroscópicos.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A partir de la información extraída de los artículos y las bases de datos, se obtienen características de las regiones, de forma que para cada una de las zonas presentes en DR21, se obtienen diferentes capas de densidad y tamaños diferentes, y sus propiedades se muestran en la Tabla 1 [1]. En la región de DR21 C se observa un jet molecular, que se mueve en dirección Este – Oeste y que dada su velocidad (~80 km/s) y la carencia de fuentes de radiación cercanas a la nube, se sugiere que la energía necesaria para la formación de especies es dada por el movimiento de las especies químicas y moleculares a altas velocidades y las colisiones con otras especies del medio. En DR21 (OH) también se encuentran 2 jets de menor tamaño y menor velocidad. Estos jets presentan el mismo efecto sobre la química de la región, pero con menor eficiencia.

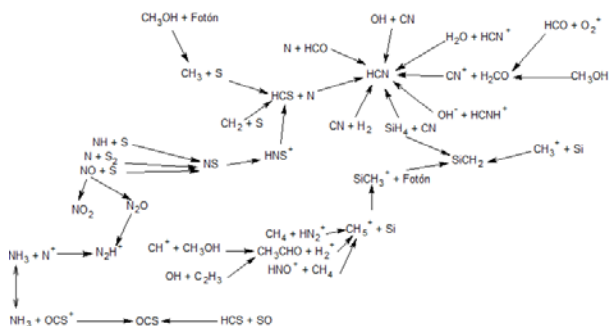
Haciendo uso de los datos obtenidos de la región, se han identificado un conjunto de moléculas (ver Tabla 2), donde también se presentan las densidades, densidades columnares y abundancia respecto al hidrógeno. Su presencia ha sido

confirmada en la zona de DR21 C y DR21 (OH) en su gran mayoría, y a partir de estas moléculas se han ideado posibles especies que podrían formarse en la misma región, de las cuales algunas han sido observadas en otras regiones diferentes a DR21 C, E, W u (OH), aportando la idea sobre las condiciones en las que podrían encontrarse en DR21 y con ello dándole factibilidad de que existan [4].

Tabla 1: Características de las regiones de DR21

Región	Propiedades				
	Radio (pc)	T (K)	Densidad de H ₂ (10 ⁴ cm ⁻³)	Masa (x Masa solar)	V (km/s)
DR21 E	0.04/0.2 /0.3	62	92	243	-10.8
DR21 C	0.12/0.2 /0.6	36	110	1379	11.8
DR21 W	0.04/0.1 /0.3	54	12	489	-16.0
DR21 (OH)	0.04/0.2 /0.7	31	161	1421	2.8
DR21 FIR1	0.04/0.2 /0.5	41	16	700	6.5

Basándose en estos compuestos, se obtuvo una red química de posibles reacciones de formación de estas especies, la cual se observa en la Imagen 1, así como las posibles moléculas aún no detectadas que podrían encontrarse en el medio.



Analizando factores como la energía de formación necesaria y la aportada por el medio, las

velocidades, temperaturas y densidades de moléculas de interés, se establecen las posibles moléculas reportadas en la Tabla 3, donde se presentan también las características de la región, su posible ubicación y la longitud de onda a la que se espera su detección.

Tabla 2: moléculas confirmadas en DR21 y sus densidades. Las densidades no reportadas, no han sido obtenidas debido a dificultades como la distancia, el polvo en el ISM y la intensidad de las transiciones observadas.

Molécula	Densidades		
	(cm ⁻³)	Columnar (cm ⁻²)	ρ_x/ρ_{H_2}
H ₂	10 ³	3.9x10 ²³	1
H ₂ O	10 ⁸	10 ¹²	10 ⁻⁹
HCN			10 ⁻⁹
HCO ⁺		1.5x10 ¹⁴	10 ⁻⁹
H ¹³ CO ⁺		8x10 ¹²	
H ₂ CO			10 ⁻⁷
H ₂ CS		3x10 ¹⁵	10 ⁻⁹
H ₂ S			10 ⁻⁷
CH ₃ OH	10 ⁷	10 ¹⁵	
OCS			10 ⁻⁷
¹³ CO		10 ¹⁵	10 ⁻⁶
CO ₂			10 ⁻⁹
C ¹⁸ O			10 ⁻⁷
CS	10 ⁴		
CH ₃			10 ⁻⁸
NH ₃	10 ⁴		
C ₃	10 ⁶		
CCH			10 ⁻¹⁰
C ₃ H ₂			10 ⁻¹⁰

Las reacciones la superficie de granos de polvo, son de gran importancia, puesto que explican por qué existen ciertas moléculas en ambientes donde su presencia no se encuentra favorecida, al funcionar como superficies catalizadoras.

Conociendo las temperaturas de las zonas (provocadas por la radiación y el movimiento del gas) se puede inferir, debido a una mayor probabilidad de contacto entre especies reaccionantes, la presencia de estas moléculas

debido a reacciones en fase gaseosa, o en superficie de granos de polvo, si las temperaturas del ambiente son las apropiadas para la formación de la especie, o en cambio, son insuficientes. En la Tabla 4 se muestran estas posibilidades para las moléculas detectadas y propuestas.

Tabla 3. Moléculas propuestas, detección y comparativa de zonas de formación con zonas de DR21

Molécula propuesta	Propiedades			
	λ (μm)	ν (G Hz)	Propiedades de la zona de detección	Zona semejante en DR21
SiH ₄	11.29	27759.35	Cercanía a fuentes IR, zona rica en carbono, T > 1250 K	Inmediaciones del jet molecular en DR21 C
O ₂	615.70	487.24	Poca presencia de agua, altas velocidades de gas	DR21 W y DR21 FIR1
NO	1991.5	150.64	Zonas de bajas temperaturas con polvo	Fronteras de cada zona de DR21
NH	0.3358	893388.92	Posible en todo el ISM	Toda la zona
HCS	860.75	748.53	Cercanía a zonas de alta velocidad y presencia de H ₂ CO	Cercanía a jets moleculares en DR21 C y DR21 (OH)
CH ₄	3.40	88235.29	Alta presencia de CH ₃ OH, y altas velocidades	Cercanía con máseres en DR21 C y DR21 (OH)
CH ⁺	714.28	420.00	Zonas de alta extinción	DR21 C y DR21 (OH)

Si la temperatura de formación es inferior a la temperatura del medio, se favorece una reacción en fase gaseosa debido a que existe el medio de contacto entre reactantes y la energía suficiente para el rompimiento y formación de enlaces, por otro lado, al ser mayor la temperatura de formación que la del medio, es necesaria la intervención de polvo para catalizar la reacción, puesto que no existe la suficiente energía para el rompimiento y formación de enlaces. En algunos casos, la reacción no se lleva a cabo en los granos a pesar de lo ya comentado, debido a que tienen una temperatura de evaporación inferior a la del medio, lo que impide que permanezcan en el grano de polvo, favoreciendo así, las reacciones en fase gaseosa [5].

En la Imagen 2 se muestra la distribución final de moléculas en DR21, en un mapa creado a partir de la transición rotacional del C (I), 2-1.

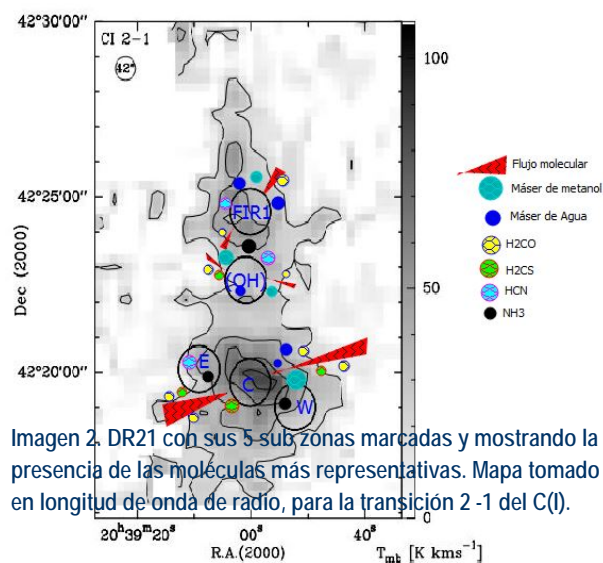


Imagen 2. DR21 con sus 5 sub-zonas marcadas y mostrando la presencia de las moléculas más representativas. Mapa tomado en longitud de onda de radio, para la transición 2-1 del C(I).

Respecto a DM Tau se han identificado una gran cantidad de moléculas [6], mostradas en la Tabla 5 con sus respectivas abundancias respecto a la masa gaseosa total en el disco. Se ha identificado que en la zona cercana a 4 AU existe una gran abundancia de deuterio, del orden de 10^{-5} , lo que propicia una gran cantidad de

reacciones de sustitución de hidrógeno por deuterio, sirviendo de marcadores de la zona [7].

Gracias a las transiciones rotacionales de algunas moléculas, estas han sido cuantificadas y posicionadas en un rango de radios en el disco, los cuales se muestran en la Tabla 6.

Tabla 4. Relación de Temperatura de formación en el ISM (T_f), Temperatura de evaporación en el ISM (T_v), temperatura de la zona de procedencia o posible procedencia (T_z) y estimación de reacción en fase gaseosa o en superficie de granos de polvo.

Molécula	Propiedades			
	T_f (K)	T_v (K)	T_z (K)	R (P o G)
SiH ₄	1400	-----	>1250	P
O ₂	200	16-18	~600	G
NO	250	40	~31	P
NH	2800	-----	29-43	P
HCS	800	-----	~600	G
CH ₄	300	27	~31	P
CH ⁺	1000	-----	~90	P
H ₂ O	298	90	~43	P
HCN	500	-----	~43	P
HCO ⁺	298	-----	~600	G
H ¹³ CO ⁺	298	-----	~600	G
H ₂ CO	298	40-45	~600	G
H ₂ CS	650	-----	~600	G
H ₂ S	300	77	~600	G
CH ₃ OH	300	90-100	~31	P
OCS	350	78	~27	P
¹³ CO	500	20-30	29-43	P y G
CO	500	20-30	29-43	P y G
CO ₂	1000	90	~200	P
C ¹⁸ O	500	20-30	29-43	P y G
CS	298	-----	~27	P
CH ₃	300	-----	~50	P
NH ₃	298	100	~26	P
N ₂ H ⁺	500	-----	~31	P
C ₃	2380	-----	~125	P
CCH	2600	-----	~125	P
C ₃ H ₂	2600	-----	~125	P

Se conoce que el disco tiene un gradiente de temperatura de forma perpendicular al plano del mismo, lo cual tiene como consecuencia una distribución no homogénea de moléculas, donde en la parte más caliente (>20 K,) se encuentran moléculas de mayor complejidad, pero en menor abundancia, mientras que en la parte más fría (16 K) e interna, se observan moléculas de baja complejidad y en mayor abundancia como se muestra en la Imagen 3 [8].

Tabla 5. Especies encontradas en DM Tau, las marcadas con * representan a las especies congeladas, generalmente encontradas en superficies de granos de polvo

Especies encontradas en DM Tau			
Especie	Abundancia	Especie	Abundancia
H ₂	1.23x10 ⁻¹	CH ₄ *	3.64x10 ⁻⁶
He	9.75x10 ⁻²	N ₂ *	1.76x10 ⁻⁶
H	5.25x10 ⁻⁴	H*	6.03x10 ⁻⁷
H ₂ O*	5.53x10 ⁻⁵	C ₃ H ₂ *	4.48x10 ⁻⁷
CO*	4.05x10 ⁻⁶	OH	3.43x10 ⁻⁷
CO	3.26x10 ⁻⁵	H ₂ O	2.79x10 ⁻⁷
O ₂	1.79x10 ⁻⁵	HNO*	2.40x10 ⁻⁷
HD	1.52x10 ⁻⁵	NO	2.22x10 ⁻⁷
N ₂	7.39x10 ⁻⁶	N	1.36x10 ⁻⁷
NH ₃ *	5.64x10 ⁻⁶	HDO*	1.35x10 ⁻⁷
O	5.59x10 ⁻⁶	CO ₂	1.32x10 ⁻⁷
O ₂ *	4.12x10 ⁻⁶	CO ₂ *	1.19x10 ⁻⁷
HCO ⁺	6.13x10 ⁻⁹	DCO ⁺	1.25x10 ⁻¹¹

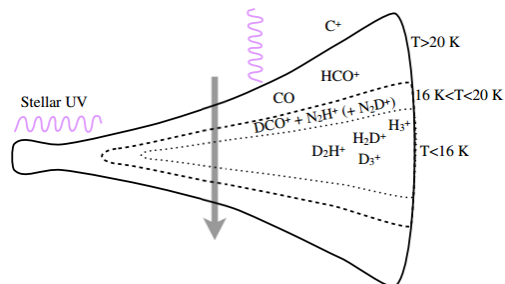


Imagen 3: Corte transversal del disco circumestelar mostrando su variación de temperatura y las especies presentes en ciertas zonas.

En la Imagen 4, se muestra una vista del disco circunestelar, por las transiciones rotacionales del HCO⁺ y el DCO⁺.

Tabla 6. Especies encontradas en DM Tau, con densidad calculada de las especies en cierto estado excitado y su posición (en rango de radio del disco).

Especies encontradas en DM Tau				
Especie	Transición rotacional	Radio interior (AU)	Radio exterior (AU)	Densidad (cm ⁻³)
¹² CO	2 – 1	660	780	3x10 ³
¹³ CO	2 – 1	250	500	3x10 ³
C ¹⁸ O	2 – 1	50	180	3x10 ³
HCN	1 – 0	65	220	2x10 ⁵
	3 – 2	---	<260	4x10 ⁶
HNC	1 – 0	55	200	2x10 ⁵
CN	1 – 0	70	230	3x10 ⁵
	2 – 1	140	360	10 ⁶
CS	3 – 2	65	210	3x10 ⁵
	5 – 4	45	160	10 ⁶
C ³⁴ S	5 – 4	23	120	---
H ₂ CO	2 ₁₂ – 1 ₁₁	50	180	10 ⁵
	2 ₀₂ – 1 ₀₁	23	105	2x10 ⁵
	3 ₁₂ – 2 ₁₂	40	160	5x10 ⁵
HCO ⁺	1 – 0	200	450	6x10 ⁴
	3 – 2	150	370	1x10 ⁶
H ¹³ CO ⁺	1 – 0	---	<120	6x10 ⁴
C ₂ H	1 – 0	80	240	2x10 ⁵
N ₂ H ⁺	1 – 0	---	<220	7x10 ⁴

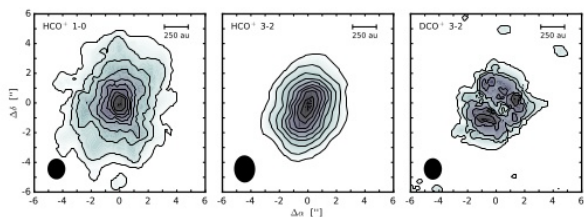


Imagen 4. Disco circunestelar de DM Tau, observado en la longitud de onda de radio, por las transiciones vibracionales del HCO⁺ y el DCO⁺

CONCLUSIONES

Se han identificado una gran cantidad de moléculas para DR21 y DM Tau, gracias a sus transiciones rotacionales, que se encuentran principalmente por las condiciones del ISM. Se han propuesto 7 moléculas más de alta posibilidad de ser detectadas en DR21, usando las posibles reacciones que se pueden llevar a cabo en las condiciones de la zona y que aún su observación se encuentra pendiente y se han mapeado con buena especificidad las moléculas presentes en el disco circunestelar en un rango de radios respecto su estrella.

REFERENCIAS

- [1] Richardson K. J., White G. J., Phillips J. P., Avery L. W. (1986). The structure and kinematics of the DR21 region. MNRAS. 219 (), 167-190.
- [2] Dartois E., Dutrey A. Guilloreau S. (2002). Structure of the DM tau Outer Disk. Astronomy and Astrophysics. 399 (), 773-787.
- [3] Jingwen W., Neal J. E. (2003). Indications of inflow motions in regions forming massive stars. The Astrophysical Journal. 592, 79-82.
- [4] T. L. Wilson, J. Martin-Pintado. Gardner F. F., Henkel C. (1982). Formaldehyde emission from DR21 (OH). Astronomy and Astrophysics. 107, 10-14.
- [5] Van Dishoeck E. F. (2004). ISO spectroscopy of gas and dust: From molecular clouds to protoplanetary disks. Astronomy and Astrophysics, 42, 19-67.
- [6] Dutrey A., Guiloteau S., Guélin M. (1996). Chemistry of Protosolar-like nebulae. Astronomy and Astrophysics. 317, 55-58.
- [7] Guilloteau S., Piétu V., Dutrey A., Guélin M. (2006). Deuterated molecules in DM Tauri: DCO⁺, but no HDO. Astronomy and Astrophysics. 448, L5-L8
- [8] Oberg. K. I., Chunhua Q., Wilner D. J. Andrews S. M. (2011). The ionization fraction in the DM Tau Protoplanetary disk. The astrophysical journal. 743, 8pp.