La química y las moléculas interestelares

En 1968 se detectó en el espacio una molécula poliatómica: el amoníaco (NH_3). Desde entonces, muchas otras moléculas poliatómicas se han identificado. De acuerdo con cálculos teóricos se había predicho que estas moléculas (que presentan tres o más átomos unidos entre sí) no podrían sobrevivir en el medio interestelar. Sin embargo, existe en ese medio una gran abundancia y variedad de moléculas. La más abundante y simple es la del hidrógeno (H_2), y las más complejas se localizan únicamente en las regiones más densas, aunque moléculas polares como el monóxido de carbono (CO) y la especie hidroxilo (OH) están distribuidas ampliamente.

Antes de abordar nuestro tema, definamos el área de estudio de la química interestelar: es la parte de la química que investiga los procesos fisicoquímicos que se presentan en la síntesis, distribución y destrucción de los compuestos orgánicos encontrados en el espacio interestelar.

Las condiciones físicas del espacio interestelar son bastante especiales y diferentes de las que se encuentran en la Tierra. Sus principales características son: 1) baja temperatura, entre 10 y 100 K; 2) baja densidad, pues se piensa que el gas interestelar tiene una densidad promedio de unas cuantas partículas por centímetro cúbico; y 3) es un medio nada homogéneo.

Las moléculas mencionadas se observan en regiones conocidas como nubes interestelares, las cuales se dividen en dos tipos: las nubes difusas y las nubes densas (cuadro 1). Además, se encuentran en partículas sólidas llamadas polvo o granos.

Se han utilizado tres enfoques diferentes para el estudio de las moléculas interestelares: el análisis observacional, los modelos teóricos y las simulaciones experimentales.

La pregunta básica que nos planteamos es: dado que se forman moléculas en el espacio interestelar, ¿cuáles son las reacciones químicas que forman y destruyen esas moléculas?

El mecanismo probable para la formación de moléculas incluye diversos procesos que se llevan a cabo en: 1) la fase gaseosa; 2) la superficie de los granos de polvo y; 3) los fenómenos fotoquímicos que ocurren en esos granos.

Generalmente se acepta que las moléculas interestelares se forman a partir de componentes simples, mediante un proceso de síntesis, en lugar de suponer que proceden de la degradación de sistemas más complicados. Tanto las reacciones en superficie como en fase gaseosa son importantes en la química interestelar. Si suponemos que las reacciones químicas en un gas serán favorables según su abundancia cósmica, predominaría entonces el hidrógeno. Los otros elementos químicos importantes, tales como el carbono, nitrógeno y oxígeno, estarán presentes aproximadamente en 0.1% con relación al hidrógeno.

Alicia Negrón Mendoza, Sergio Ramos Bernal y Fernando G. Mosqueira Pérez Salazar

El medio interestelar podría ser visto como un laboratorio inmenso, en donde las reacciones se llevan a cabo en una variedad de condiciones. En general, aquí las escalas de tiempo son enormes en comparación con las usadas en el laboratorio. Tales sujeciones han conducido a proponer un modelo de síntesis en las nubes densas, en donde las reacciones se inician por colisiones de los rayos cósmicos con el hidrógeno y el helio. Estos choques producen especies reactivas y cargadas positivamente que inician reacciones en cadena, produciendo las moléculas observadas.

Reacciones en fase gaseosa

Con base en consideraciones termodinámicas y cinéticas, existen algunas sujeciones para reacciones en fase gaseosa: a) se excluyen las reacciones endotérmicas debido a las bajas temperaturas del espacio interestelar, o sea, sería muy difícil concebir reacciones químicas que requieran un aporte de energía para que se lleven a cabo; b) están restringidas a colisiones bimoleculares, esto es, que el número de moléculas participantes sea dos; y c) no se llevan a cabo las reacciones que tiene una barrera de activación alta, es decir, la energía que deben tener las moléculas para que puedan pasar de reactivos a productos (mientras más grande sea, más difícil será que ocurra). El curso de una reacción, esto es, cómo va ocurriendo la reacción química, lo que los químicos llaman el eje de coordenada de reacción, va acompañada por un máximo de energía, que es la energía de activación (figura 1). Hay varios tipos de reacciones químicas que pueden llevarse a cabo en fase gaseosa en el espacio interestelar. Una de las más importantes es la reacción del tipo ion-molécula, que a continuación se describe.

Reacciones ion-molécula

Las colisiones ion-molécula son muy efectivas para formar moléculas nuevas. Para iniciar una reacción se necesita de la molécula y del ion. Cuando chocan un ion y una molécula neutra, la probabilidad de reacción es muy alta. Entre ellas se establece una interacción aun a distancias relativamente grandes por efecto de la polarización inducida por el ion sobre la molécula. En casi todas las condiciones astronómicas, la molécula de H_2 interviene en el primer paso de la reacción. Una vez que dicha molécula está disponible, entonces la efectividad de la interacción ion-molécula dependerá de la velocidad a la cual los iones puedan producirse. La ionización puede originarse de varias maneras, ya sea a partir de radiación ultravioleta o cósmica, dependiendo del tipo de nube donde se produzcan. Por ejemplo, los rayos cósmicos —constituidos principalmente de protones energéticos— que chocan con átomos o moléculas desprenden un electrón. Mediante reacciones ion-molécula se ha podido explicar la formación de muchas moléculas interestelares. Este tipo de reacciones sa-

Característica	Nube difusa	Nube densa
Cantidad de polvo	poco	abundante
Especie dominante	átomos individuales de hidrógeno y baja concentración de moléculas	hidrógeno molecular gaseoso
Temperatura	10-100 K	10-50 K
Fuente de energía	fotodisociación	flujos de alta energía de rayos cósmicos

Cuadro 1. Algunas características de las nubes difusas y densas.

tisface las condiciones para que se lleven a cabo en el espacio. Por ejemplo la interacción de los rayos cósmicos con hidrógeno molecular produce iones positivos: H_2 + rayos cósmicos → $H_2^+ + e^-$.

En el caso de nubes difusas, la radiación ultravioleta con longitud de onda alrededor de 100 nm puede ionizar algunos átomos, por ejemplo: C + radiación → $C^+ + e^-$.

Una vez formados los iones C^+ y H_2^+, éstos pueden reaccionar con otras moléculas neutras, las cuales pueden ser más complejas. Este tipo de reacciones las podemos ilustrar como sigue, en donde A^+ y BC son átomos o moléculas sencillas que forman C y AB^+: $A^+ + BC \rightarrow AB^+ + C$. Éste sería el tipo de reacciones donde participa el hidrógeno: $H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$.

Las especies neutras tienen una mayor afinidad por los protones, por lo que serán protonadas mediante una reacción rápida: $H_3^+ + A \rightarrow HA^+ + H_2$.

Esta reacción ocurre hasta que la especie A tenga el máximo número de protones posible de acuerdo con el átomo en cuestión. Otro ejemplo muy importante que ocurre en las nubes densas es la ionización del helio de acuerdo con la siguiente reacción: He + rayos cósmicos → He^+.

El He^+ puede destruir las especies naturales más estables, vía la transferencia de carga. Un ejemplo típico es: $He^+ + CO \rightarrow C^+ + O + He$.

Esta reacción es importante como una fuente de C^+ en las nubes densas, porque el C^+ no se fotoioniza en estas regiones. Para ilustrar la formación y destrucción de una molécula compleja, tomemos el caso del agua. La secuencia de reacciones ion-molécula son las siguientes:

$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$

$H_3^+ + O \rightarrow OH^+ + H_2$

$OH^+ + H_2 \rightarrow OH_2^+ + H$

$OH_2^+ + H_2 \rightarrow OH_3^+ + H$

$2OH_3^+ + e^- \rightarrow H_2O + H + OH + H_2$

H_2O + iones → productos

Por este tipo de reacciones se puede explicar la formación de moléculas más complejas. Así, en el espacio interestelar y circunestelares se han detectado 160 moléculas.

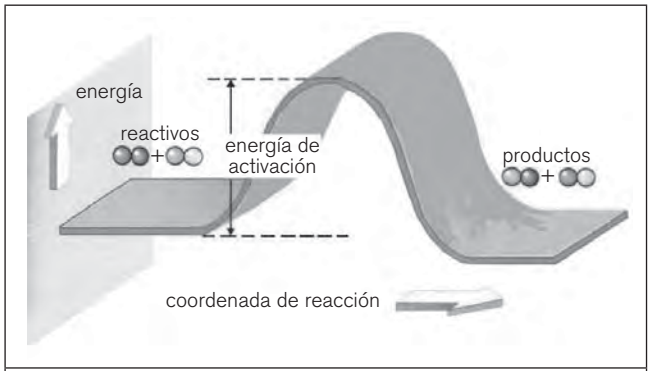

Figura 1. Transformación de reactivos a productos. Para que la reacción ocurra, las moléculas deben superar la energía de activación, por ello esta barrera debe ser muy baja en reacciones en las nubes interestelares.

Catálisis en los granos

Otra vía en la formación de moléculas poliatómicas es el mecanismo de catálisis heterogénea sobre la superficie del polvo interestelar. Las etapas de formación de moléculas interestelares en los granos son las siguientes: a) la adsorción de los átomos de la fase gaseosa sobre la superficie del grano; b) formación de enlaces químicos si las dos especies adsorbidas entran en contacto; y c) la molécula formada se desprende del grano. En la superficie de los granos, dos átomos A y B estarán sujetos suficiente tiempo para que ocurra una reacción. Parte de la energía liberada al formarse el producto lo absorberá el grano. A esta clase de catálisis se debe la formación del hidrógeno molecular. Una vez formada esta molécula, participará en una gran variedad de reacciones en la fase gaseosa. Sin embargo, existen algunos problemas para explicar la formación de

moléculas más pesadas, ya que éstas se adsorben intensamente y no saldrían fácilmente.

Algunos problemas

El enfoque teórico para estudiar la química interestelar tiene que resolver los siguientes problemas: a) se requieren más datos acerca de las constantes de reacción de las reacciones ion-molécula y faltan muchos datos experimentales para tener los valores de varias reacciones; b) los modelos teóricos sólo consideran los elementos químicos más abundantes; c) se necesita conocer las constantes de decaimiento de radiación de moléculas excitadas para realizar cálculos; y d) se requiere hacer mejores modelos para los procesos que ocurren en la superficie de los granos.

En cuanto a las dificultades del enfoque experimental podemos enumerar las siguientes: a) se requiere espectroscopía de laboratorio en la fase gaseosa para expandir la capacidad de identificación de moléculas en el espacio interestelar; b) más estudios de simulación en el laboratorio con los granos; c) determinar las constantes de reacción para las reacciones ion-molécula en la fase gaseosa; y d) son escasos los estudios de recombinación, fraccionamiento isotópico y de asociación radioactiva. Puesto que las reacciones en la superficie del grano se deben a las interacciones gas-grano y al almacenamiento de radicales libres en los mismos granos, se requiere un conocimiento más profundo de estos procesos.

Comentarios finales

Tanto las reacciones en la fase gaseosa como las catalizadas en superficie son muy importantes en la síntesis de moléculas poliatómicas en las nubes interestelares. Es por tanto importante reconocer que se lleva a cabo una intensa química en todo el cosmos. La materia orgánica formada constituye un récord molecular e isotópico de los materiales y procesos involucrados en su formación. Por otra parte, las escalas de tiempo son largas en comparación con las de laboratorio.

De una manera similar a como la evolución biológica implica que todos los organismos en la Tierra tienen un ancestro común, así la evolución química implica que toda la materia en nuestro sistema solar tuvo un origen común, pero se ha transformado. Las moléculas interestelares son la prueba de que las reacciones con compuestos orgánicos se están llevando a cabo en el Universo. Esta evolución cosmoquímica implica que en toda la materia se está realizando una transformación común, en donde la formación de estas moléculas participan las reacciones en la fase gaseosa y las catalizadas en los granos.

Alicia Negrón Mendoza
Sergio Ramos Bernal
Instituto de Ciencias Nucleares,

Fernando Guillermo Mosqueira Pérez Salazar
Dirección General de Divulgación de la Ciencia,
Universidad Nacional Autónoma de México.

Agradecimientos.
Los autores reconocen el apoyo de PAPIIT para el proyecto IN110712-3 y de CONACYT con el proyecto 168579/11.

Referencias bibliográficas

Duley, W. W. y D. A. Williams. 1985. *Interstellar Chemistry.* Academic Press, Nueva York.

Green, Sheldon. 1981. "Interstellar Chemistry: Exotic Molecules in Space", en *Annual Review of Physical Chemestry,* vol. 32, pp. 103-138.

Hartquist, T. W. y D. A. Williams. 1959. *The Chemically Controlled Cosmos.* Cambridge University Press, Nueva York.

Watson, W. D. 1976. "Interstellar Molecule Reactions", en *Reviews of Modern Physics*, vol. 48, pp. 513-552.

En la red
www.cv.nrao.edu

Imágenes
Paul Debois: p. 26: pinhole impressions 2 Lime tree or Tilia Tomentosa; p. 27: Fraxinus Americana Rosehill; pinhole impressions 3 Lime tree or Tilia Tomentosa; Acer Henryi; pinhole impressions 7; 2015. P. 28: Patrick Bresnahan, field of dreams, 2013.