



I.R.A.M.
Instituto de Radioastronomía Milimétrica

ESTUDIO DE LA QUÍMICA EN NUBES OSCURAS

Núria Marcelino Lluch

Departamento de Física Teórica y del Cosmos
Facultad de Ciencias
Universidad de Granada



I.R.A.M.
Instituto de Radioastronomía Milimétrica

ESTUDIO DE LA QUÍMICA EN NUBES OSCURAS

Núria Marcelino Lluch

Directores:

Dr. Rainer Mauersberger

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Memoria para acceder al grado de Doctor
Departamento de Física Teórica y del Cosmos
Facultad de Ciencias
Universidad de Granada
Granada, 2007

A mi padre

Agradecimientos

Muchas son las personas que he encontrado y me han ayudado durante la realización esta tesis. Sin su contribución, científica o personal, no hubiera sido posible este trabajo. Aunque es imposible aquí nombraros a todos, sabéis que os tengo en mi mente. A todos, gracias. Sin embargo sí quiero especificar a continuación, individual o conjuntamente, algunos agradecimientos especiales.

En primer lugar quiero agradecer a mis directores de tesis su confianza y dedicación durante este tiempo. A Rainer Mauersberger por haberme dado la oportunidad de realizar este trabajo en el Instituto de Radioastronomía Milimétrica (IRAM) y de trabajar en el 30-m. Ha sido una experiencia muy enriquecedora en muchos aspectos. A José Cernicharo por haberme acogido en el Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR), tanto durante breves estancias como en los últimos y próximos meses. Gracias por la motivación que siempre me has transmitido.

Quiero recordar aquí muy especialmente a todo el personal de IRAM, a los que están y a los que estuvieron, tanto en las oficinas de Granada como en el observatorio de Pico Veleta. A todos los que desde sus diferentes grupos de trabajo (administración, antena, astronomía, backends, cocina, informática y receptores), me han ayudado y transmitido parte de sus conocimientos sobre el 30-m, astronomía, informática (esa gran desconocida!), recetas de cocina,... Gracias por vuestra amistad, por los cafés y por haberme hecho sentir como en casa. Al grupo de informática quiero agradecerles su valiosa ayuda con mis (no pocos) problemas con los ordenadores. Al grupo de operadores, por esas largas horas pasadas en la sala de control y los problemas solucionados juntos. Quiero agradecer también al estupendo equipo de cocina el cuidarme siempre tan bien y las sobremesas compartidas.

Con mi vuelta a Madrid e incorporación en el DAMIR, he podido compartir más tiempo y conocer mejor a todos los que forman parte de sus diferentes grupos, a aquellos que ya conocía y aprecio, y a las nuevas (o no tan nuevas) incorporaciones. Gracias a todos por vuestra amistad y por hacer agradable el día a día en el trabajo, especialmente en estos últimos meses de mi tesis. Aunque ya echo de menos a los que se acaban de mudar, y a los que lo harán próximamente, sé que nos iremos cruzando y visitando!

No quiero dejar de mencionar aquí a otras personas que he ido encontrando en este camino, que me han ayudado y enseñado sobre radioastronomía y el mundo de la moléculas. A Jesús Martín-Pintado, por ayudarme y enseñarme en mis comienzos y seguir haciéndolo. A Clemens Thum, por su simpatía y compartir sus conocimientos sobre el 30-m. A Evelyne Roueff y Maryvonne Gerin, agradezco su colaboración en este trabajo y sus valiosas aportaciones sobre química. A la gente

del Max Planck Institute für Radioastronomie en Bonn por acogerme en mis breves visitas, en particular a Christian Henkel y Alex Kraus por haberme ayudado durante mis observaciones en el radiotelescopio de Effelsberg. Y también a muchos otros que, gracias a su paso por el 30-m, he podido conocer y con los que he compartido charlas sobre astrofísica y otras cosas mundanas.

Agradecer también al Departamento de Física Teórica y del Cosmos, de la Facultad de Ciencias de Granada, y especialmente a Ute Lisenfeld por haberme facilitado los trámites necesarios para presentar este trabajo.

Por último y más importante, quiero agradecer a mi familia su apoyo, su cariño y comprensión. En especial a Bego y Jose, a la padri, y sobre todo a mi madre, por haberme dado confianza, animarme y apoyarme en todo momento. Os quiero. A mis amigos, por escucharme, entenderme y por estar ahí, aún estando lejos. Gracias.

NÚRIA MARCELINO LLUCH
Madrid, Octubre de 2007

Prefacio

Las nubes moleculares frías y oscuras son un importante laboratorio para la astroquímica, puesto que (aún) no contienen estrellas en su interior, y sus propiedades físicas son menos complejas que en las nubes moleculares gigantes o en los núcleos calientes asociados a formación estelar masiva. Además las nubes oscuras presentan una gran riqueza molecular, que incluye largas cadenas de carbono y otras moléculas pesadas. Por tanto, comprender la química de estos objetos físicamente más simples nos ayudará a comprender la formación de las moléculas en el medio interestelar denso.

Estas condensaciones son también objeto de gran interés por ser los futuros lugares de formación de estrellas poco masivas y sistemas planetarios como el nuestro. Recientes observaciones de cometas en ondas radio y en el infrarrojo han recogido importantes evidencias de que estos cuerpos, fósiles de la nebulosa proto-solar, mantienen composiciones moleculares similares a las encontradas en nubes oscuras. Por tanto, la evolución química de estas regiones es importante para comprender los procesos iniciales de la materia interestelar en su evolución hacia la formación de planetas y, en última estancia, de la vida.

Aunque se han realizado numerosos estudios de estas fuentes en algunas moléculas específicas, sólo los barridos espectrales permiten obtener una visión completa de su complejidad química, sus propiedades físicas y cinemáticas, y caracterizar el estado evolutivo de la nube a partir de las moléculas detectadas. Además, pueden revelar la presencia de otras especies moleculares inesperadas y así, proporcionar información complementaria para el estudio de los núcleos pre-estelares. Es importante poder establecer una relación entre las características químicas, las propiedades físicas y el estado evolutivo del objeto, lo que nos ayudará a comprender su evolución química. La comparación entre fuentes en diferentes estados de evolución nos permitirá estudiar los procesos químicos que ocurren durante la fase de colapso. Hasta la fecha se han realizado sólo dos barridos espectrales de estas fuentes, ambos en la nube oscura TMC-1, que es también una nube que se toma como prototipo para ajustar los modelos químicos. Sin embargo esta fuente parece ser muy peculiar, por lo que no nos estaría ofreciendo una visión general de la química de estas regiones. En este trabajo se presentan los resultados del primer barrido espectral realizado a $\lambda = 3$ mm en cuatro nubes oscuras, las cuales se encuentran en diferentes estados de evolución hacia la formación de una o varias estrellas de baja masa.

En el Capítulo 1 se introducen las nubes oscuras y se describen sus principales características, enfatizando su importancia como futuros lugares de formación estelar. También aquí se describen las componentes del medio interestelar, esto es,

la componente molecular y el polvo interestelar, y se explican los principales procesos químicos que las involucran, prestando especial atención al caso de las nubes oscuras.

Los resultados generales del barrido espectral se presentan en los Capítulos 2 y 3. En el primero de ellos se describen las fuentes observadas, los métodos de observación y las especies moleculares detectadas. En el Capítulo 3 se obtienen parámetros físicos como la temperatura rotacional, la densidad de columna y la abundancia relativa al hidrógeno molecular, de cada una de las moléculas observadas.

El principal y más importante resultado de este trabajo es la detección de dos nuevas especies en dos de las nubes observadas, el tioformaldehído dos veces deuterado (D_2CS) y el propileno (CH_2CHCH_3). La primera de estas detecciones se describe en el Capítulo 4, donde además de presentar las líneas rotacionales observadas para las diferentes sustituciones isotópicas del tioformaldehído, se muestra el cálculo de nuevas frecuencias a partir de las observadas en el cielo. También en este estudio se observaron varias transiciones del formaldehído, para comparar el enriquecimiento en deuterio en ambas especies.

En el Capítulo 5 se presenta la sorprendente detección del propileno, una especie altamente compleja y saturada para una nube fría y oscura. Además de calcular su densidad de columna y abundancia, en este capítulo se estudian los posibles caminos hacia la formación de esta molécula, que nunca se ha considerado en los modelos de química existentes. Esta detección demuestra que estos modelos, en concreto los basados en la química en fase gaseosa, no explican de manera satisfactoria la gran riqueza molecular que existe en las nubes oscuras.

También se ha realizado un estudio sobre moléculas orgánicas complejas en nubes oscuras. Para ello observamos una de las nubes quiescentes y sin estrellas del barrido espectral, y otra nube en la que existe un objeto proto-estelar y un flujo bipolar extremadamente joven. El Capítulo 6 recoge las especies observadas y sus abundancias, en su mayor parte límites superiores, y se comparan con las observadas en regiones de formación estelar y en el centro galáctico, donde estas especies complejas son típicas. Este tipo de estudios es importante para poner a prueba los procesos químicos en fase gaseosa y de interacción gas-grano que pueden dar lugar a la formación de dichas especies moleculares.

El Capítulo 7 recoge las principales conclusiones de este trabajo y los nuevos proyectos que vamos a emprender derivados de este estudio. El amplio campo abierto por este barrido espectral demuestra la importancia de este tipo de estudios y el camino que aún queda por recoger para comprender estas pequeñas regiones del medio interestelar.

Por último, en los Apéndices se presentan brevemente los fundamentos físicos y procedimientos utilizados para obtener las propiedades físicas (densidades y temperaturas) obtenidas en este trabajo.

Índice general

Índice general	1
Índice de figuras	4
Índice tablas	7
Acrónimos	9
1. Introducción	11
1.1. Nubes Oscuras	11
1.1.1. Un poco de historia	11
1.1.2. Nubes oscuras y nubes moleculares gigantes	13
1.1.3. Formación estelar	15
1.2. Componente molecular del medio interestelar	18
1.2.1. Moléculas en nubes oscuras	18
1.2.2. Procesos químicos en fase gas	20
1.2.3. Modelos en fase gaseosa	24
1.3. Polvo interestelar	26
1.3.1. El papel del polvo	26
1.3.2. Procesos químicos en granos	27
1.3.3. Modelos gas-grano	28
2. Barrido espectral a 3 mm en nubes oscuras: Datos	31
2.1. Introducción	31
2.2. Las fuentes	35
2.2.1. Barnard 1	35
2.2.2. L1544	37
2.2.3. L183	39
2.2.4. TMC-1	41
2.3. Observaciones	43
2.4. Resultados	46
2.5. Moléculas individuales	62
2.5.1. Monosulfuro de carbono: CS	62
2.5.2. Monóxido de azufre: SO	62
2.5.3. Monóxido de silicio: SiO	64
2.5.4. Etinilo: C ₂ H	65

2.5.5.	Monosulfuro de dicarbono: C_2S	68
2.5.6.	Ácido cianhídrico: HCN	68
2.5.7.	Ácido isocianhídrico: HNC	72
2.5.8.	Formilo: HCO	72
2.5.9.	Catión formilo: HCO^+	76
2.5.10.	Propinilidino cíclico: $c-C_3H$	78
2.5.11.	Cianoetino: C_3N	78
2.5.12.	Monóxido tricarbónico: C_3O	80
2.5.13.	Ácido isociánico: $HNCO$	80
2.5.14.	Tioformaldehído deuterado: $HDCS$ y D_2CS	82
2.5.15.	Amoniaco deuterado: NH_2D	82
2.5.16.	Cianoacetileno: HC_3N y DC_3N	84
2.5.17.	Isocianoacetileno: $HCCNC$	86
2.5.18.	Ácido fórmico: $HCOOH$	86
2.5.19.	Cianuro de metilo: CH_3CN	86
2.5.20.	Metanol deuterado: CH_2DOH y CH_3OD	88
2.5.21.	Cianoacetileno protonado: HC_3NH^+	90
2.5.22.	Vinil cianido: CH_2CHCN	90
2.5.23.	Formato de metilo: $HCOOCH_3$	90
2.5.24.	Propileno: CH_2CHCH_3	92
2.5.25.	Líneas no identificadas	92
2.6.	Resumen y conclusiones	95
3.	Barrido espectral a 3 mm en nubes oscuras: Análisis	97
3.1.	Densidades de columna	97
3.2.	Abundancias	104
3.2.1.	Barnard 1	104
3.2.2.	L1544	106
3.2.3.	L183	106
3.2.4.	TMC-1 (CP)	106
3.3.	Discusión	109
3.3.1.	CS , SO y HCO^+	109
3.3.2.	Cadenas de carbono	111
3.3.3.	HCN y HNC	115
3.3.4.	Especies deuteradas	118
3.3.5.	$HCOOH$ y $HCOOCH_3$	122
3.4.	Resumen y conclusiones	126
4.	Primera detección de D_2CS en el espacio	127
4.1.	Introducción	127
4.2.	Observaciones	128
4.3.	Resultados	129
4.3.1.	Descripción	129
4.3.2.	Cálculo de frecuencias	134
4.3.3.	Densidades de columna	139
4.4.	La química del deuterio	142
4.5.	Resumen y conclusiones	146

5. Descubrimiento del Propileno Interestelar	147
5.1. Introducción	147
5.2. Observaciones	149
5.3. Resultados	151
5.3.1. Identificación de las líneas	151
5.3.2. Densidad de columna	152
5.4. Producción química del propileno	153
5.5. Resumen y conclusiones	155
6. Moléculas orgánicas complejas en nubes oscuras: L1448 y L183	157
6.1. Introducción	157
6.2. Fuentes	159
6.2.1. L183	159
6.2.2. L1448	159
6.3. Observaciones	159
6.4. Resultados	162
6.4.1. Descripción	162
6.4.2. Densidades de columna y abundancias	162
6.5. Discusión	166
6.6. Resumen y conclusiones	168
7. Conclusiones y perspectivas	171
7.1. Conclusiones	171
7.2. Perspectivas	174
A. Diagramas de población	177
A.1. Líneas con estructura hiperfina	179
A.2. Líneas con estructura hiperfina no resuelta	180
A.3. Líneas con estructura fina e hiperfina	180
A.3.1. C ₂ H & C ₃ N	180
A.3.2. HCO	181
B. Aproximación de Sobolev o LVG	183
Publicaciones	187
Bibliografía	189

Índice de figuras

1.1. Imagen óptica de varias nubes oscuras	12
1.2. Clasificación espectral de los objetos estelares jóvenes poco masivos .	16
1.3. Procesos químicos en la superficie de los granos de polvo	27
2.1. Mapa de la emisión del polvo en Barnard 1	37
2.2. Mapa de la intensidad integrada de C ¹⁸ O en L1544	38
2.3. Mapa de la extinción visual en la región de L183	40
2.4. Mapas de la emisión del polvo y de varias moléculas en la región central de L183	41
2.5. Mapa de la emisión integrada de NH ₃ a lo largo de la nube TMC-1 .	42
2.6. Espectro obtenido en el modo de conmutación en frecuencia antes de su reducción	45
2.7. Barrido espectral entre 85.9 y 93.1 GHz para todas las fuentes . . .	50
2.8. Espectro observado entre 85.9 y 87 GHz.	51
2.9. Espectro observado entre 87 y 88 GHz.	52
2.10. Espectro observado entre 88 y 89 GHz.	53
2.11. Espectro observado entre 89 y 90 GHz.	54
2.12. Espectro observado entre 90 y 91 GHz.	55
2.13. Espectro observado entre 91 y 92 GHz.	56
2.14. Espectro observado entre 92 y 93.1 GHz.	57
2.15. Perfiles de línea para la transición $J = 2 - 1$ del ¹³ CS	63
2.16. Perfiles de línea para SO ($2_2 - 1_1$).	63
2.17. Perfil de línea para SiO ($2 - 1$), $v = 0$	63
2.18. Perfiles de línea para las componentes hiperfinas de C ₂ H ($1 - 0$). . .	66
2.19. Intensidades relativas de las componentes hiperfinas de C ₂ H ($1 - 0$)	67
2.20. Perfiles de línea para las transiciones observadas de C ₂ S y CC ³⁴ S . .	69
2.21. Perfiles de línea para HCN, H ¹³ CN y HC ¹⁵ N ($1 - 0$)	71
2.22. Perfiles de línea para HNC, HN ¹³ C y H ¹⁵ NC ($1 - 0$)	73
2.23. Perfiles de línea de las componentes hiperfinas de HCO ($1_{01} - 0_{00}$) .	74
2.24. Intensidades relativas de las componentes hiperfinas del HCO ($1_{01} - 0_{00}$)	75
2.25. Perfiles de línea para HCO ⁺ , H ¹³ CO ⁺ y HC ¹⁷ O ⁺ ($1 - 0$)	77
2.26. Perfiles de línea para las componentes hiperfinas de c-C ₃ H ($2_{12} - 1_{11}$)	79
2.27. Perfiles de línea de las componentes hiperfinas de C ₃ N ($9 - 8$)	81
2.28. Perfiles de línea para el C ₃ O ($9 - 8$)	81
2.29. Perfiles de línea para el HNCO ($4_{04} - 3_{03}$).	81
2.30. Perfiles de línea de las especies deuteradas del tioformaldehído . . .	83

2.31. Perfiles de línea del multiplete NH_2D ($1_{11} - 1_{01}$)	83
2.32. Perfiles de línea de las transiciones $J = 10 - 9$ de HC_3N y sus sustituciones isotópicas ^{13}C , y de la transición $J = 11 - 10$ de DC_3N . . .	85
2.33. Perfiles de línea para HCCNC ($9 - 8$)	87
2.34. Perfiles de línea para las transiciones observadas de HCOOH	87
2.35. Perfiles de línea para CH_3CN ($5 - 4$)	89
2.36. Perfiles de línea para las especies una vez deuteradas del metanol . . .	89
2.37. Perfil de línea para HC_3NH^+ ($10 - 9$)	91
2.38. Perfiles de línea para CH_2CHCN ($9_{18} - 8_{17}$)	91
2.39. Perfiles de línea para ambas especies (A y E) de HCOOCH_3 ($8_{18} - 7_{17}$)	91
2.40. Perfiles de línea para las transiciones observadas del CH_2CHCH_3 . . .	93
2.41. Perfiles de línea de las transiciones no identificadas	94
3.1. Diagramas rotacionales para CCS	99
3.2. Diagramas rotacionales para HDCS	100
3.3. Diagramas rotacionales para HCOOH	100
3.4. Diagramas rotacionales para CH_3CN	101
3.5. Diagrama rotacional para CH_2CHCH_3	101
3.6. Abundancias relativas al H_2 para todas las fuentes	107
3.7. Abundancias de B1, L1544 y L183 respecto a las medidas en TMC-1.	108
3.8. Diagramas de evolución en el tiempo de las abundancias relativas de varias moléculas	110
3.9. Variación en el tiempo de las abundancias relativas de C_2 y HC_3N . . .	113
4.1. Transiciones observadas para el HDCS y el D_2CS en B1	132
4.2. Transiciones observadas para el H_2CS	133
4.3. Transiciones observadas del $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$ en la dirección de B1.	134
4.4. Transiciones correspondientes a las diferentes especies isotópicas del formaldehído	135
4.5. Diagramas de rotación para HDCS , D_2CS y H_2CS	140
5.1. Estructura molecular del propileno	148
5.2. Transiciones observadas del CH_2CHCH_3	150
5.3. Diagrama rotacional incluyendo ambas especies, A y E , del propileno.	153
6.1. Mapa de la emisión de CO $J = 2 - 1$ en la región de L1448	160
6.2. Perfiles de las líneas observadas en L1448 y L183	164

Índice de Tablas

1.1. Propiedades de las nubes moleculares (extraída de Turner 1988). . .	14
1.2. Reacciones genéricas en fase gaseosa	22
2.1. Barridos espectrales realizados hasta la fecha en diferentes regiones .	33
2.2. Fuentes observadas en el barrido espectral a 3 mm.	35
2.3. Transiciones identificadas dentro del rango espectral observado. . . .	48
2.4. Parámetros de las líneas observadas en las cuatro fuentes	58
2.5. Razones entre las intensidades de las componentes hiperfinas para la transición $J = 1 - 0$ de H^{12}CN y H^{13}CN	68
3.1. Temperaturas y densidades de columna obtenidas de los diagramas rotacionales	102
3.2. Resultados obtenidos para las transiciones con estructura hiperfina .	102
3.3. Densidades de columna obtenidas asumiendo $T_{\text{rot}} = 10$ K	103
3.4. Abundancias relativas al H_2 de las moléculas observadas	105
3.5. Abundancias relativas al H_2 y algunos cocientes de abundancias para CS , SO y HCO^+	111
3.6. Abundancias relativas al H_2 de las cadenas de carbono observadas y algunas razones de abundancias relacionadas.	115
3.7. Razones de abundancias HNC/HCN	116
3.8. Abundancias observadas de HCN y HNC relativas a H_2 y a NH_3 . .	118
3.9. Abundancias relativas XD/XH de las especies detectadas	119
3.10. Abundancias de HCOOH y HCOOCH_3 relativas al H_2 y a CH_3OH .	123
4.1. Parámetros de línea para las especies isotópicas del tioformaldehído .	130
4.2. Parámetros de línea para las especies isotópicas del formaldehído . .	131
4.3. Constantes rotacionales para H_2CS	138
4.4. Constantes rotacionales para D_2CS	138
4.5. Constantes rotacionales del HDCS	138
4.6. Constantes rotacionales del $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$	139
4.7. Abundancias relativas XD/XH observadas en diferentes fuentes. . . .	142
4.8. Reacciones para el enriquecimiento en deuterio introducidas en el modelo	144
4.9. Predicciones de enriquecimiento en deuterio para moléculas con azu- fre, considerando diferentes modelos de nube.	145
5.1. Densidades de columna para varios hidrocarburos en TMC-1.	149

5.2. Parámetros de línea para las transiciones observadas de CH ₂ CHCH ₃	151
6.1. Transiciones observadas en L183 y L1448.	161
6.2. Parámetros de línea obtenidos de ajustes gaussianos.	163
6.3. Columna de densidad de H ₂ , temperatura y abundancias de las diferentes COMs relativas al H ₂ y al CH ₃ OH.	165

Acrónimos

A&A	<i>Astronomy and Astrophysics</i>
A&AS	<i>Astronomy and Astrophysics Supplement Series</i>
AJ	<i>The Astronomical Journal</i>
ApJ	<i>The Astrophysical Journal</i>
ApJS	<i>The Astrophysical Journal Supplement Series</i>
Ap&SS	<i>Astrophysics and Space Science</i>
ARA&A	<i>Annual review of astronomy and astrophysics</i>
ASPC	<i>Astronomical Society of the Pacific Conference Series</i>
BAAS	<i>Bulletin of the American Astronomical Society</i>
CDMS	<i>Cologne Database for Molecular Spectroscopy</i>
ChPhL	<i>Chemical Physics Letters</i>
COMs	<i>Complex Organic Molecules</i>
ETL	<i>Equilibrio Termodinámico Local</i>
GMCs	<i>Gigant Molecular Clouds</i>
IAUS	<i>International Astronomical Union Symposium</i>
JChPh	<i>Journal of Chemical Physics</i>
JKAS	<i>Journal of the Korean Astronomical Society</i>
JMSp	<i>Journal of Molecular Spectroscopy</i>
JMSt	<i>Journal of Molecular Structure</i>
JPhChA	<i>Journal of Physics and Chemistry A</i>
JPCRD	<i>Journal of Physical and Chemical Reference Data</i>
JPL	<i>Jet Propulsion Laboratory</i>
JQSRT	<i>Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer</i>
LVG	<i>Large Velocity Gradient</i>
MI	<i>Medio Interestelar</i>
MNRAS	<i>Monthly Notices of the Royal Astronomical Society</i>
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
NRO	<i>National Radio Observatory</i>
PASA	<i>Publications of the Astronomical Society of Australia</i>
PASJ	<i>Publications of the Astronomical Society of Japan</i>
PASP	<i>Publications of the Astronomical Society of the Pacific</i>
PhRvL	<i>Physical Review Letters</i>
P&SS	<i>Planetary and Space Science</i>
RvMPh	<i>Reviews of Modern Physics</i>
SMCs	<i>Small Molecular Clouds</i>
S&SRv	<i>Space & Science Reviews</i>
YSOs	<i>Young Stellar Objects</i>

Capítulo 1

Introducción

1.1. Nubes Oscuras

1.1.1. Un poco de historia

Las nubes oscuras fueron observadas y catalogadas por primera vez por William y Caroline Herschel a finales del siglo XVIII, quienes las denominaron “agujeros en el cielo” pues consideraban que estas regiones vacías de estrellas visibles eran realmente agujeros en la distribución estelar galáctica. En el s. XIX Angelo Secchi estableció, con ayuda de un espectroscopio, la diferencia entre dos tipos de nebulosas, unas resultaron ser sistemas estelares y las otras nubes de gas. Secchi insistió en que los considerados “agujeros en el cielo” eran en realidad nubes gigantes de gases oscuros proyectadas sobre un fondo de estrellas lejanas, aunque la idea de Herschel prevaleció sobre ésta. A principios del siglo XX, las observaciones profundas del cielo realizadas por E. E. Barnard proporcionaron la primera evidencia de que esas áreas oscuras en el cielo eran, en realidad, nubes interestelares de materia oscurecida más que vacíos en la distribución de las estrellas. Las observaciones de estrellas enrojecidas en la periferia de dichas nubes indicaban que grandes cantidades de pequeños granos de polvo contenidos en las nubes las hacían opacas a las longitudes de onda visibles. Barnard, a partir de sus fotografías de cielo profundo, descubrió 349 nebulosas (luminosas y oscuras) y construyó un catálogo independiente de 182 nebulosas oscuras.

Los primeros intentos para determinar la cantidad de gas, y la estructura de estas nubes se hicieron utilizando técnicas de recuento de estrellas (ver, p.ej., Bok 1956; Cernicharo et al. 1985). Pero éstos sólo eran útiles y fiables en regiones de baja extinción visual ($A_V < 3 - 4$ mag.). El descubrimiento de la emisión del hidrógeno atómico a 21 cm supuso un gran paso en el estudio de las nubes interestelares. Observaciones realizadas por Lilley (1955) demostraron que el gas trazado por el HI y el polvo se encontraban bien mezclados en las nubes interestelares (al menos para extinciones pequeñas). Aunque al principio fue sorprendente, la incapacidad de detectar emisión de HI procedente de las nubes oscuras de alta extinción llevó a la conclusión de que éstas nebulosas eran muy frías y estaban compuestas probablemente de hidrógeno en forma molecular (Bok et al. 1955; Menon 1956). Desafortunadamente, el H₂ es generalmente inobservable en nubes oscuras. En primer

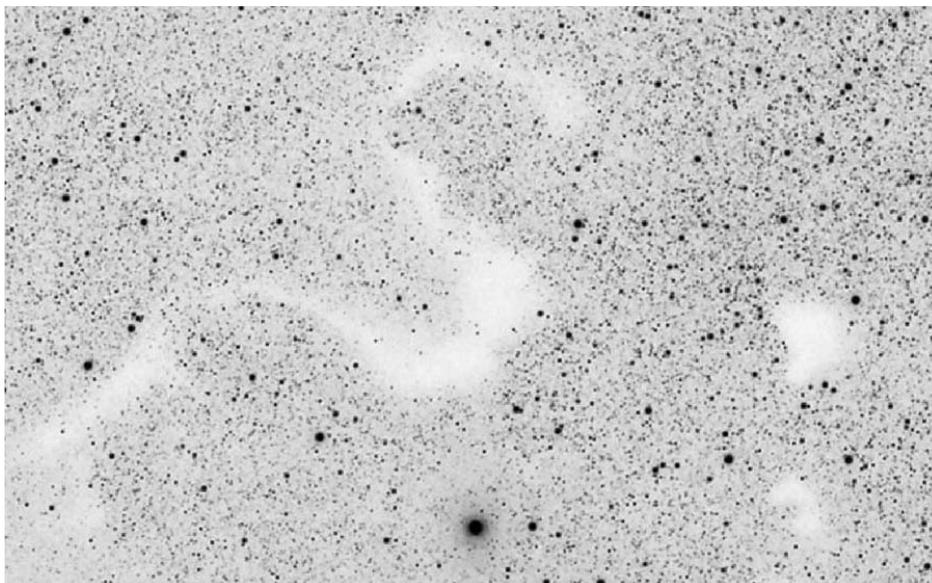


FIGURA 1.1: Imagen óptica donde se distinguen claramente las nubes oscuras Barnard 68 y Barnard 72 (a la derecha de la imagen), y la nebulosa de la serpiente (extraída de Redman et al. 2006)

lugar, porque al tratarse de una molécula homonuclear carece de momento dipolar permanente y sus transiciones rotacionales son extremadamente débiles. Por otro lado, al tratarse de la molécula más ligera, sus transiciones rotacionales a los niveles de energía más bajos se encuentran a longitudes de onda del infrarrojo (IR) medio, las cuales son inaccesibles a la observación desde la tierra y además muy energéticas para ser excitadas colisionalmente a las temperaturas características de las nubes moleculares oscuras (~ 10 K).

A principios de los años 70, el descubrimiento de la emisión molecular a longitudes de onda milimétricas supuso otro gran avance en el estudio de las nubes oscuras. Se observaron diferentes moléculas poliatómicas en los rangos centimétricos y milimétricos del espectro. Más adelante, con la espectroscopía milimétrica, se confirmó que estas nubes oscuras estaban formadas principalmente por moléculas y partículas de polvo, y que se trata de los objetos más fríos del universo. La emisión de moléculas trazadoras como CO, CS, y NH_3 , originada en el interior de las regiones más oscurecidas de las nubes, proporcionó las primeras pruebas de las condiciones físicas de estas nubes. De hecho, las propiedades físicas más básicas de las nubes oscuras (tamaño, masa, densidad, composición y temperatura), se han obtenido casi exclusivamente a partir de observaciones de estas moléculas, las cuales son típicamente unas 10^{4-9} veces menos abundantes que el hidrógeno molecular.

El descubrimiento de la existencia de fuentes infrarrojas embebidas dentro de las nubes oscuras (como estrellas T Tauri y fuentes IR de baja luminosidad), observadas desde tierra y también desde satélites, han establecido el significado astrofísico de estas nubes como los lugares de formación de estrellas poco masivas en la Galaxia (ver, p.ej., Strom et al. 1975; Wynn-Williams 1982; Beichman et al. 1984; Lada 1992;

Yun & Clemens 1990). Estas observaciones demostraron que la formación estelar tiene lugar en los núcleos densos de las nubes moleculares donde la densidad del gas es de $n(\text{H}_2) \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$, y donde se origina la emisión de moléculas como CS, NH_3 , HCN, etc. En estas condensaciones se pueden alcanzar valores de la extinción visual $A_V \geq 10 \text{ mag.}$, por lo que estas regiones son opacas en el visible y aparecen vacías de estrellas (ver Figura 1.1). Desde entonces, las nubes oscuras se han convertido en objetos de gran interés para el estudio de las primeras fases de la formación de estrellas y sistemas planetarios. Actualmente, el conocimiento que tenemos de la naturaleza y estructura de estas nubes –esencial para la teoría de la formación estelar– se obtiene de las observaciones milimétricas y submilimétricas del gas y el polvo, y también, con el desarrollo de nuevos detectores en los últimos años, de las observaciones en el IR.

1.1.2. Nubes oscuras y nubes moleculares gigantes

Las nubes moleculares densas se han clasificado de acuerdo a dos esquemas (ver Turner 1988). En el primero las nubes se designaron como Nubes Moleculares Gigantes (GMCs, del inglés *Giant Molecular Clouds*) o Nubes Moleculares Pequeñas (SMCs, del inglés *Small Molecular Clouds*), siendo la línea de demarcación entre ellas bastante arbitraria ($M \sim 10^3 M_\odot$), aunque esta masa parece delimitar las regiones de formación estelar masiva la cual ocurre sólo en nubes que exceden esta masa. En el segundo esquema de clasificación las nubes se designan del grupo A si la temperatura cinética dentro de ellas no excede 20 K, y del grupo B si contienen núcleos calientes de más de 20 K. Estos últimos se identifican con las regiones de formación estelar masiva. Ocurre que ambas clasificaciones se corresponden bastante, es decir, el grupo A con las SMCs y el grupo B con las GMCs. La temperatura límite de 20 K es físicamente significativa. Una masa de gas molecular sin fuentes internas de calor, con densidades de $n > 10^2 \text{ cm}^{-3}$, y opaca a la radiación UV, tendrá una temperatura de equilibrio $T_{\text{kin}} \sim 10 \text{ K}$ bajo calentamiento por rayos cósmicos y enfriamiento por la emisión de CO. Fuentes proto-estelares de tipo OB elevarán la temperatura del gas adyacente a $\geq 20 \text{ K}$ en una región de unos pocos parsecs, típicamente el tamaño de los núcleos calientes. Fuera de los núcleos calientes en las GMCs, el gas tiene unas propiedades similares a las de las SMCs. La Tabla 1.1 muestra las principales propiedades de las nubes moleculares.

Las nubes moleculares gigantes son las entidades más masivas de la Galaxia. Fueron descubiertas a partir de mapas de emisión en la línea $J = 1 - 0$ de CO, los cuales demostraron que la mayor parte del gas molecular en la Vía Láctea se localiza en estas nubes. Tienen tamaños típicos de entre 20–200 pc, masas de $4 \times 10^5 M_\odot$, densidades de $\sim 200 \text{ cm}^{-3}$, y temperaturas de 10 K. Sin embargo, debe entenderse que estas nubes moleculares muestran un amplio rango en cada una de estas propiedades. Observaciones de estas nubes en las transiciones rotacionales de una gran variedad de especies, muestran unas líneas de emisión anchas, lo que demuestra que en ellas existe una gran turbulencia. Algunos ejemplos relevantes son M17, Cep OB3, Sgr B2, Orion, W49, Ser OB1, Cyg OB1, Cyg OB2, Mon OB1, Mon OB2 y CMa OB1. La designación OB muestra que estos objetos están casi siempre asociados a cúmulos abiertos de estrellas OB. De hecho, mientras que las estrellas de últimos tipos y baja masa se forman en cualquier tipo de nube (GMCs, nubes

TABLA 1.1: Propiedades de las nubes moleculares (extraída de Turner 1988).

Propiedad	Grupo A (nubes frías)		Grupo B (nubes calientes)	
	Envoltura	Núcleo	Envoltura	Núcleo
T_{kin}	10	10	10–20	20–100
n (cm^{-3})	$10^2 - 10^3$	$10^4 - 10^5$	$10^2 - 10^3$	$3 \cdot 10^4 - 10^6$
Diámetro (pc)	1–10	0.1–1	10–200	1–3
M (M_{\odot})	10–1000	1–100	$10^3 - 10^5$	$10^2 - 5 \cdot 10^3$
M_J (M_{\odot})	8–24	~ 2	?	2–4
Tipo morfológico	Glóbulos		Nubes moleculares Gigantes (GMCs)	
Formación estelar	Nubes frías y oscuras (SMCs) sólo estrellas de baja masa no más tempranas de A0		estrellas masivas y poco masivas estrellas OB y cúmulos	
Movimientos (Δv)	$0.5-3.0 \text{ km s}^{-1}$ (supersónico)	$0.2-0.4 \text{ km s}^{-1}$ (subsónico)	$3-15 \text{ km s}^{-1}$ (supersónico)	

frías y oscuras, e incluso en glóbulos), las estrellas más masivas de los primeros tipos (OB) sólo se forman en GMCs con masas por encima de $10^3 M_{\odot}$.

Las nubes oscuras reciben su nombre de la extinción tan elevada que presentan, entre $2 \leq A_V \leq 25$ mag. Además no están asociadas a nebulosas de emisión o de reflexión, es decir, a regiones con estrellas de primeros tipos. Son principalmente nubes moleculares con un halo de HI. La temperatura es muy constante y del orden de 10 ± 3 K en el rango de densidad $10^2 - 10^4 \text{ cm}^{-3}$, y las líneas de emisión son más estrechas que en otros tipos de nubes. La temperatura de 10 K es la predicha por los modelos que suponen calentamiento por rayos cósmicos y enfriamiento por transiciones rotacionales de CO excitadas colisionalmente. Los estudios realizados en CO, NH_3 , HC_3N , HC_5N , etc., en unos 100 núcleos densos por Myers y colaboradores en SMCs cercanas (Myers et al. 1983; Myers & Benson 1983; Myers 1983), han ayudado a caracterizar estos objetos. Estas condensaciones tienen temperaturas en el rango de 10–20 K, densidades $n \sim 10^4 - 10^5 \text{ cm}^{-3}$, sus tamaños se encuentran entre 0.05 y 0.2 pc, y sus masas son de 0.3 a $10 M_{\odot}$. Al menos la mitad de la muestra estudiada por estos autores contiene estrellas de baja masa en su interior o cerca de ellas, como se ha demostrado en las observaciones realizadas por el satélite *IRAS*¹. Más adelante, estudios realizados en otras especies moleculares (C_2H , CH_3CN , HCN , HNC , SO , y SO_2 ; ver, p.ej., Irvine et al. 1985), revelaron diferencias en las abundancias relativas de estas especies de un núcleo a otro. Las SMCs nunca tienen asociadas estrellas de tipo espectral más temprano de A0 o quizá tipo B tardío, y pueden no estar asociadas a formación estelar en absoluto. Alrededor de la mitad de las SMCs se observa que tienen asociadas estrellas de baja masa, normalmente tipo T Tauri. Algunas SMCs cercanas (Taurus, L134, L183, y ρ Oph) contienen condensaciones particularmente frías, que deben representar una fase evolutiva más temprana que la fase proto-estelar. La temperatura en estos núcleos es de ~ 10 K o incluso algo inferior en algunos casos. Estos son los objetos más fríos y densos conocidos en el medio interestelar (MI).

Mientras que las nubes moleculares gigantes suelen encontrarse en los brazos

¹InfraRed Astronomical Satellite

espirales, como se ha demostrado a partir de observaciones de OH en el plano de la Galaxia (Turner 1979, 1982), las nubes moleculares pequeñas se encuentran típicamente en el disco de la Galaxia (entre los brazos espirales y, probablemente, también dentro de ellos), como demuestra su distribución local en la vecindad solar. Las GMCs también pueden localizarse entre los brazos espirales, y en ese caso serán más frías que las que se encuentran dentro de los brazos. La distribución global de GMCs y SMCs sugiere por qué la formación de estrellas OB debe trazar los brazos espirales, mientras que la formación de estrellas de baja masa debe estar distribuida más uniformemente a lo largo del disco galáctico.

1.1.3. Formación estelar

Las estrellas de baja masa ($M \leq 8 M_{\odot}$) se forman a partir de pequeñas condensaciones dentro de las nubes moleculares, cuando la gravedad supera las fuerzas de soporte térmica y magnética. El material de la nube evoluciona para formar estrellas y sistemas planetarios, y alimenta el nuevo sistema en formación. Las primeras fases de formación de una estrella tipo solar se caracterizan por dramáticos cambios no sólo en su estructura física, sino también en su composición química.

Existe una clasificación espectral de las estrellas jóvenes y proto-estrellas en formación. Los cambios significativos en los espectros de los objetos estelares jóvenes (YSOs, del inglés *Young Stellar Objects*) están relacionados principalmente con los cambios de la cantidad de polvo y su distribución espacial en la envoltura del objeto. En el esquema original, todos los objetos se dividen en varias clases (Lada 1987) a partir de un índice espectral, entre $2 \mu\text{m}$ y la máxima longitud de onda observada en el infrarrojo, y cuya sucesión tiene un sentido evolutivo. Sin embargo, observaciones continuas en el submilimétrico han revelado un gran número de fuentes con un pico de emisión incluso a mayores frecuencias. Algunas de éstas contienen también fuentes infrarrojas y potentes flujos bipolares, indicando que se ha formado un objeto en su interior. André & Montmerle (1994) argumentan que los objetos de Clase 0 representan la primera fase del colapso, en la cual existe más material circunestelar que estelar. La Figura 1.2 muestra la secuencia espectral de estos objetos, junto con su Distribución de Energía Espectral (SED, del inglés *Spectral Energy Distribution*) y el esquema del objeto en cada una de las etapas evolutivas.

Clase 0. La absorción de la luz en estos objetos es tan grande que se manifiestan sólo como fuentes de radiación submilimétrica y comúnmente no se observan en las longitudes de onda inferiores a $300 \mu\text{m}$. La forma de su espectro es cercana a la del cuerpo negro con una temperatura de sólo 20–30 K. Suelen estar vinculados a flujos moleculares bipolares fuertes y bien colimados, y muestran signos de acrecimiento de material (p.ej., B335 e IRAS 16293). Por esta razón estos objetos recibieron el nombre de clase 0, un número más bajo que el resto en la clasificación original que insinúa su significado evolutivo (André et al. 1993, 2000). Se supone que éstas son proto-estrellas que se encuentran en la etapa temprana de la contracción, que no tienen aún un núcleo caliente. Sin embargo, no se excluye que la diferencia entre las Clases 0 y I no sea evolutiva sino física, relacionada, por ejemplo, con la masa del objeto o con otras de sus características.

Una vez que la contracción gravitacional finalmente vence a la presión, nace una proto-estrella, que consiste en un objeto central, que al final podría llegar a

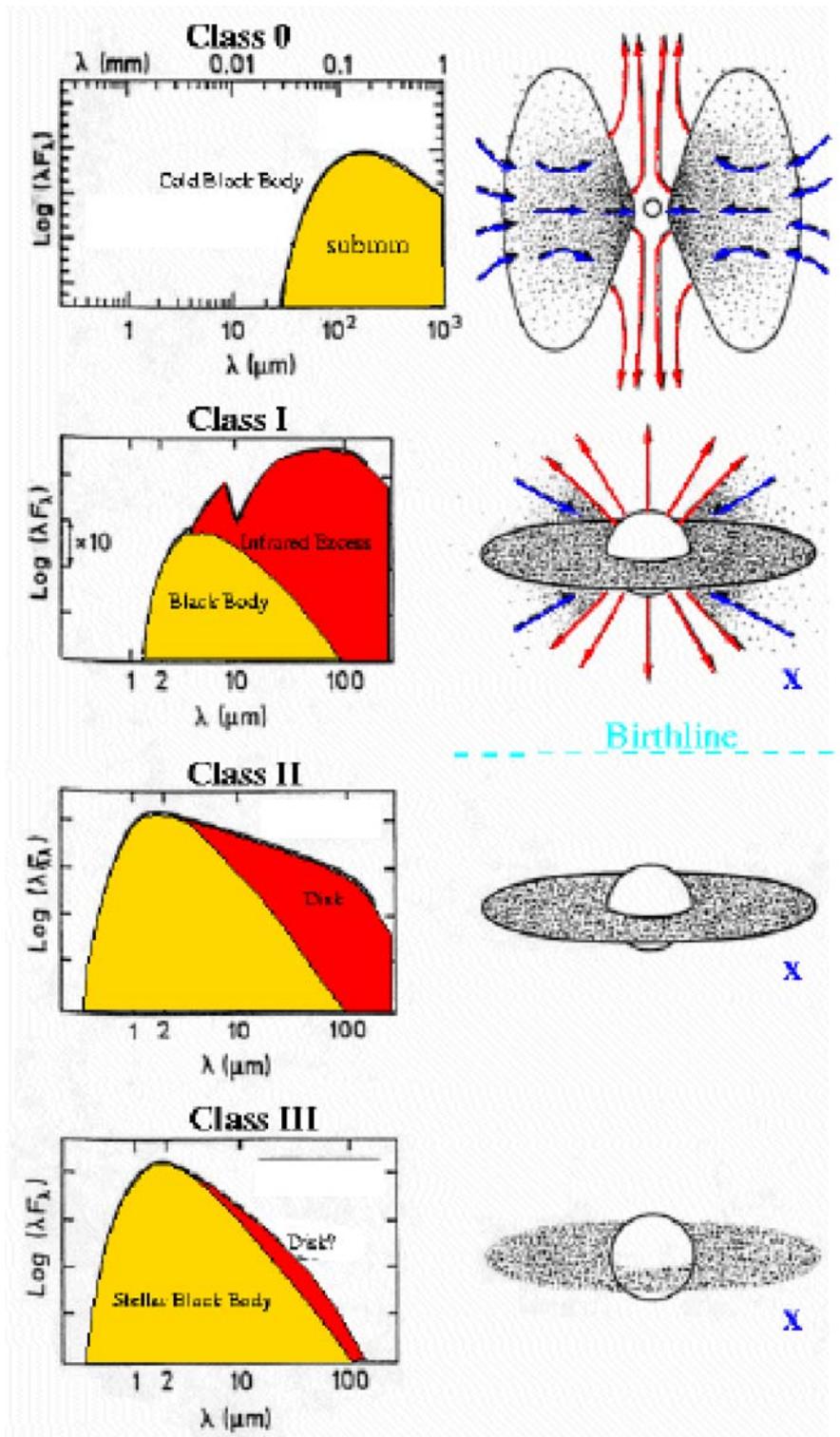


FIGURA 1.2: Clasificación espectral de los objetos estelares jóvenes poco masivos, donde se muestra un esquema del objeto junto con la distribución de energía espectral que lo caracteriza.

ser una estrella, rodeado por una envoltura desde la cual la futura estrella absorbe material. Al principio, la envoltura es tan densa que oscurece el objeto central, y su SED está totalmente dominada por las regiones externas y frías de la envoltura, con una temperatura menor de ~ 30 K. La mayor parte de la envoltura es fría y deficiente en moléculas pesadas, que se encuentran congeladas en los mantos de los granos al igual que ocurre en los núcleos pre-estelares. Sin embargo, la presencia de una fuente central, produce el calentamiento de las regiones internas de la envoltura. En esas regiones más interiores la temperatura del polvo alcanza los 100 K, causando la evaporación de los mantos de los granos formados durante la fase de núcleo pre-estelar. Las moléculas atrapadas en los hielos son eyectadas de vuelta a la fase gas, dando lugar a una química rica y peculiar. En estas regiones, que se han llamado *hot corinos*, se han encontrado moléculas orgánicas complejas.

Clase I. Las fuentes de esta clase tienen una distribución espectral amplia, que se extiende hacia el infrarrojo lejano e incluso hacia la región submilimétrica del espectro. En la mayoría de las fuentes no se nota la radiación óptica, puesto que están profundamente sumergidas en los núcleos de las nubes moleculares que las contienen. Un objeto típico de esta clase es L1551 IRS 5 en Tauro. Fuentes semejantes se asocian frecuentemente a las nebulosas reflectantes pequeñas y a los flujos moleculares bipolares. Esto indica que éstas tienen, además de una envoltura esférica de polvo, un disco circunestelar. En la mayoría de estos objetos se observa la eyección de materia, aunque en algunos casos (p.ej., HL Tau) los detalles espectrales evidencian el acrecimiento de gas. Las fuentes de Clase I se suelen encontrar con poca frecuencia, de donde se deduce que éstas tienen un tiempo de vida corto, del orden de $(1-5) 10^5$ años.

Clase II. Para estas estrellas el máximo de la distribución espectral está localizado en las regiones del óptico o infrarrojo cercano. El exceso de flujo pertenece al rango del infrarrojo lejano y es muy fuerte, aunque menos notable que para las fuentes de Clase I. Por consiguiente, las fuentes de la Clase II están rodeadas de menos masa de gas y polvo que las anteriores. Su espectro en la región infrarroja tiene una pendiente del tipo función potencial, que se describe suficientemente bien con la ayuda de un modelo de disco delgado, ópticamente grueso, con una distribución potencial de la temperatura a lo largo del radio. La pendiente del espectro (también denominada índice espectral) del tipo $\nu F_\nu \propto \nu^\alpha$ de las fuentes observadas se encuentra en el intervalo $\alpha = 0.7-1.3$. El más pequeño de estos valores concuerda con el modelo de un disco “pasivo” que no tiene fuentes propias de calentamiento y tan sólo reirradia la energía de la estrella central. El valor $\alpha = 1.3$ corresponde exactamente al valor calculado según la teoría de discos circunestelares, que se calientan a costa de la disipación viscosa de la energía gravitatoria.

Las fuentes de Clase II son típicamente estrellas visibles T Tauri que presentan discos de acrecimiento y vientos estelares. En general, en las regiones de formación estelar, el número de las fuentes de Clase II es superior en un orden de magnitud al de las fuentes de Clase I.

Clase III. El espectro de estas fuentes no se distingue prácticamente del espectro del cuerpo negro. Al parecer, un espectro tal es inherente a la fotosfera de una estrella privada de un disco circunestelar o una envoltura. Sin embargo, es difícil determinar la temperatura de la fotosfera, ya que en las regiones de formación es-

telar la absorción de la radiación es muy fuerte y el efecto del enrojecimiento puede desplazar notablemente el máximo del espectro hacia la región roja. La mayoría de estas fuentes son, probablemente, estrellas “desnudas” del tipo T Tauri, que se han acercado mucho al comienzo de la secuencia principal. Puesto que éstas no tienen ya ni una radiación infrarroja fuerte ni un exceso de radiación UV, es difícil separarlas de las estrellas de fondo y estimar su número relativo dentro de las regiones de formación estelar. Sin embargo, poseen una radiación X bastante fuerte y variable, gracias a la cual es posible detectarlas en regiones cercanas (p.ej., en Tauro). Según los resultados del conteo, el número de fuentes de las Clases II y III es comparable. Esto significa que también son comparables sus tiempos de vida característicos (cerca de 10^7 años).

Las fuentes de Clase III ya han acretado o disipado la mayor parte del material circunestelar, dejando una estrella de pre-secuencia principal, probablemente con planetas.

Existen también pequeñas condensaciones de gas con emisión en el submilimétrico pero que no contienen fuentes IRAS, y que probablemente preceden la formación de un objeto central. Éstos se encuentran entre los “núcleos sin estrellas” estudiados por Benson & Myers (1989), a los que Ward-Thompson et al. (1994) denominan “núcleos pre-proto-estelares”. Son las condensaciones frías (<10 K) y densas ($>10^5$ cm^{-3}) que parecen estar al borde del colapso (Tafalla et al. 1998; Caselli et al. 2002; Crapsi et al. 2007), y se las considera representativas de las condiciones iniciales de la formación estelar. Durante esta fase, la materia se acumula lentamente hacia el centro bajo la fuerza gravitatoria, la cual contrarresta la presión térmica y/o magnética. Al aumentar la densidad, las moléculas gaseosas comienzan a congelarse en la superficie de los granos de polvo, formando mantos de hielo “ensuciado” con otras moléculas. Las bajas temperaturas y la desaparición de muchas moléculas, en particular del CO, de la fase gas dan lugar a una química peculiar: una deutерación molecular extrema.

1.2. Componente molecular del medio interestelar

1.2.1. Moléculas en nubes oscuras

Cerca de la mitad de la masa del medio interestelar (MI) de nuestra galaxia se encuentra en forma de moléculas de H_2 , cuyas propiedades rigen en alto grado la formación estelar. El proceso de síntesis de las moléculas es muy sensible a las condiciones físicas y a la composición del medio. Este proceso tiene lugar en reacciones químicas en la fase gaseosa con la participación de iones, así como en la superficie de los granos de polvo, los cuales tienen fuertes propiedades catalíticas.

La molécula más abundante en el MI es la del hidrógeno, la cual, desafortunadamente, es muy difícil de observar, pues no tiene líneas espectrales en el rango del óptico ni en el de radio (la molécula de H_2 es simétrica, por tanto ni sus oscilaciones térmicas ni su rotación conducen al desplazamiento de sus cargas, es decir, no conducen a la radiación dipolar). La emisión de esta molécula en sus transiciones electrónicas pertenece al rango ultravioleta (UV) del espectro. Fue precisamente

debido a esta emisión UV como se descubrió la molécula de H_2 , en la franja de Lyman (991–1132 Å) mediante las líneas de absorción en los espectros de las estrellas calientes.

La emisión de la molécula de H_2 en la región UV del espectro permite estudiar únicamente las nubes semitransparentes, es decir las nubes difusas, los glóbulos pequeños o la periferia de las nubes oscuras. Las nubes moleculares compuestas totalmente de H_2 están cubiertas por una capa de transición en la cual éstas desaparecen paulatinamente cediendo el papel dominante al HI. Además de las líneas electrónicas en el UV, las moléculas de H_2 pueden emitir en la región infrarroja (niveles de rotación cuadrupolar y niveles roto-vibracionales). Estas transiciones tienen lugar a una temperatura $\sim 10^3$ K, que pueden alcanzarse en regiones de formación estelar masiva.

La segunda molécula en el MI es la de CO, con una razón $\text{H}_2/\text{CO} \sim 10^4 - 10^5$, la cual coexiste con el H_2 en las mismas regiones. A diferencia de la molécula de H_2 , la molécula no simétrica del CO tiene unas excelentes líneas de emisión en el rango de las ondas de radio ($\lambda = 2.6$ mm).

Existen muchas otras especies moleculares en el MI que, a pesar de ser menos abundantes que el H_2 o el CO, presentan muchas de sus líneas rotaciones en la región milimétrica del espectro. Hasta el momento se han observado 151 moléculas en el MI (230 incluyendo especies isotópicas), siendo la especie con mayor número de átomos el HC_{11}N . Algunas de éstas (p.ej., CO, CS, NH_3) presentan un gran interés como indicadores de la formación estelar. Además algunas moléculas adicionales han sido observadas en las envolturas en expansión de las gigantes rojas y unas 50 especies se han detectado en cometas del Sistema Solar (una compilación detallada de todas las moléculas observadas en el espacio puede encontrarse en <http://astrochemistry.net/>). Entre éstas existen algunas especies importantes comúnmente utilizadas para trazar determinadas propiedades del MI:

- C^{18}O , ^{13}CO : propiedades generales del gas.
- CS, HCN, H_2CO , CH_3OH : gas de muy alta densidad ($n_{\text{H}_2} \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$).
- NH_3 , CH_3CN : gas denso y alta temperatura.
- HNC: gas frío y quiescente.
- SiO, SO, SO_2 : indicadores del paso de frentes de choque en el gas.
- CN, HCO: presencia de un campo UV intenso (esto es, regiones de fotodisociación).
- HCO^+ : regiones con un elevado flujo de rayos cósmicos.

Cuanto mayor es la densidad de una nube, más variadas son las moléculas que contiene. Además cada molécula es característica de un determinado rango de densidades. Por esto, observaciones en las líneas de CO, NH_3 , HCN, etc., permiten estudiar prácticamente cualquier región de la nube con condiciones físicas diferentes.

Los procesos químicos que dan lugar a la formación de esta gran variedad de moléculas se producen principalmente en fase gaseosa o en estado sólido en la superficie de los granos de polvo (ver más adelante). La existencia de reacciones químicas

en los mantos de los granos ha abierto nuevas vías para entender la complejidad química del MI, aunque todavía existen muchas dudas sobre las rutas reales para la formación de muchas especies.

En los últimos años se ha demostrado que las nubes frías y oscuras poseen una química rica y compleja, con interesantes diferencias respecto a las regiones calientes de formación estelar masiva y también entre ellas. Además, esta complejidad química rivaliza con la que se observa en las nubes calientes y masivas como Sgr B2 y Ori A, a pesar de que en las nubes oscuras no tienen lugar procesos energéticos, como los asociados a la formación estelar, que pueden activar la química en la nube. Estas regiones frías son particularmente importantes para la astroquímica, porque proporcionan un lugar excelente para poner a prueba los modelos teóricos: su naturaleza quiescente y baja temperatura implica que no hay que considerar procesos como el calentamiento por choques, la evaporación de los mantos de los granos, o la interacción con vientos estelares, los cuales sí están presentes en las regiones de formación estelar masiva. Aunque la estructura de las nubes oscuras puede ser complicada, son indudablemente mucho más homogéneas que las fuentes como Orion KL, y su investigación está favorecida por la alta resolución espacial que proporciona su relativa cercanía al Sol. Además, los pequeños gradientes en velocidad que existen en estas regiones dan como resultado unas anchuras de línea ligeramente mayores que la anchura térmica, proporcionando “laboratorios” en los que pueden determinarse parámetros moleculares básicos con una precisión a veces mayor de las que se obtienen en los laboratorios en tierra. Las nubes oscuras se han convertido también en campos para la caza de nuevas especies moleculares. Algunas de las moléculas que fueron detectadas por primera vez en estas nubes, se observaron antes en el espacio que en el laboratorio (p.ej., C_3 , C_2H_3). Existen varias razones por las que es importante estudiar la química en las primeras fases de la formación estelar. En primer lugar, la química es un diagnóstico muy poderoso para las condiciones físicas, tanto en el momento actual como en el pasado, de la proto-estrella en formación. Además, la química en las primeras fases de la formación estelar puede afectar la composición química de los objetos que finalmente formarán parte del sistema planetario: planetas, cometas, y asteroides.

1.2.2. Procesos químicos en fase gas

Aunque las reacciones en fase gaseosa tienen lugar en todo tipo de regiones del MI, adquieren su mayor importancia en las nubes frías y oscuras donde los mantos de los granos se encuentran congelados. Debido a las bajas temperaturas de estas regiones, las reacciones que pueden producirse en ellas deben ser exotérmicas, y debido a las pequeñas densidades, los encuentros entre moléculas sencillas son poco probables. Esto limita en gran medida la química en nubes oscuras, mientras que en regiones con mayores temperaturas y densidades la velocidad de las reacciones puede ser mucho mayor y pueden cobrar mayor importancia ciertas reacciones endotérmicas.

Las reacciones en fase gaseosa pueden dividirse en diferentes categorías dependiendo de sus efectos generales. Existen procesos de formación de enlaces, que incluyen las asociaciones radiativas, las cuales ligan los átomos en moléculas simples o complejas. Las reacciones de foto-disociación, recombinaciones disociativas y las

disociaciones colisionales, son procesos de destrucción de enlaces, los cuales fragmentan especies para dar lugar a otras más pequeñas. Finalmente, existen también reacciones de reajustes de enlace (reacciones de intercambio ión-molécula, reacciones de transferencia de carga, y reacciones neutro-neutro), en las cuales se transfieren partes de uno de los coreactantes al otro.

La velocidad de reacción ($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$) de una reacción genérica $A + B \rightarrow C + D$, viene dada por:

$$k = \langle \sigma v \rangle \quad (1.1)$$

donde σ es la sección eficaz total de los reactivos, y v su velocidad relativa. Muchas reacciones poseen una energía de activación apreciable (E_a), aún siendo reacciones exotérmicas (esto se debe a que las reacciones químicas suelen implicar la rotura de enlaces químicos antes de formar unos nuevos), y la velocidad de reacción puede expresarse simplemente con la ecuación de Arrhenius (ver Herbst 1990):

$$k = A(T) \exp(-E_a/k_B T) \quad (1.2)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura cinética del gas y $A(T)$ es una función de la temperatura. Las energías de activación suelen ser del orden de 0.1–1 eV, por lo que en nubes oscuras, donde $k_B T \sim 0.01$ eV, incluso algunas reacciones exotérmicas no llegan a producirse.

En la química de nubes oscuras, las reacciones ión-molécula son particularmente importantes (Herbst & Klemperer 1973), las cuales no poseen energías de activación debido a la fuerza de atracción de largo alcance, dada por el potencial:

$$V(R) = -\frac{\alpha e^2}{2R^4} \quad (1.3)$$

donde α es la polarizabilidad de las especies neutras (cm^3), e la carga del electrón, y R la distancia entre las dos especies. Para un encuentro suficientemente cercano, $R \leq (4e^2\alpha/\mu v^2)^{1/4}$, la velocidad de reacción es la llamada velocidad de Langevin, independiente de la temperatura (Herbst 1990):

$$k_L = 2\pi e \left(\frac{\alpha}{\mu}\right)^{1/2} \simeq 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (1.4)$$

siendo μ la masa reducida en la colisión.

La Tabla 1.2 muestra ejemplos genéricos de las principales reacciones que ocurren en fase gas y sus velocidades de reacción típicas (para más detalles, ver p.ej., Tielens 2005; Duley & Williams 1984). A continuación se describen en más detalle las reacciones más importantes para la química en nubes oscuras.

Foto-disociación química

Los fotones del ultravioleta lejano (UVL) que atraviesan el MI difuso son los agentes principales de la destrucción de moléculas pequeñas. Sin embargo, dentro de una nube el campo de radiación de estos fotones se ve atenuado por el polvo, y ésta atenuación depende de la profundidad de la nube o, dicho de otro modo, de la extinción visual. Por tanto, estas reacciones serán importantes en regiones donde

TABLA 1.2: Reacciones genéricas en fase gaseosa y sus velocidades de reacción (extraída de Tielens 2005).

	reacción	velocidad	notas
Foto-disociación	$AB + h\nu \rightarrow A + B$	10^{-9} s^{-1}	<i>a</i>
Neutro-neutro	$A + B \rightarrow C + D$	$4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	<i>b</i>
Ión-molécula	$A^+ + B \rightarrow C^+ + D$	$2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	<i>c</i>
Transferencia de carga	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$	$10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	<i>c</i> ²
Asociación radiativa	$A + B \rightarrow AB + h\nu$		<i>d</i>
Recombinación disociativa	$A^+ + e \rightarrow C + D$	$10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	
Asociación colisional	$A + B + M \rightarrow AB + M$	$10^{-32} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$	<i>c</i>
Asociación con iones	$A^- + B \rightarrow AB + e$	$10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$	<i>c</i>

a Velocidad de reacción en un campo de radiación “unshielded”

b Velocidad de reacción en la dirección exotérmica y asumiendo que no existe barrera de activación

c Velocidad de reacción en la dirección exotérmica

d Velocidad de reacción altamente dependiente de la reacción específica

exista una fuente de fotones, como alrededor de estrellas calientes, o también en los bordes de las nubes moleculares.

Sin embargo, las nubes moleculares son muy inhomogéneas y, excepto en los núcleos densos, cada punto dentro de la nube puede tener una alta opacidad mientras que otros son prácticamente ópticamente delgados de manera que los fotones del UVL pueden penetrar dentro de la nube. Algunos fotones del UVL pueden estar presentes incluso en la profundidad de los núcleos densos. En particular, los electrones primarios producidos por la interacción con rayos cósmicos pueden contener suficiente energía para excitar el hidrógeno molecular. Puesto que los rayos cósmicos tiene una gran penetración dentro de una nube molecular, esto da lugar a la creación local y constante de fotones UVL dentro de la nube.

Reacciones neutro-neutro

Las reacciones neutro-neutro son reacciones del tipo



donde se supone que la reacción es exotérmica hacia la derecha. La termoquímica de una reacción, que describe el flujo de calor, puede evaluarse a partir de la diferencia de entalpía (H) entre productos y reactivos

$$\Delta H(\text{reaccion}) = H(\text{productos}) - H(\text{reactivos}), \quad (1.6)$$

donde una entalpía negativa significa que en la reacción se libera energía ($\Delta E = -\Delta H$; para una reacción exotérmica $\Delta H < 0$; para una reacción endotérmica $\Delta H > 0$). La entalpía de una especie no es únicamente la energía de enlace, sino que también involucra la energía interna y el trabajo realizado por el entorno. La entalpía se refiere siempre a un estado estandar. En la evaluación del cambio de entalpía de una reacción deben tenerse en cuenta la estequiometría de la reacción, las fases de

los reactivos y los productos, y la temperatura de la reacción. El cambio de entalpía no depende de la reacción en sí, por lo que puede ser calculada a partir del calor de formación y de las propiedades termodinámicas de las especies involucradas. Para moléculas estables, los calores de formación son en general cantidades negativas, por lo que la formación de un compuesto a partir de sus elementos es normalmente un proceso exotérmico.

Las reacciones neutro-neutro poseen muchas veces una apreciable barrera de activación debido a la necesaria rotura de enlaces asociada al reajuste molecular. Las velocidades de reacción hacia adelante (*forward*) y hacia atrás (*backward*), k_f y k_b , están relacionadas a través de la constante de equilibrio, K ,

$$K = \frac{k_f}{k_b} \exp \Delta E/kT. \quad (1.7)$$

Sin tener en cuenta, de momento, la energía de activación, la velocidad k_f se puede estimar a partir de la fuerza de van der Waals, responsable en una colisión neutro-neutro de la atracción entre ambos. Esta velocidad suele ser del orden de $4 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Si existe energía de activación hay que multiplicar este valor por el factor de Boltzmann, $\exp -E_a/kT$. Esto hace que incluso para una barrera modesta de 1000 K, una reacción no pueda producirse a los 100 K típicos del MI difuso, y no digamos para los 10 K característicos de las nubes moleculares. Estas reacciones neutro-neutro serán importantes cuando el gas está caliente, por ejemplo en núcleos calientes asociados a la formación estelar, en regiones densas de fotodisociación asociadas a estrellas brillantes, o en choques. En general, las únicas reacciones entre neutros importantes en las condiciones frías de las nubes oscuras son aquellas que involucran átomos o radicales que no poseen energías de activación.

Reacciones ión-molécula

Las reacciones ión-molécula, como regla general, serán más probables que las reacciones entre neutros, ya que poseen energías de activación más pequeñas y porque los iones son mucho más reactivos que los elementos o moléculas neutras.

Para un ión y un neutro, el potencial de interacción de dipolo inducido viene dado por

$$V(r) = -\frac{\alpha e^2}{2r^4} \quad (1.8)$$

siendo α la polarizabilidad de la especie neutra ($\sim 10^{-24}$). Entonces, la velocidad de reacción –dado por el llamado coeficiente de Langevin– es

$$k_L = 2\pi e \left(\frac{\alpha}{\mu}\right)^{1/2} \quad (1.9)$$

donde μ es la masa reducida. Típicamente $k_L \sim 2 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, y no depende de la temperatura. Este valor es unos dos órdenes de magnitud más rápido que las reacciones neutro-neutro, sin tener en cuenta las barreras de activación generalmente involucradas en las últimas. Está claro entonces que una pequeña cantidad de ionización puede ser muy efectiva para activar la química interestelar. Si la reacción ión-molécula involucra a un neutro con momento dipolar permanente, entonces la

velocidad de reacción puede ser mucho mayor que el coeficiente de Langevin. En este caso, el coeficiente de velocidad de reacción viene dado por

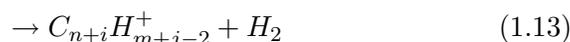
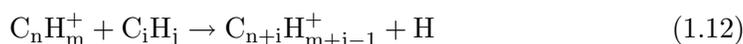
$$k_{\text{dip}} = 2\pi e \left(\left(\frac{\alpha}{\mu} \right)^{1/2} + \mu_D \left(\frac{2}{\pi \mu k T} \right)^{1/2} \right) \quad (1.10)$$

donde μ_D es el momento dipolar de la especie neutra y α su polarizabilidad. Esto da lugar a un aumento de la velocidad comparado con la de Langevin, particularmente a bajas temperaturas, con valores de más de $10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ a 10 K para un dipolo fuerte.

Entre las reacciones ión-molécula podemos encontrar algunas particularmente importantes en la producción de hidrocarburos (ver Herbst & Leung 1989), como son las **reacciones de inserción de carbono**,



o las **reacciones de condensación**,



Los productos de éstas pueden reaccionar posteriormente con H_2 para producir especies aún más saturadas (hidrogenadas), vía



aunque estas reacciones de hidrogenación pueden tener energías de activación elevadas y no llegar a producirse en nubes oscuras.

Reacciones de recombinación disociativa

La recombinación disociativa ión-electrón es el último paso en la síntesis de compuestos poliatómicos neutros,



Las velocidades de reacción son típicamente de $10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. En general, para moléculas poliatómicas, los compuestos neutros producidos en la reacción no se conocen en su totalidad.

Estas reacciones son un proceso importante en la química interestelar ya que controlan el nivel de ionización, y por tanto la velocidad de las reacciones químicas en las nubes interestelares.

1.2.3. Modelos en fase gaseosa

Para intentar reproducir la química encontrada en determinadas regiones del MI, se han desarrollado modelos teóricos en los que se utilizan todas las reacciones conocidas para producir las moléculas observadas. Más tarde, estos modelos se comparan con las abundancias observadas en las regiones de nuestro interés. En general,

estos modelos necesitan una gran variedad de parámetros, como las abundancias de los elementos principales (C, O, N, S, metales, etc.), y la tasa de ionización por rayos cósmicos. Un parámetro fundamental en estos modelos es la abundancia de carbono, tanto en forma atómica como en compuestos moleculares. La presencia de C atómico es esencial para la creación de largas cadenas carbonadas y de moléculas orgánicas complejas. A continuación se describen brevemente los dos modelos principales que existen en fase gaseosa.

Modelos estacionarios en el tiempo

En estos modelos se varía la profundidad a lo largo de una estructura determinada. Se aplican comúnmente en envolturas exteriores de regiones de formación estelar, envolturas de estrellas evolucionadas, o en regiones donde existe radiación importante en el UV o de rayos-X.

Por tanto, para estos modelos es necesario conocer la geometría, la densidad del gas en función de la posición, el campo de radiación incidente, y otros parámetros relacionados con los granos de polvo (curva de extinción, albedo y función de dispersión). Las temperaturas en función de la posición se pueden obtener a partir de las reacciones de calentamiento y enfriamiento, aunque también se utilizan las obtenidas de las observaciones.

Modelos dependientes del tiempo

Estos modelos no dependen de la profundidad. En ellos las abundancias moleculares varían con el tiempo en una posición determinada de la nube. Se utilizan en nubes oscuras, núcleos en colapso y condensaciones calientes asociadas a formación estelar. Los procesos químicos considerados en estos modelos llegarán a un estado estacionario después de 10^5 – 10^7 años, dependiendo de la tasa de ionización por rayos cósmicos, la temperatura, la densidad y las especies moleculares consideradas en el modelo.

Para estos modelos es necesario conocer la densidad de H_2 en función del tiempo, la extinción visual (A_V) en la posición considerada en la nube, y las abundancias iniciales (para $t = 0$) de los elementos atómicos principales. La temperatura se obtiene o bien del balance térmico, o bien de las observaciones.

Actualmente también existen modelos en los que se combinan ambas posibilidades, teniendo en cuenta tanto la variación con respecto al tiempo como respecto a la profundidad.

Existen bases de datos donde podemos encontrar multitud de reacciones químicas que dan lugar a diferentes especies, y sus correspondientes velocidades de reacción. Las más importantes son la base de datos UMIST de la Universidad de Manchester (Woodall et al. 2007), y la osu.2003 de la Ohio State University³.

³www.physics.ohio-state.edu/~eric/research.html

1.3. Polvo interestelar

1.3.1. El papel del polvo

Además de los iones, átomos y moléculas que encontramos en la fase gaseosa, en el MI también existen partículas sólidas macroscópicas, llamadas partículas de polvo. Estas partículas fueron observadas debido a la absorción de la luz emitida por las estrellas y a su polarización, que aparece cuando las partículas de polvo están orientadas por el campo magnético interestelar. De ser un obstáculo, el cual hacía difíciles las observaciones ópticas, estas partículas se transformaron en un objeto de observación fundamental en la astronomía infrarroja. Las partículas de polvo desempeñan un papel muy importante en el proceso de formación de las estrellas y de los sistemas planetarios, su emisión en el infrarrojo es un factor importante en el balance de energía en el medio interestelar denso, y además, en la superficie de los granos de polvo tiene lugar la síntesis de muchas moléculas interestelares, entre ellas el H_2 . La existencia de los granos de polvo y la posibilidad de que en su superficie se produzcan reacciones químicas, ha dado lugar a un avance importante en la comprensión de la complejidad química del MI.

En los años 30 se consideraba que estos granos de polvo eran partículas de hierro. En los 40 apareció el modelo de los “hielos sucios”, mezcla de moléculas de H_2O , H_2 , CH_4 , NH_3 con impurezas de elementos pesados. Los cálculos demostraron que la condensación directa de tales partículas en el MI es imposible; entonces se prestó atención a las atmósferas frías de las estrellas gigantes, donde pueden condensarse las partículas refractarias de grafito, y luego expulsarse de las atmósferas debido a la presión radiativa. El descubrimiento de todo un conjunto de moléculas complejas en el MI contribuyó a la creación de los modelos de capas o mantos múltiples, en los cuales el núcleo de los granos, constituido por elementos refractarios como silicatos y grafitos, está recubierto por mantos de hielo que contienen diversas moléculas.

Los radios de los granos de polvo se encuentran entre 0.25–0.005 μm . Se supone que hay pocas partículas grandes, y éstas son las responsables de la absorción y la polarización de la luz en las regiones infrarroja y óptica del espectro. Las partículas pequeñas se encuentran en cantidades miles de veces mayores y son las que determinan la absorción en la región UV. Se supone que en las partículas grandes se encuentran atrapados átomos de elementos magnéticos, los cuales dan a las partículas de polvo propiedades paramagnéticas y son responsables de su orientación en el campo magnético interestelar.

La temperatura de los granos de polvo se determina mediante el balance entre su radiación y calentamiento. En las nubes y en el medio frío existente entre ellas, las partículas son calentadas por la radiación de las estrellas; y en las regiones calientes, donde el gas tiene una temperatura $\geq 10^5$ K, se calientan también debido a los choques con los electrones. En las capas profundas de las nubes densas, la temperatura de los granos de polvo es de sólo unos cuantos grados Kelvin; sin embargo, precisamente la radiación infrarroja del polvo es el principal agente refrigerante de las nubes moleculares y de las proto-estrellas.

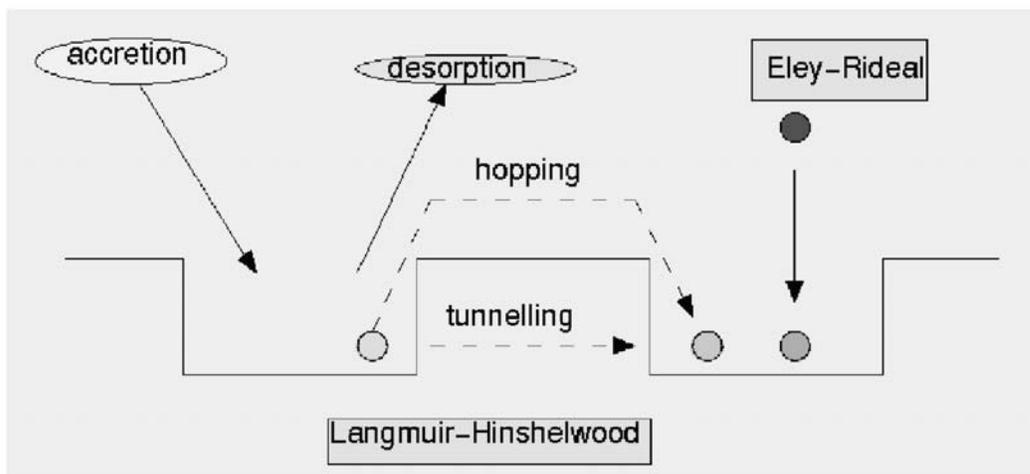


FIGURA 1.3: Esquema de los procesos químicos que ocurren en la superficie de los granos de polvo (extraída de Herbst 2000).

1.3.2. Procesos químicos en granos

El papel fundamental de los granos de polvo para sintetizar especies moleculares se conoce desde hace unos 40 años, cuando fueron invocados para explicar la producción de moléculas de H_2 en nuestra Galaxia (ver, p.ej., Gould & Salpeter 1963; Hollenbach & Salpeter 1971). La química de granos también ha sido considerada para explicar:

- la gran abundancia de moléculas complejas observada en las regiones de formación estelar,
- el aumento de varios órdenes de magnitud en la abundancia de algunas especies observadas a lo largo de los flujos moleculares,
- la composición compleja de los hielos que se encuentran en los mantos de los granos,
- la gran abundancia de especies deuteradas observadas en las regiones de formación de estrellas de baja masa.

Los principales procesos que ocurren en los granos se ilustran en la Figura 1.3 (Herbst 2000), que muestra una porción de la superficie de un grano. Una vez que un átomo ligero (por ejemplo H) golpea la superficie del grano es adsorbido. Si el átomo se liga a la superficie por fuerzas débiles de van der Waals, con energías de enlace típicamente de 0.01–0.2 eV (100–2000 K), las especies ligeras podrán desplazarse por la superficie, superando las barreras energéticas a través de saltos térmicos o por efecto túnel, dependiendo de la temperatura del grano (ver, p.ej., Tielens & Allamandola 1987).

La química de superficie de granos basada en la difusión se conoce como química de *Langmuir-Hinshelwood* (LH, ver también Tielens & Hagen 1982). Aquí uno de los

principales procesos en la superficie de los granos es la hidrogenación, de manera que el O se transforma en H_2O (el principal componente de los hielos), C en CH_4 , N en NH_3 , S en H_2S , y CO en H_2CO y CH_3OH . La hidrogenación del CO implica vencer una barrera de energía de activación (Woon 2002), la cual ralentiza el proceso; de hecho, el CO es uno de los principales componentes de los mantos de los granos observados en nubes moleculares, sólo después del agua (ver, p.ej., Chiar et al. 1995; Teixeira et al. 1998). Existen algunas dudas sobre la existencia de NH_3 sólido (ver, p.ej., Schutte & Khanna 2003), y de H_2S (Wakelam et al. 2004). Pero se ha detectado OCS (Palumbo et al. 1997) y los perfiles de absorción de CO_2 son ubicuos en la dirección de objetos embebidos u oscurecidos (ver, p.ej., Nummelin et al. 2001). Por tanto, la oxigenación parece ser otro proceso importante en la superficie de los granos, el cual compete con la hidrogenación dependiendo de la razón O/H y de la temperatura del grano (siendo el H más volátil que el O).

Si la especie adsorbida se une al grano con un enlace fuerte, con energías de enlace del orden de 1 eV (10000 K), el mecanismo *Eley-Rideal* (ER) domina. En ese caso, sólo ocurrirá la reacción de superficie si una especie de la fase gas aterriza encima o cerca de la especie adsorbida. Esta química, que sólo es eficiente para una gran cobertura de la superficie, ocurre preferentemente a una temperatura del grano T_d por debajo de 300 K, cuando el mecanismo LH no puede darse para especies fuertemente ligadas.

El regreso de las especies atrapadas en la superficie de los granos a la fase gas puede ocurrir por *evaporación térmica*, con una escala de tiempo dependiente exponencialmente de la temperatura del grano. Para $T_d = 10$ K, sólo el H y el D pueden ser evaporados de forma significativa, mientras que se necesita una temperatura $T_d > 90$ K para que pueda evaporarse el H_2O . Cada especie tiene una temperatura de evaporación diferente, de manera que dependiendo de la temperatura del grano, la composición de los mantos será diferente. Por tanto, el agua y otras especies saturadas se pueden encontrar en fase gaseosa en regiones de formación estelar donde el polvo ha sido calentado por la nueva proto-estrella, pero no en regiones frías. Existen otros mecanismos de *evaporación no-térmica*, que pueden ser importantes en nubes oscuras. Por ejemplo, la evaporación producida por el choque con rayos cósmicos (Léger et al. 1985; Hasegawa & Herbst 1993a), y por la energía generada en una reacción química producida en la superficie del grano (Willacy & Millar 1998; Takahashi & Williams 2000).

1.3.3. Modelos gas-grano

En estos modelos se consideran las posibles reacciones que pueden tener lugar en los mantos helados de los granos, junto con las adsorciones y desorciones que puedan producirse entre la fase gaseosa y los granos. Para las nubes oscuras, los mantos de los granos no podrán evaporarse, y el papel de los granos suelen considerarse pasivo, en el que las moléculas en fase gas son acretadas a los mantos de los granos. Para que se produzcan las evaporaciones térmicas deben existir temperaturas ≥ 20 K en el grano. La energía que se genera en la creación de algunas moléculas podría ser suficiente como para liberarlas y producir una evaporación puntual, además pueden existir otros procesos de calentamiento puntuales como los debidos a rayos cósmicos. Algunas moléculas pueden pasar a la fase gaseosa al ser erosionadas de los granos

por las colisiones con rayos cósmicos, con átomos pesados, o con otros granos a velocidades mayores de 0.1 km s^{-1} . Las eficiencias de estos procesos dependerán tanto de las propiedades de los granos como de las energías que unen las moléculas a los granos. Por ejemplo algunas especies, como las no polares, son más fáciles de liberar de los granos que las moléculas polares. La adhesión de las moléculas en los granos dependerá, entre otras cosas, de la temperatura de los granos, y de la forma y composición química de su superficie, y también de la temperatura y densidad del gas. Cuanto mayor es densidad del gas y menor la temperatura de los granos, mayor será la adhesión de las moléculas. La temperatura cinética del gas, que representa la agitación de las moléculas, también está implicada. Si la temperatura (velocidad) es muy grande, se inhibirá la adsorción de moléculas.

En los modelos actuales (ver, p.ej., Caselli et al. 1993), se suele comenzar con una química “tranquila”, donde domina la fase gaseosa. Ésta evoluciona hasta llegar a un estado estacionario en el que se desestabiliza la zona, ya sea por choques o por un aumento local de la temperatura. Esto hace que las moléculas que se han formado en la superficie de los granos se liberen y contaminen las abundancias que han sido procesadas en fase gaseosa. A partir de aquí las abundancias químicas evolucionan en fase gaseosa. Si el medio vuelve a enfriarse o si el choque ha pasado, muchas de las moléculas volverán a adherirse a los granos, con lo que disminuirán sus abundancias en la fase gaseosa.

Capítulo 2

Barrido espectral a 3 mm en nubes oscuras: Datos

2.1. Introducción

Los barridos espectrales han demostrado ser una herramienta muy poderosa para el estudio de las nubes interestelares, las cuales son los lugares de formación de nuevas estrellas. Mientras que la emisión continua del polvo nos proporciona la estructura de dichas regiones y la distribución espectral de energía en ellas nos indica el estado evolutivo del objeto, la observación de líneas de rotación y vibración de varias moléculas nos permite obtener una visión completa de las propiedades físicas, la complejidad química y la cinemática de estas nubes. Desafortunadamente el hidrógeno molecular, que representa la mayor parte de la masa en nubes densas, no se puede observar fácilmente por su falta de momento dipolar. Se han observado hasta la fecha 151 moléculas interestelares. Mientras que muchas de éstas se conocen por observaciones realizadas en el laboratorio, algunas moléculas han sido detectadas únicamente en el medio interestelar. Por eso son necesarios barridos espectrales de diferentes tipos de nubes interestelares y circunestelares. Además, puesto que algunas moléculas son indicadores del estado evolutivo de la nube, pueden ayudarnos a comprender y establecer una relación entre la evolución química y dinámica de la nube. Entre otras cosas, los barridos espectrales en el infrarrojo y en los rangos (sub)milimétrico y radio del espectro, nos permiten:

- La creación de un censo completo y sin sesgo de los principales átomos y moléculas existentes en las regiones observadas.
- La utilización de cocientes entre diferentes transiciones de una misma molécula, permite obtener los parámetros físicos de las diferentes componentes de la nube dentro del haz. En particular, podemos obtener la densidad de columna y la abundancia de la especie observada, la temperatura de excitación y la densidad de H_2 .
- La utilización de las abundancias moleculares observadas, junto con los resultados obtenidos de los modelos químicos, como diagnóstico del estado evolutivo de la región.

- La comparación de las abundancias de diferentes especies isotópicas de una molécula, que nos proporciona información sobre el reciclado del material estelar.
- Proporcionar pruebas de los diferentes procesos dinámicos que ocurren en la nube, tales como choques o turbulencia, por comparación de los perfiles de las líneas, observadas con gran resolución espectral, de moléculas con diferente excitación y química.
- Medida de la tasa total de enfriamiento del gas, y en particular la contribución de las moléculas de CO y H₂O.
- Medidas directas de la contribución de la emisión de líneas al continuo, hecho que puede afectar a los parámetros derivados a partir de la emisión del polvo.

Los barridos espectrales también ofrecen la oportunidad de descubrir nuevas e inesperadas especies moleculares exóticas, que de otro modo habrían pasado desapercibidas, las cuales pueden proporcionar información complementaria para el estudio de las nubes moleculares. La historia de la astronomía molecular nos muestra que las moléculas interestelares pueden ser descubiertas en búsquedas específicas, cuando las frecuencias son conocidas y uno sospecha que cierta molécula es abundante. Sin embargo, los descubrimientos más inesperados se han obtenido en barridos espectrales o son casuales. Es importante mencionar también que en muchos casos, los parámetros de ciertas moléculas se pueden determinar con más exactitud a partir de observaciones astronómicas que en el laboratorio. Además puede ocurrir que dentro de la ventana espectral observada encontremos varias líneas de una misma especie, por lo que se podrán identificar sus características espectrales y medir su abundancia de forma más segura. De este modo, los barridos moleculares se presentan como uno de los mejores métodos en este tipo de estudios.

En las últimas décadas se han realizado un gran número de barridos espectrales (ver Tabla 2.1), en condensaciones calientes asociadas a formación estelar masiva (Orión KL, W51) y poco masiva (IRAS 16293-2422), en regiones H II (G5.89, G34.3, W3), en las nubes moleculares del Centro Galáctico (Sgr B2), alrededor de estrellas en las últimas etapas de su evolución (IRC+10216, CRL 618), e incluso fuera de nuestra Galaxia (NGC 253). Como se ha dicho anteriormente, las nubes pre-estelares frías son un importante laboratorio para testear los modelos de química, además de ser los lugares de formación de estrellas poco masivas y de sistemas planetarios. Aunque se han realizado numerosos estudios de estas fuentes en moléculas específicas, sólo existen dos barridos espectrales en nubes oscuras, ambos en la dirección de TMC-1 (ver Tabla 2.1). Uno de ellos, realizado con el radio telescopio de 45-m de Nobeyama (Japón), cubre un rango espectral entre 8.8–50 GHz con un rms de 10–20 mK (Ohishi & Kaifu 1998; Kaifu et al. 2004). Estos autores detectaron un total 414 líneas procedentes de 38 moléculas diferentes, 11 de las cuales fueron detectadas por primera vez en el medio interestelar durante este trabajo. Sólo 2 de las 38 especies observadas son diatómicas (CS y CO), cuatro son triatómicas y el resto poliatómicas, donde la especie más larga contiene 11 átomos (HC₉N). Utilizando el radio telescopio de 305-m de Arecibo (Puerto Rico), Kalenskii et al. (2004) observaron el total de la banda entre 4–6 GHz además de algunas frecuencias seleccionadas dentro

TABLA 2.1: Barridos espectrales realizados hasta la fecha en diferentes regiones.

Fuente	ΔV (km s ⁻¹)	ν (GHz)	Telescopio	Res. (MHz)	Ref.
CRL 618	≥ 20	80–116	IRAM 30-m	1.0, 1.25	1
(nebulosa		131–180	”	”	1
proto-		204–275	”	”	1
planetaria)		280–356	CSO 10.4-m	1.0	2
G5.89-0.39	$\sim 3 - 15$	330–360	JCMT 15-m	0.756	3
(región H II ultra compacta)					
G34.3+0.15	$\sim 3 - 15$	84.7–115.6	TRAO 14-m	1.0	4
(región H II		123.5–155.3	”	”	4
ultra compacta)		155.3–165.3	TRAO 14-m	1.0	5
		330–360	JCMT 15-m	0.33	6
IRAS 16293	~ 5	80–280	IRAM 30-m	1.0, 1.25	7
(proto-estrella		335–365	JCMT 15-m	0.625	7
de baja masa)					
IRAS 17470	~ 5	86.1–92.1	MOPRA 22-m	0.5	8
(proto-estrella)					
IRAS 23385	$\sim 3 - 5$	330–360	JCMT 15-m	0.756	9
(proto-estrella)					
IRC+10216	~ 30	72–91	Onsala 20-m	0.25, 1.0	10
(estrella AGB)		224–234	JCMT 15-m	2.73	11
		258–268	”	2.73	11
		340–364	”	3.73	11
		129–172.5	IRAM 30-m	0.1, 1.0, 1.25	12
NGC 253	~ 200	129.6–174.7	IRAM 30-m	4.0	13
(galaxia con brotes de formación estelar)					
Orión-KL	$\sim 10 - 20$	72–91	Onsala 20-m	0.25, 1.0	14
(región de		70–115	NRAO 12-m	1.0	15
formación		138.3–150.7	TRAO 14-m	1.0	16
estelar		150–160	FCRAO 14-m	0.25, 1.0	17
masiva)		159.7–164.7	TRAO 14-m	1.0	18
		215–247	OVRO 10.4-m	1.0	19
		216–245	OVRO Array	1.0	20
		247–263	OVRO 10.4-m	1.0	21
		257–273	JCMT 15-m	2.0	22
		325–360	CSO 10.4-m	1.0	23
		330–360	NRAO 12-m	2.0	24
		334–343	JCMT 15-m	1.0	25
		455–507.4	JCMT 15-m	1.0	26
		607–725	CSO 10.4-m	1.0	27
		685–692	JCMT 15-m	1.2	28
		795–903	CSO 10.4-m	1.4, 2.0	29

Referencias.— 1. Pardo et al. (2007); 2. Pardo et al. (2005); 3. Thompson & Macdonald (1999); 4. Kim et al. (2000); 5. Kim et al. (2001); 6. Macdonald et al. (1996); 7. Castets et al. (2005); 8. Kim et al. (2002); 9. Thompson & Macdonald (2003); 10. Johansson et al. (1984); 11. Avery et al. (1992); 12. Cernicharo et al. (2000); 13. Martín et al. (2006); 14. Johansson et al. (1984); 15. Turner (1989); 16. Lee et al. (2001); 17. Ziurys & McGonagle (1993); 18. Lee & Cho (2002); 19. Sutton et al. (1985); 20. Blake et al. (1996); 21. Blake et al. (1986); 22. Greaves & White (1991); 23. Schilke et al. (1997); 24. Jewell et al. (1989); 25. Sutton et al. (1995); 26. White et al. (2003); 27. Schilke et al. (2001); 28. Harris et al. (1995); 29. Comito et al. (2005);

TABLA 2.1: (Continuación).

Fuente	ΔV (km s ⁻¹)	ν (GHz)	Telescopio	Res. (MHz)	Ref.
Sgr B2	$\sim 10 - 25$	70–115	NRAO 12-m	1.0	30
(nube molecular gigante)		70–150	BLT 7-m	1.0	31
		218.3–263.5	SEST 15-m	1.0	32
		330–355	CSO, JCMT	≤ 1.0	33
TMC-1	< 1	4–6; 8–10	Arecibo 305-m	0.003	34
(nube oscura)		8.8–50	Nobeyama 45-m	0.037, 0.25	35
W3	$\sim 2 - 15$	84.7–115.6	TRAO 14-m	0.25, 1.0	36
(región H II)		334–365	JCMT 15-m	0.25	37
W51	$\sim 12 - 25$	17.6–22	NRAO 43-m	0.31	38
(región de formación estelar masiva)					

Referencias.— 30. Turner (1989); 31. Cummins et al. (1986); 32. Nummelin et al. (1998); 33. Sutton et al. (1991); 34. Kalenskii et al. (2004); 35. Kaifu et al. (2004); 36. Kim et al. (2006); 37. Helmich & van Dishoeck (1997); 38. Bell et al. (1993).

del rango 8–10 GHz. Este trabajo supuso el primer barrido espectral de una nube molecular a frecuencias tan bajas. Detectaron un total de 29 líneas procedentes de especies carbonadas como C₂S, C₃S, C₄H, C₄H₂, HC₃N, HC₅N, HC₇N, y HC₉N.

El tipo de fuentes en los que se han realizado la mayor parte de barridos espectrales han sido seleccionadas no por su ciencia, sino por la disponibilidad de espectrómetros que proporcionen todo el ancho de banda del receptor junto con la sensibilidad y resolución de velocidades apropiada. De forma que se han observado básicamente fuentes con una emisión molecular intensa y/o con líneas relativamente anchas (>1 km s⁻¹). Además, las regiones observadas típicamente en estos estudios, como por ejemplo Orión KL y Sgr B2, poseen una alta densidad y temperatura cinética, por lo que existe la posibilidad de excitar colisionalmente gran cantidad de especies diferentes. La alta columna de densidad de H₂ también proporciona líneas muy intensas, por lo que no se requiere un excesivo gasto en tiempo de observación para completar barridos espectrales en estas regiones. Sin embargo, debido a la baja temperatura ambiente y a las tranquilas condiciones cinemáticas, las líneas procedentes de las nubes frías y oscuras son considerablemente más débiles y estrechas (la anchura doppler es típicamente de unos 100 m/s), por lo que se necesita un telescopio de gran sensibilidad y un espectrómetro que proporcione una alta resolución espectral junto con un gran ancho de banda para realizar de forma efectiva un barrido espectral. El radio telescopio de 30-m del Instituto de Radio Astronomía milimétrica (IRAM)¹ en Granada, se encuentra en una situación idónea para este tipo de estudio debido a la alta sensibilidad de sus receptores y la versatilidad del espectrómetro VESPA, que con 18000 canales nos proporciona diferentes combinaciones de resolución espectral y ancho de banda. En la configuración óptima, con 40 kHz de resolución espectral (~ 0.12 km s⁻¹) que se ajusta bien a la anchura típica de estas regiones, nos proporciona un ancho de banda máximo de 315 MHz. Sin

¹IRAM es un consorcio formado por INSU/CNRS (Francia), MPG (Alemania) y el IGN (España).

embargo el pequeño ancho de banda cubierto en cada observación nos ha limitado en la realización de este barrido al consumir mucho tiempo de observación. En este sentido, se ha instalado recientemente un nuevo espectrómetro con 16000 canales en el radio telescopio de 100-m de Effelsberg (Alemania), en el que pudimos realizar algunas pruebas justo después de su instalación. Éste proporciona un ancho de banda de 500 MHz a la resolución espectral requerida en estas nubes, es decir, 10 kHz para frecuencias ~ 20 GHz. Con la instalación de este nuevo espectrómetro podremos realizar de manera eficiente, un barrido espectral a 1.3 cm de las mismas nubes oscuras (Marcelino et al., en preparación).

En este capítulo presentamos los resultados preliminares del primer barrido espectral a longitudes de onda $\lambda = 3$ mm en varias nubes oscuras. En las secciones siguientes se describen las cuatro fuentes observadas para este estudio (Sección 2.2), y los detalles observacionales (sección 2.3). La Sección 2.4 muestra las transiciones de las especies moleculares detectadas, y a continuación se describen algunas características de dichas moléculas (Sección 2.5). Por último (Sección 2.6) se presenta un pequeño resumen y las primeras conclusiones obtenidas de este trabajo.

2.2. Las fuentes

Las fuentes seleccionadas para este estudio son bien conocidas, por lo que existen varios estudios en los que se han determinado sus propiedades básicas (densidad y temperatura). Además representan diferentes estados evolutivos hacia la formación de estrellas poco masivas ($\leq 8 M_{\odot}$), desde núcleos pre-estelares hasta los que contienen objetos de Clase 0, para así poder caracterizar su emisión molecular y estudiar los procesos químicos que ocurren durante la fase de colapso. A continuación se describen las características de las fuentes observadas, y la Tabla 2.2 muestra las posiciones observadas de cada nube.

TABLA 2.2: Fuentes observadas en el barrido espectral a 3 mm.

Fuente	R.A.(J2000.0)	Decl.(J2000.0)	V_{LSR} (km s $^{-1}$)	d (pc)
Barnard 1	03 ^h 33 ^m 20.8 ^s	+31° 07' 34.0''	6.7	200
L1544	05 ^h 04 ^m 18.1 ^s	+25° 10' 48.0''	7.2	140
L183	15 ^h 54 ^m 08.6 ^s	-02° 52' 10.0''	2.4	160
TMC-1(CP)	04 ^h 41 ^m 41.9 ^s	+25° 41' 27.1''	6.0	140

2.2.1. Barnard 1

Es una de las fuentes con mayor densidad de columna dentro de la región de Perseo ($N(\text{H}_2) > 10^{23}$ cm $^{-2}$; Lis et al. 2002), y muestra evidencias de formación estelar reciente en sus alrededores. Walawender et al. (2005) realizaron estudios en el óptico, IR cercano, y a longitudes de onda milimétricas y encontraron que, con 10 proto-estrellas –tres de ellas de Clase 0–, múltiples flujos moleculares y objetos Herbig-Haro, la región que rodea a esta nube parece ser mucho más activa en formación de estrellas que lo que se pensaba hasta ahora. La región de extinción visual ≥ 3 mag. cubre 2 pc (a una distancia de 200 pc; Bachiller & Cernicharo 1984)

y se compone de varias condensaciones con $A_v \geq 5$ mag. La posición observada en este trabajo se encuentra localizada en una de estas condensaciones, cercana a dos de las fuentes de Clase 0 observadas.

El primer estudio multi-molecular de esta región fue realizado por Bachiller & Cernicharo (1984). En él presentaron mapas de extinción visual, obtenidos a partir del recuento de estrellas y mapas de emisión en diversas moléculas como CO y sus sustituciones isotópicas ^{13}CO y C^{18}O , HCO^+ , H^{13}CO^+ y NH_3 . En este artículo proponen un modelo en el que dividen la nube en cuatro regiones –núcleo, envolturas interna y externa, y halo–, de diferente tamaño y condiciones físicas dependiendo de la intensidad de las líneas observadas (ver, Cernicharo & Guélin 1987). La capa más interior, es decir el núcleo, se estudió a partir de las líneas de rotación-inversión del amoníaco, y determinaron en ella una densidad media, $n(\text{H}_2)$, entre 10^3 y $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. A partir de la transición $(J, K) = (2, 2)$ del amoníaco obtuvieron un valor para la temperatura rotacional entre 10–14 K, por lo que concluyeron que la temperatura cinética debía ser $\sim 12 \pm 2$ K. También realizaron un estudio dinámico en el que concluyeron que la nube se encuentra en equilibrio gracias a la influencia de campos magnéticos y/o turbulencia. Bachiller et al. (1990b) realizaron mapas de Barnard 1 (B1) en la emisión de varias moléculas con mayor resolución angular, con lo que pudieron distinguir algunas estructuras dentro del núcleo principal a partir de las observaciones de NH_3 . En esta región encontraron valores para la densidad de hasta $7 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. La temperatura cinética que obtuvieron se encuentra entre 11–14 K en las regiones más densas, llegando a ser ≥ 20 K en el límite de la nube, indicando que está siendo calentada desde el exterior.

Se han realizado observaciones en el continuo que indican la presencia de cuatro condensaciones principales dentro de la nube, B1 a–d (ver Figura 2.1), donde B1-a se encuentra asociada a la fuente proto-estelar IRAS 03301+3057. Bachiller et al. (1990b) encontraron un flujo de alta velocidad procedente de esta fuente a partir de observaciones en $^{12}\text{CO } J = 2 - 1$. Este flujo, que abarca una región de unos $40''$, fue estudiado en detalle por Hirano et al. (1997) a partir de la emisión de $^{12}\text{CO } (J = 1 - 0)$ y por Yamamoto et al. (1992) a partir de las transiciones $J = 2 - 1$ y $J = 1 - 0$ de SiO. La interacción de este flujo con el gas ambiente puede intuirse por la presencia de varios objetos Herbig-Haro en la nube (Yan et al. 1998). Nuestra posición, denominada B1-b, contiene dos de las fuentes de Clase 0 observadas en la nube. Sin embargo, hasta el momento no se han detectado flujos moleculares procedentes de estos objetos. Hirano et al. (1999) identificaron por primera vez estas dos fuentes intensas de continuo en el rango de las ondas submilimétricas, y obtuvieron una densidad de columna de $\text{H}_2 \sim 1.3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ dentro de un haz de $15''$ que, asumiendo una distancia de 200 pc, corresponde a una densidad media del gas de $2.9 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ dentro del diámetro del haz principal del telescopio. Esto demuestra la existencia de gas de alta densidad en la fuente. Otra característica interesante de esta nube es el gran enriquecimiento en deuterio encontrado en varias moléculas (ver, p.ej., Lis et al. 2002; Gerin et al. 2001; Roueff et al. 2000). En particular las formas deuteradas de H_2CS y H_2CO (Marcelino et al. 2005), revelan un comportamiento para B1 que contrasta con otras fuentes quiescentes y ricas en deuterio como por ejemplo L183. Todo esto hace de B1 una fuente particularmente bien adaptada para el estudio de especies deuteradas y además, la gran densidad

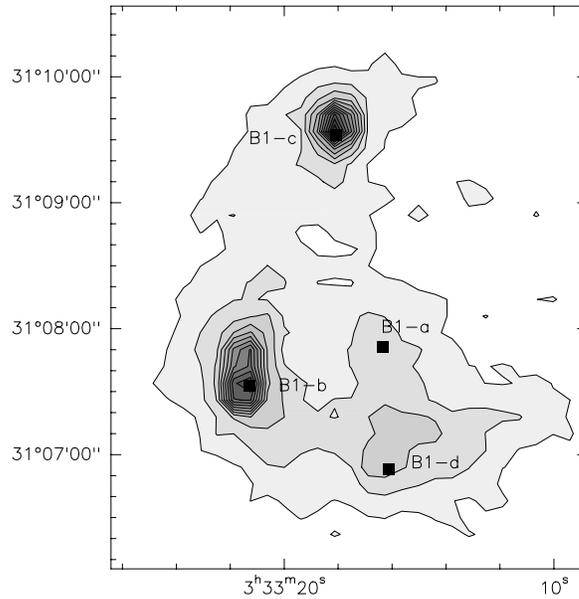


FIGURA 2.1: Mapa de la emisión procedente del polvo a 1.2 mm observado en el telescopio de 30-m de IRAM, donde se muestran las condensaciones en Barnard 1 (M. Gerin, datos no publicados). Los contornos son desde 30 a 420 mJy/beam en pasos de 30 mJy/beam.

de columna de B1 (incluso mayor que en la proto-estrella IRAS 16293) hace de esta nube oscura una fuente ideal para el estudio del contenido molecular de las condensaciones pre-estelares.

2.2.2. L1544

Es una condensación densa y fría situada dentro del complejo molecular de Tauro, a una distancia estimada de 140 pc (Elias 1978), y que ha sido objeto de numerosos estudios moleculares. Aunque es un núcleo que no contiene ninguna proto-estrella embebida en su interior, parece estar muy avanzada en su evolución hacia la formación estelar, debido al importante empobrecimiento de CO que presenta en la fase gas y la detección de velocidades del gas que indican que el colapso ya ha comenzado (Tafalla et al. 1998). Es por esto, que esta fuente se ha utilizado para probar los modelos teóricos de colapso de una nube (ver más adelante).

Las propiedades a gran escala de esta nube han sido estudiadas utilizando la emisión de CO (Snell 1981; Heyer et al. 1987). Esta fuente también ha formado parte de estudios en la emisión de líneas moleculares como CO (Myers et al. 1983), NH₃ (Myers & Benson 1983), HC₃N (Fuller & Myers 1993), DCO⁺ (Butner et al. 1995), y también en la emisión del polvo en el continuo milimétrico (Chini et al. 1984; Ward-Thompson et al. 1994). Beichman et al. (1986) no encontraron ninguna fuente IRAS asociada con L1544 y clasificaron esta condensación como “núcleo sin estrellas”. Sin embargo existe una fuente IRAS detectada únicamente a 100 μ m que se ha asociado a L1544, 05013+2505 (Parker 1988; Clark 1991). Una inspección

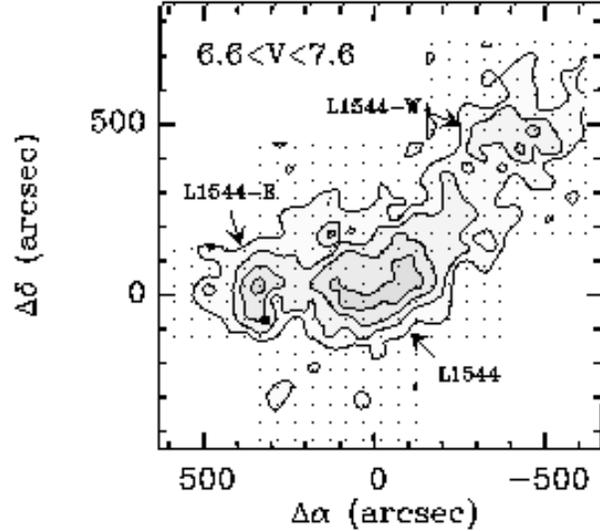


FIGURA 2.2: Mapa de la intensidad integrada en $C^{18}O$ $J = 1 - 0$, extraído de Tafalla et al. (1998). Los contornos corresponden a los valores 0.45, 0.90, ... $K \text{ km s}^{-1}$. La posición central es R.A.(J2000)= $05^{\text{h}}04^{\text{m}}18.14^{\text{s}}$, Decl.(J2000)= $+25^{\circ}11'07''.6$.

más detallada de las imágenes del satélite *IRAS* muestran que esta emisión en el continuo carece de una componente compacta y que se extiende en más de $5'$. Estos hechos sugieren que la emisión en el infrarrojo lejano proviene de la misma nube L1544 y no de un objeto embebido en su interior.

Tafalla et al. (1998), basándose en observaciones de las transiciones rotacionales $J = 1 - 0$ de ^{12}CO , ^{13}CO y $C^{18}O$, encontraron que L1544 tiene una forma alargada en la dirección este-oeste y norte-sureste y que se compone de tres condensaciones principales (ver Figura 2.2). El propio núcleo L1544 que se encuentra cerca de su posición central, L1544-E que parece estar asociado a una estrella T Tauri, y L1544-W que no está asociado a ninguna fuente estelar conocida. En cuanto a sus condiciones físicas, a partir de las líneas rotacionales de ^{13}CO y $C^{18}O$, Tafalla et al. (1998) obtuvieron una temperatura de excitación $T_{\text{ex}} = 12.5 \text{ K}$, similar al valor de 10 K obtenido a partir de CO por Myers et al. (1983) y al que calcularon Ungerechts et al. (1982) y Benson & Myers (1989) a partir de observaciones de NH_3 . La densidad disminuye rápidamente hacia el exterior, siguiendo una ley $r^{-1.5}$, la cual se obtuvo utilizando modelos de transferencia radiativa y las líneas de tres especies isotópicas del CO y dos del CS (Tafalla et al. 1998).

L1544 presenta una fuerte auto-absorción en las líneas de varios trazadores de gas denso, mientras que el CO y sus sustituciones isotópicas no son absorbidos en absoluto. Tafalla et al. (1998), a partir de los trazadores auto-absorbidos, midieron la velocidad relativa entre las capas interiores y exteriores del núcleo y encontraron un perfil global de caída de material hacia el interior. Comparando sus observaciones con los modelos de colapso gravitacional, encontraron que no se ajustaban a las teorías estándar. Por ejemplo, un modelo de colapso que comienza en el centro y se propaga hacia el exterior (el modelo de colapso de una esfera isotérmica, Shu 1977)

es inconsistente con la extensión de la absorción, que indica una edad avanzada, y la ausencia de un núcleo muy denso en el centro, lo que sugiere que la nube es joven. Recientemente, van der Tak et al. (2005) han utilizado los perfiles de velocidad de las líneas fundamentales de H_2D^+ , HC^{18}O^+ y N_2H^+ junto con modelos de transferencia radiativa para estudiar la temperatura, densidad y estructura en velocidades de L1544. Puesto que muchas de las moléculas neutras se congelan en los granos de polvo pero el N_2 permanece abundante a densidades $n(\text{H}_2) \geq 10^5 \text{ cm}^{-3}$, los iones como N_2H^+ y N_2D^+ son mejores trazadores de la parte más interior del núcleo pre-estelar. Sin embargo en el verdadero centro de la condensación, donde $n \geq 10^6 \text{ cm}^{-3}$, incluso estas especies desaparecen de la fase gas. Una de las pocas moléculas que no sufre este empobrecimiento es H_2D^+ . Estos autores encontraron que el perfil de doble pico de las líneas de H_2D^+ no se ajustaban a los modelos, como lo hacían las de los iones HC^{18}O^+ y N_2H^+ , y sugieren varias modificaciones del modelo referentes a condiciones en la parte más interior del núcleo. L1544 no es el único núcleo pre-estelar que presenta perfiles de auto-absorción en las líneas espectrales de los trazadores de gas denso (ver, p.ej., Lee et al. 1999), pero en ésta la profundidad de la absorción es mayor y fue el primero donde se detectó esta característica cinemática. Algunos núcleos con estrellas tienen espectros fuertemente auto-absorbidos, lo que los hace similares a L1544. En muchos casos la auto-absorción es tan profunda como en L1544 y estadísticamente, aparece en los objetos estelares más jóvenes (Gregersen et al. 1997; Mardones et al. 1997). Esto indica la relación del perfil de auto-absorción con el colapso gravitacional y el avanzado estado de evolución de L1544 hacia la formación de una o más proto-estrellas de pequeña masa.

2.2.3. L183

Esta condensación quiescente también conocida como L134N, forma parte del sistema de nubes interestelares L134-L183-L1778 que se encuentra a una distancia de 160 pc (Snell 1981) y a una elevada latitud galáctica, por lo que no se encuentra perturbada por emisión procedente de la Galaxia en la línea de visión. Es una fuente rica en emisión molecular y que no presenta fuentes infrarrojas en su interior, lo que hace pensar que L183 está o bien en un estado de evolución previo a la formación estelar, o es una nube en la que la presión interna evita el colapso y por tanto, la formación de estrellas. Se ha encontrado que L183 es una fuente donde muchas moléculas están extremadamente enriquecidas en deuterio. Tiné et al. (2000) realizaron mapas de la emisión de DCO^+ , N_2D^+ y NH_2D , y Roueff et al. (2000) detectaron por primera vez en esta nube ND_2H .

Dickens et al. (2000) realizaron un estudio del estado físico y químico de toda la nube, en el que cartografiaron la región en la emisión de varias moléculas. A partir de estos mapas y dependiendo de los máximos de emisión de las diferentes especies, identificaron cuatro posiciones importantes. La posición central (C) se corresponde con la máxima emisión de N_2H^+ y de CH_3OH , al oeste (W) alcanzan su máximo la emisión de SO y SO_2 , al norte (N) N_2H^+ , NH_3 y HC_3N , y al sur (S) existen máximos locales de SO , SO_2 y HCO^+ . Comparando las abundancias obtenidas para las distintas posiciones, concluyeron que la parte norte de la nube es más rica en especies consideradas de formación temprana, como las que contienen carbono y nitrógeno, mientras que al moverse al oeste aumentaba la abundancia de especies

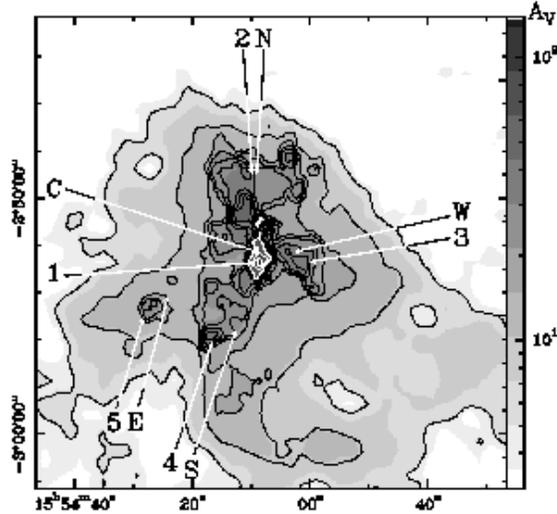


FIGURA 2.3: Mapa de la extinción visual en la región de L183, extraído de Pagani et al. (2004). Es una combinación de los mapas de extinción obtenidos en las bandas I , H y K' , y datos de ISOCAM. Los contornos toman valores desde $A_V = 5$ a 50 en pasos de 5 mag (contornos en negro), y de 60 a 120 en pasos de 30 mag (contornos en blanco). Las letras corresponden a los picos moleculares definidos en Dickens et al. (2000) y los números son los máximos en la emisión del polvo encontrados en Pagani et al. (2004). Las coordenadas vienen dadas respecto al equinocio J2000.

como SO y SO_2 consideradas tardías. Estos cuatro máximos moleculares parecen coincidir aproximadamente con máximos de la emisión del polvo (ver Figuras 2.3 y 2.4). La posición observada en este trabajo se encuentra entre sus posiciones C y W, cercana a la central. A partir de las transiciones de rotación-inversión $(J, K) = (1, 1)$ y $(2, 2)$ del NH_3 , Dickens et al. (2000) obtuvieron una temperatura cinética ~ 10 K, que no variaba con la posición. Para calcular la densidad del gas en diferentes posiciones en la nube utilizaron la aproximación LVG (ver Apéndice B) y varias transiciones de HC_3N , CS y N_2H^+ . La densidad media resultó ser $\sim 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ para todas las líneas de visión. Swade et al. (1989) calcularon una temperatura cinética de 12 K y una densidad en el pico de emisión de $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, a partir del análisis de la emisión del NH_3 y de los cálculos de equilibrio estadístico entre dos transiciones de HC_3N .

Pagani et al. (2004) realizaron mapas de emisión y absorción del polvo a varias longitudes de onda, desde $1 \mu\text{m}$ a 1.2 mm. En ellos identifican cinco máximos principales relacionados con picos en la emisión molecular, de los cuales dos se encuentran en contracción cuasi-estática y podrían llegar a formar estrellas. Para su máximo principal, que coincide con la posición C de Dickens et al. (2000) y que definen como núcleo pre-estelar, encontraron un perfil de densidad proporcional a r^{-1} hasta llegar a un radio interior ~ 4500 AU. Puesto que esta condensación no ha podido ser resuelta horizontalmente, sugieren la presencia de dos semillas pre-estelares. Allí encontraron un valor de la densidad que alcanza $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Para

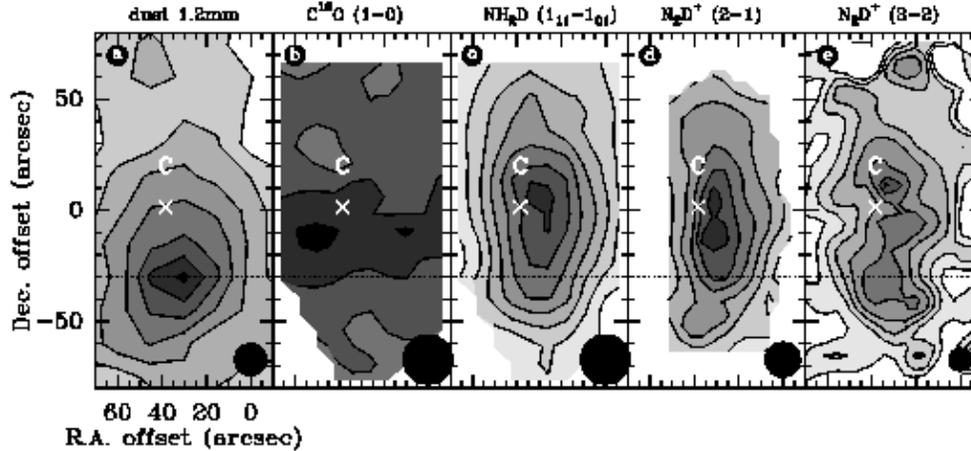


FIGURA 2.4: Mapas de la emisión del polvo a 1.2 mm y de la emisión de varias especies moleculares en la región central de L183 observados con el telescopio de 30-m de IRAM (extraído de Pagani et al. 2005). La cruz marca la posición C de Dickens et al. (2000), que se encuentra al norte del máximo de la emisión del polvo (ver panel a).

la posición norte (N), cuya masa y tamaño es similar a las del máximo central, concluyen que se encuentra en vías de formar un núcleo pre-estelar, y por tanto es más joven (o se encuentra menos evolucionado) que el núcleo C. Esto confirma lo encontrado por Dickens et al. (2000), aunque la utilización de la razón SO/CS como reloj químico ha suscitado cierta controversia puesto que depende también de las condiciones iniciales de la nube. Si esto es cierto, supone la primera detección de las fases intermedias entre un núcleo denso y uno pre-estelar.

2.2.4. TMC-1

TMC-1 es una nube densa y quiescente que forma parte de la nube Helies 2 en la región de Tauro, a unos 100 pc de distancia (Cernicharo & Guélin 1987). Es una de las nubes oscuras más estudiadas desde los comienzos de la radio astronomía, junto con L183. Aunque estas dos nubes tienen una temperatura cinética y una densidad similares, existen diferencias químicas entre ellas. L183 es más rica en moléculas que contienen oxígeno, mientras que TMC-1 es una fuente particularmente rica en moléculas complejas formadas por cadenas de carbono. Fue la primera nube oscura donde se detectó HC_3N (Morris et al. 1976), y también la molécula interestelar más pesada observada hasta el momento, HC_{11}N (Bell & Matthews 1985). Durante este trabajo se ha detectado por primera vez en el espacio el propileno, CH_2CHCH_3 , en la dirección de TMC-1 (ver Marcelino et al. 2007; y Cap. 5), demostrando de nuevo su riqueza y complejidad molecular. Aunque existe una fuente infrarroja asociada a la nube TMC-1 (IRAS 04381+2540), ésta se encuentra cercana al pico del amoniaco (NH_3). El pico de los cianopoliinos (CP, o también llamado núcleo D), la posición observada en este trabajo y que se encuentra a $\sim 7'$ al sureste, permanece como un

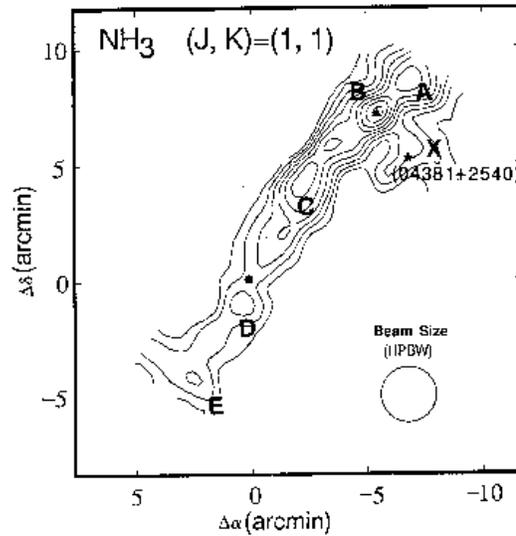


FIGURA 2.5: Mapa de la emisión integrada de NH_3 (J, K) = (1, 1) a lo largo de toda la nube TMC-1, en el rango de velocidades entre 4.85 y 6.85 km s^{-1} (Hirahara et al. 1992). El intervalo entre contornos y el contorno mínimo son de 0.2 K km s^{-1} . El origen del mapa corresponde al pico de los cianopoliinos (condensación D). También se muestran otros núcleos importantes dentro de la nube, como el pico de la emisión de NH_3 (B). La estrella marca la posición de la fuente infrarroja IRAS 04381+2540.

núcleo sin estrellas.

La nube entera tiene una forma alargada, formada por varias condensaciones, que se extiende más de $5' \times 15'$ en la dirección noroeste-sureste (ver Figura 2.5). Su estructura y composición química ha sido estudiada por Cernicharo et al. (1984a), Cernicharo & Guélin (1987), Hirahara et al. (1992), Pratap et al. (1997), Turner et al. (2000), y Dickens et al. (2001). La temperatura obtenida para este objeto varía entre 8.6 y 10 K a lo largo de la nube, lo que es consistente con un valor de unos 10 K , que es un valor típico para las nubes oscuras. Las estimaciones para la densidad de H_2 para el CP vaía entre $1 - 3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ (Bujarrabal et al. 1981), y $8 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ (Pratap et al. 1997). En TMC-1 se ha encontrado una fuente excelente para el estudio de la química en nubes oscuras en estado quiescente, aunque su riqueza en cadenas carbonadas como los cianopoliinos y los radicales C_nH , C_nN , y C_nO , parece ser una característica especial de esta nube. Un ejemplo de la importancia de esta fuente lo refleja el hecho de ser la primera nube oscura en la que se han realizado barridos espectrales (Kalenskii et al. 2004; Kaifu et al. 2004).

Los estudios realizados en la emisión molecular de varias especies sugieren que, aunque la temperatura y densidad son similares, existen diferencias químicas entre las condensaciones a lo largo de la nube. Por ejemplo, la abundancia de moléculas como CH_3CCH y HC_3N aumenta desde el pico de NH_3 al CP, mientras que la de SO disminuye en esa dirección. También se obtienen abundancias relativas en aumento para CS , C_2H y HCN , aunque en menor grado que para HC_3N y CH_3CCH . Estos gradientes de abundancias se pueden explicar a partir de un gradiente en el estado

químico evolutivo, puesto que las escalas de tiempo químicas de, por ejemplo el SO y NH₃, son mayores que para los acetilenos como CH₃CCH y HC₃N. De este modo, la posición CP sería un núcleo más joven que el pico del NH₃, lo que es consistente con la presencia de la fuente IRAS cerca de esta condensación (Fig. 2.5). Sin embargo, estas diferencias en evolución y edad para diferentes partes de la nube son aún motivo de controversia. También se ha sugerido que un gradiente en la densidad podría ser el causante de estas variaciones químicas, con el pico del amoniaco ligeramente más denso que el CP (Hirahara et al. 1992). Puesto que a mayor densidad las reacciones químicas se producen más rápidamente, una diferencia en la densidad podría reproducir el gradiente de abundancias. Algunos autores sugieren que la presencia de choques en la región, debido a la influencia de la proto-estrella cercana, podría contribuir a la formación de los cianopoliinos y otras cadenas de carbono complejas observadas en TMC-1, las cuales o bien sus abundancias no son reproducidas de manera satisfactoria por los modelos, o no tienen una vía de producción clara a partir únicamente de la química en fase gas (Hartquist et al. 2001; Markwick et al. 2000; Snyder et al. 2006). También la reciente detección del propileno, una especie compleja y altamente saturada que sorprende encontrar en una nube fría, no se explica fácilmente a partir de los modelos existentes de la química en nubes oscuras, en cierta parte porque nunca se había considerado en ellos. Sin embargo, si estas especies complejas se producen en los granos y son posteriormente evaporadas a la fase gas por influencia de choques, también deberíamos encontrar otras moléculas típicas de la química de choques y de núcleos de formación estelar, como por ejemplo CH₃OCH₃, CH₃OCOH, etc. Hartquist et al. (2001) sugieren que el flujo molecular responsable debería ser de baja velocidad, de unos pocos km s⁻¹, de forma que dicha química de altas temperaturas no se hubiera activado. Aún así, las líneas extremadamente delgadas que presenta esta nube indican una muy poca o nula actividad dinámica.

2.3. Observaciones

Las observaciones fueron realizadas entre Diciembre de 2002 y Febrero de 2007, utilizando el radio telescopio de 30-m de IRAM situado a 2900 m de altitud en Sierra Nevada (Granada, España). Hemos cubierto en total un rango espectral de 7 GHz en la banda de 3 mm, entre 85.9 y 93.1 GHz.

Para este trabajo se utilizaron dos receptores SIS simultáneamente, sintonizados a la misma frecuencia (pero con polarizaciones ortogonales) de manera que al sumar ambos espectros se reduce el tiempo de observación a la mitad. Estos receptores espectrales de líneas son mezcladores heterodinios en los que una señal de alta frecuencia (la procedente del cielo) se combina con la producida por el oscilador local (LO) para obtener una señal de menor frecuencia (llamada frecuencia intermedia, IF), que puede ser amplificada sin pérdida de información espectral. El elemento mezclador es una unión superconductor-aislante-superconductor (SIS). Al combinar las frecuencias intermedia y del oscilador local se puede obtener señal en doble banda (*double side band*, DSB), esto es, $f_{\text{cielo}} = f_{\text{LO}} \pm f_{\text{IF}}$, donde los signos + y - definen la banda superior (*upper side band*, USB) e inferior (*lower side band*, LSB) respectivamente. En nuestro caso, los receptores del 30-m operan normalmente en

banda simple (*single side band*, SSB), la inferior. El rechazo de la banda imagen –esto es, la atenuación que sufre la banda superior– a 3 mm es del orden de 24–30 dB, dependiendo de la frecuencia y del receptor.

Como espectrómetro utilizamos el autocorrelador VESPA², que proporciona diferentes configuraciones dependiendo del ancho de banda y la resolución espectral deseadas. En nuestro caso es importante obtener el máximo ancho de banda posible, pero también debemos tener en cuenta la resolución. Para las nubes oscuras, excepto en casos en que se produzca un ensachamiento de las líneas debido a la dinámica de la nube o a flujos moleculares procedentes de protoestrellas, las líneas esperadas tienen una anchura $\leq 1 \text{ km s}^{-1}$. Por tanto, la alta resolución espectral requerida nos condiciona el ancho de banda. Teniendo en cuenta lo anterior, la configuración óptima que nos proporciona una resolución espectral de 40 kHz ($\sim 0.12 \text{ km s}^{-1}$), corresponde a un ancho de banda de unos 315 MHz.

Todas las observaciones se realizaron utilizando conmutación en frecuencia (*frequency switching*). En este modo de observación el telescopio está continuamente apuntando a la fuente, de modo que todo el tiempo de observación se invierte por completo en la fuente y no es necesario una posición de referencia libre de emisión, lo que permite la observación de fuentes extensas sin necesidad de mover el telescopio grandes distancias. El espectro de referencia se obtiene desplazando la frecuencia del oscilador local (LO) una cierta cantidad determinada por el observador (*throw*), simétricamente a ambos lados de la frecuencia real de la transición. Este modo de observación únicamente puede utilizarse cuando existe poca densidad de líneas y éstas son estrechas. Hay que tener en cuenta también que al no utilizar posición de referencia en el cielo pueden aparecer líneas mesosféricas en el espectro observado, aunque éstas son fácilmente reconocibles al tener un perfil de línea muy característico y ser mucho más anchas e intensas que las líneas típicas procedentes de estas regiones. Otro problema que presenta este modo de observación es la calidad de la línea de base (ver Figura 2.6). Ésta depende, entre otras cosas, del receptor utilizado, la frecuencia observada y la diferencia en frecuencia entre las dos fases. Un valor conveniente para la diferencia en frecuencia entre ambas fases ($2 \times \textit{throw}$) es de 7.2 MHz, el cual elimina la componente estacionaria de la onda producida por reflexiones sucesivas entre la superficie del subreflector y los receptores (ver, Thum et al. 1995). Sin embargo, únicamente en los casos en los que esperábamos líneas con estructura fina y/o hiperfina se utilizó este valor. Para el resto de frecuencias utilizamos un cambio en frecuencia más pequeño, de 1.8 MHz para todas las fuentes excepto para B1 que muestra unas líneas más anchas, en la que utilizamos 2.5 MHz. De este modo, aunque nos arriesgamos a obtener una peor línea de base espectral, evitamos que la línea virtual en absorción que se obtiene en el espectro de referencia se encuentre en la posición de otra línea.

Los tiempos de integración sobre la fuente fueron típicamente ~ 1.5 horas, obteniendo así un rms de unos 8–10 mK en temperatura de brillo del haz principal (T_{MB}) para una resolución espectral de 40 kHz. Este bajo nivel de ruido es necesario para poder detectar líneas débiles y posibles transiciones no identificadas. Durante las observaciones, el apuntado del telescopio y el estado del foco se comprobaron cada 1.5 y 3 horas respectivamente, con observaciones en el continuo de fuentes intensas

²Versatile Spectrometer and Polarimetry Analyser

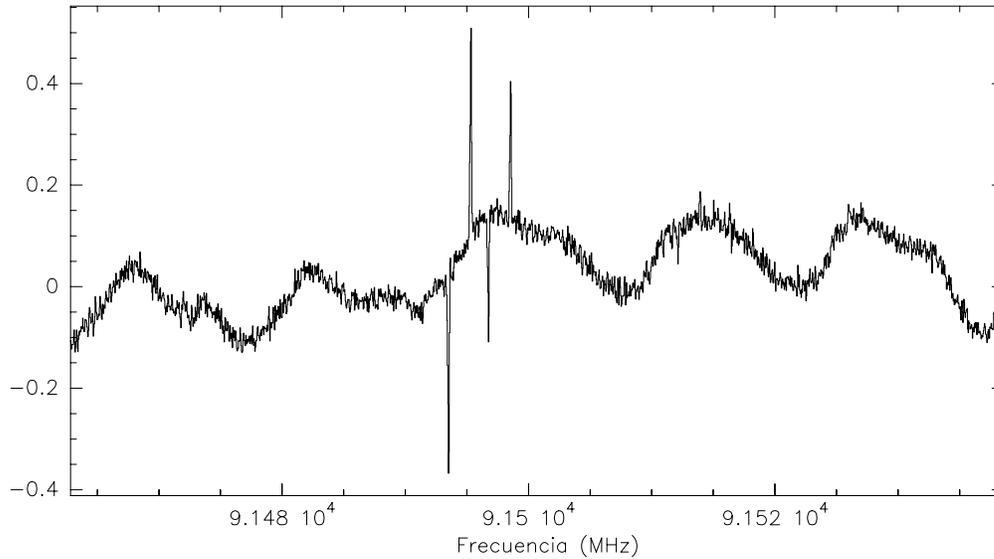


FIGURA 2.6: Espectro obtenido en el modo de conmutación en frecuencia antes de su reducción. En este ejemplo se aprecia la baja calidad de la línea de base, y se muestran dos líneas donde se ven ambas componentes positiva y negativa, resultado del modo de observación. En concreto esta observación corresponde a la fuente TMC-1 y se observó con un *throw* en frecuencia de 1.8 MHz.

y próximas a las de nuestro estudio. De este modo, el error en la puntería rara vez superó los $3''$.

El espectro que se obtiene se encuentra calibrado en escala de temperatura de antena (T_A^* , ver p.ej., Rohlfs & Wilson 1986). Ésta representa la temperatura corregida de atenuación atmosférica de una fuente equivalente que llenase los 2π estereoradianes del patrón del haz frontal del telescopio. Para obtener esta escala de intensidades, el telescopio posee un sistema de calibración que utiliza dos absorbentes a diferentes temperaturas y un código de atmósfera terrestre (Cernicharo 1985; Pardo et al. 2001) que, en función de la presión y temperatura locales, nos proporciona el número de cuentas del cielo (además de la opacidad y la columna de vapor de agua en esa dirección). Dichos absorbentes, llamados carga fría y caliente, se representan en la práctica por la temperatura del nitrógeno líquido medida en cada receptor a la frecuencia observada, y por la temperatura ambiente medida en la cabina de receptores. Para todos los receptores, la temperatura de la carga fría debe ser similar a la del cielo. La calibración se realiza en base a estas tres fuentes (cielo, carga fría y carga caliente), y esencialmente lo que hace es relacionar la diferencia de cuentas entre la fuente y el cielo con la que existe entre la carga caliente y el cielo.

Para obtener una escala de intensidades en temperatura de brillo del haz principal (T_{MB}), que es la temperatura de brillo de una fuente equivalente que llenase el haz principal, se utiliza la expresión

$$T_{MB} = \frac{F_{\text{eff}}}{B_{\text{eff}}} T_A^*, \quad (2.1)$$

donde F_{eff} y B_{eff} son las eficiencias frontal y de haz principal de la antena respectivamente. La eficiencia frontal del telescopio de 30-m para los receptores de 3 mm es $F_{\text{eff}} = 0.95$, mientras que B_{eff} depende de la frecuencia, al igual que el tamaño del haz principal del telescopio (θ). Estas dos cantidades se pueden obtener a partir de las expresiones

$$\theta = \frac{2460''}{\nu(\text{GHz})}, B_{\text{eff}} = 1.2\epsilon \exp\left[-\frac{4\pi R\sigma}{\lambda^2}\right] \quad (2.2)$$

donde $R\sigma$ está relacionado con la óptica del telescopio, ϵ es la eficiencia de apertura de un telescopio perfecto, y λ la longitud de onda en mm. Para el caso del 30-m estos parámetros toman los valores $R\sigma = 0.07$ y $\epsilon = 0.69$. A las frecuencias observadas (85.9 – 93.1 GHz), el haz abarcado es de 29'' a 26'', y la eficiencia es 0.78 y 0.77 respectivamente.

También es importante tener en cuenta las condiciones en las que observamos (opacidad de la atmósfera, cantidad de vapor de agua en la línea de visión, etc.), puesto que determinan el ruido procedente de la atmósfera y también el tiempo de integración necesario para obtener una relación señal/ruido satisfactoria. Este proyecto se observó principalmente bajo unas condiciones típicas de verano (vapor de agua ~ 5 mm y opacidad de la atmósfera ≤ 0.1 a 3 mm). En estas condiciones la temperatura de sistema, relacionada con el ruido procedente de la atmósfera y de los receptores, fue típicamente ~ 100 –300 K.

2.4. Resultados

Dentro del rango espectral observado hemos detectado un total de 20 especies moleculares y 17 isótopos, además de varias líneas no identificadas. La mayoría de las especies observadas son triatómicas, pero hemos detectado moléculas de hasta 9 átomos. La Tabla 2.3 muestra las transiciones observadas, que fueron identificadas utilizando los catálogos moleculares de JPL (*Jet Propulsion Laboratory*, Pickett et al. 1998)³, CDMS (*Cologne Database for Molecular Spectroscopy*, Müller et al. 2001, 2005)⁴, NIST (*National Institute of Standards and Technology*, Lovas 1992, 2004)⁵, y el catálogo de líneas desarrollado y mantenido en el Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR-IEM-CSIC, Cernicharo et al. 2000). Para esta identificación se tuvo en cuenta, además de la coincidencia en frecuencia, la energía del estado superior de la transición, que para el caso de nubes oscuras ha de ser un valor pequeño.

La figura 2.7 muestra el barrido completo en todas las fuentes, y las Figuras 2.8-2.14 muestran en detalle los espectros observados, donde se señalan algunas de las líneas detectadas. Los espectros fueron reducidos y analizados utilizando el programa CLASS (del inglés *Continuum and Line Analysis Single-dish Software*), que forma parte del paquete GILDAS⁶ para la reducción de datos radio astronómicos desarrollado en IRAM. La Tabla 2.4 contiene los parámetros de las líneas observadas, obtenidos a partir de ajustes gaussianos, en cada una de las fuentes.

³<http://spec.jpl.nasa.gov/>

⁴<http://www.ph1.uni-koeln.de/vorhersagen/>

⁵<http://physics.nist.gov/PhysRefData/>

⁶<http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS>

Entre las especies observadas encontramos moléculas típicas para nubes oscuras, como CS, HCN, HNC, y otras menos comunes como algunas sustituciones isotópicas y deuteradas, HCO, HNCO, y otras especies que no esperábamos encontrar en este tipo de fuentes como son HCOOCH₃ o CH₂CHCH₃. En la Sección 2.5 se describen en detalle las características de las especies observadas. De las cuatro fuentes observadas las químicamente más ricas son B1 y TMC-1, donde hemos identificado 27 y 30 especies diferentes respectivamente, incluyendo isótopos. Estas son también las fuentes donde un mayor número de líneas sin identificar hemos observado, y en las cuales hemos encontrado dos nuevas especies detectadas por primera vez en el medio interestelar durante este trabajo (ver Capítulos 4 y 5).

En B1, que es la fuente que muestra las líneas más intensas, se han observado 68 líneas (incluyendo las no identificadas), que en los 7.2 GHz observados equivale a una densidad de 9.4 líneas/GHz. Las líneas más intensas proceden de especies como HNC, H¹³CO⁺, NH₂D, SO y HCN, mientras que las moléculas no detectadas o que muestran líneas débiles son típicamente cadenas carbonadas. En esta fuente también se han detectado algunas moléculas interesantes como SiO, HCOOH, y HCOOCH₃, que son especies típicas de nubes calientes y regiones de formación estelar. También presenta la mayor intensidad en las líneas procedentes de especies deuteradas, y esta riqueza en deuterio se ha demostrado con la primera detección de D₂CS en el espacio (ver Capítulo 4). Otra característica destacable de B1 respecto al resto de fuentes, es la mayor anchura de sus líneas, lo que indica una mayor actividad dinámica.

El mayor número de líneas se ha observado en TMC-1, con 71 líneas (9.9 líneas/GHz). Esta fuente muestra la mayor intensidad de línea en especies carbonadas, en particular la línea más intensa en esta fuente procede del HC₃N. Otras especies que muestran líneas intensas son HNC, HCN, CCH y H¹³CO⁺, mientras que especies como, por ejemplo, SO, C₃O y HDCS muestran líneas más débiles. Particularmente interesante ha sido la identificación de varias transiciones procedentes del propileno, CH₂CHCH₃, el hidrocarburo más saturado (hidrogenado) detectado en el medio interestelar por métodos radio astronómicos (ver Capítulo 5).

L1544 presenta una química similar a TMC-1 en cuanto a riqueza de cadenas carbonadas, aunque se diferencia de ésta en la presencia de algunas especies deuteradas. Hemos detectado 53 líneas procedentes de 26 especies diferentes y 9 líneas sin identificar, que en los 6.1 GHz observados nos da una densidad de líneas en esta fuente de 10.2 líneas/GHz.

Por último, L183 muestra en general las líneas más débiles y el menor número de especies observadas. En esta fuente se han detectado 40 líneas correspondientes a 19 moléculas diferentes y 7 líneas no identificadas (7.7 líneas/GHz), siendo las más intensas NH₂D, HCO⁺, HNC, y SO. Al igual que en B1, las especies carbonadas muestran las líneas más débiles, indicando una mayor riqueza en oxígeno y en especies deuteradas que en carbono.

TABLA 2.3: Transiciones identificadas dentro del rango espectral observado.

Especie	Transición	ν (MHz)	E_{sup} (K)	μ (D)
^{13}CS	$J = 2 - 1$	92494.308	6.66	1.96
SO	$N_J = 2_2 - 1_1$	86093.950	19.32	1.55
SiO	$J = 2 - 1, v = 0$	86846.960	6.25	3.10
CCH	$N = 1 - 0, J = 3/2 - 1/2, F = 1 - 1$	87284.156	4.19	0.80
	$N = 1 - 0, J = 3/2 - 1/2, F = 2 - 1$	87316.925	4.19	
	$N = 1 - 0, J = 3/2 - 1/2, F = 1 - 0$	87328.624	4.19	
	$N = 1 - 0, J = 1/2 - 1/2, F = 1 - 1$	87402.004	4.20	
	$N = 1 - 0, J = 1/2 - 1/2, F = 0 - 1$	87407.165	4.20	
	$N = 1 - 0, J = 1/2 - 1/2, F = 1 - 0$	87446.512	4.20	
CCS	$N_J = 6_7 - 5_6$	86181.391	23.35	2.90
	$N_J = 7_7 - 6_6$	90686.381	26.12	
CC ^{34}S	$N_J = 7_8 - 6_7$	91913.529	19.49	2.90
HCN	$J = 1 - 0, F = 1 - 1$	88630.416	4.13	2.98
	$J = 1 - 0, F = 2 - 1$	88631.847		
	$J = 1 - 0, F = 0 - 1$	88633.936		
H ^{13}CN	$J = 1 - 0, F = 1 - 1$	86338.733	4.13	2.98
	$J = 1 - 0, F = 2 - 1$	86340.163		
	$J = 1 - 0, F = 0 - 1$	86342.251		
HC ^{15}N	$J = 1 - 0$	86054.961	4.13	2.98
HCO	$N_{K-1K+1} = 1_{01} - 0_{00}, J = 3/2 - 1/2,$ $F = 2 - 1$	86670.760	4.18	1.36; 0.70
	$N_{K-1K+1} = 1_{01} - 0_{00}, J = 3/2 - 1/2,$ $F = 1 - 0$	86708.360	4.16	
	$N_{K-1K+1} = 1_{01} - 0_{00}, J = 1/2 - 1/2,$ $F = 1 - 1$	86777.460	4.18	
	$N_{K-1K+1} = 1_{01} - 0_{00}, J = 1/2 - 1/2,$ $F = 0 - 1$	86805.780	4.18	
HCO $^+$	$J = 1 - 0$	89188.523	4.16	3.89
H $^{13}\text{CO}^+$	$J = 1 - 0$	86754.330	4.16	3.89
HC $^{17}\text{O}^+$	$J = 1 - 0, F = 3/2 - 5/2$	87056.966	4.16	3.89
	$J = 1 - 0, F = 7/2 - 5/2$	87057.258		
	$J = 1 - 0, F = 5/2 - 5/2$	87058.294		
HNC	$J = 1 - 0$	90663.593	4.18	3.05
HN ^{13}C	$J = 1 - 0$	87090.850	4.18	2.70
H ^{15}NC	$J = 1 - 0$	88865.715	4.26	2.70
c-C $_3\text{H}$	$N_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{11}, J = 5/2 - 3/2,$ $F = 3 - 2$	91494.349	4.39	2.40
	$N_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{11}, J = 5/2 - 3/2,$ $F = 2 - 1$	91497.608	4.39	
	$N_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{11}, J = 5/2 - 3/2,$ $F = 2 - 2$	91512.969	4.39	
	$N_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{11}, J = 3/2 - 1/2,$ $F = 1 - 1$	91681.696	4.40	
	$N_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{11}, J = 3/2 - 1/2,$ $F = 1 - 0$	91692.752	4.40	

TABLA 2.3: (Continuación).

Especie	Transición	ν (MHz)	E_{sup} (K)	μ (D)
c-C ₃ H	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 2_{12} - 1_{11}$, $J = 3/2 - 1/2, F = 2 - 1$	91699.471	4.40	
	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 2_{12} - 1_{11}$, $J = 3/2 - 3/2, F = 1 - 1$	91747.372	4.40	
	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 2_{12} - 1_{11}$, $J = 3/2 - 3/2, F = 2 - 2$	91780.518	4.40	
C ₃ N	$N = 9 - 8, J = 19/2 - 17/2$	89045.592	21.37	2.20
	$N = 9 - 8, J = 17/2 - 15/2$	89064.352	21.38	
CCCO	$J = 9 - 8$	86593.834	20.78	2.39
D ₂ CS	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 3_{12} - 2_{11}$	87302.662	14.72	1.66
HDCS	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 3_{13} - 2_{12}$	91171.086	17.74	1.65
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 3_{03} - 2_{02}$	92981.658	8.93	
HNCO	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 4_{04} - 3_{03}$	87925.252	10.55	1.60; 1.35
NH ₂ D (<i>orto</i>)	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 1_{11} - 1_{01}, F = 0 - 1$...	85924.789	20.68	1.46
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 1_{11} - 1_{01}, F = 2 - 1$...	85925.703		
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 1_{11} - 1_{01}, F = 2 - 2$...	85926.278		
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 1_{11} - 1_{01}, F = 1 - 2$...	85926.885		
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 1_{11} - 1_{01}, F = 1 - 0$...	85927.723		
H ¹³ CCCN	$J = 10 - 9$	88166.806	23.27	3.72
HC ¹³ CCN	$J = 10 - 9$	90593.059	23.91	3.72
HCC ¹³ CN	$J = 10 - 9$	90601.777	23.92	3.72
HCCNC	$J = 9 - 8$	89419.300	21.46	2.93
HCOOH	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 4_{14} - 3_{13}$	86546.185	13.57	1.40; 0.26
	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 4_{04} - 3_{03}$	89579.172	10.76	
	$N_{K_{-1}K_{+1}} = 4_{22} - 3_{21}$	90164.628	23.53	
CH ₃ CN	$J_K = 5_1 - 4_1$	91985.284	20.39	3.92
	$J_K = 5_0 - 4_0$	91987.054	13.24	
CH ₂ DOH	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 2_{02} - 1_{01} e0$	89407.910	6.48	0.88; 1.44
CH ₃ OD	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 2_{02} - 1_{01} A^+$	90705.770	6.48	0.83; 1.49
HC ₃ NH ⁺	$J = 10 - 9$	86578.136	22.85	1.61
CH ₂ CHCN	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 9_{18} - 8_{17}$	87312.827	23.13	3.82; 0.89
HCOOCH ₃ - A	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 8_{18} - 7_{17}$	89316.648	20.14	1.63; 0.68
HCOOCH ₃ - E	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 8_{18} - 7_{17}$	89314.618	20.16	1.63; 0.68
CH ₂ CHCH ₃ - A	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{05} - 4_{04}$	86651.594	12.5	0.36
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{24} - 4_{23}$	87134.566	19.8	
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{23} - 4_{22}$	87677.584	19.8	
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{14} - 4_{13}$	89998.179	14.8	
CH ₂ CHCH ₃ - E	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{05} - 4_{04}$	86650.873	12.5	
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{24} - 4_{23}$	87137.941	19.8	
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{23} - 4_{22}$	87673.663	19.8	
	$J_{K_{-1}K_{+1}} = 5_{14} - 4_{13}$	89997.200	14.8	

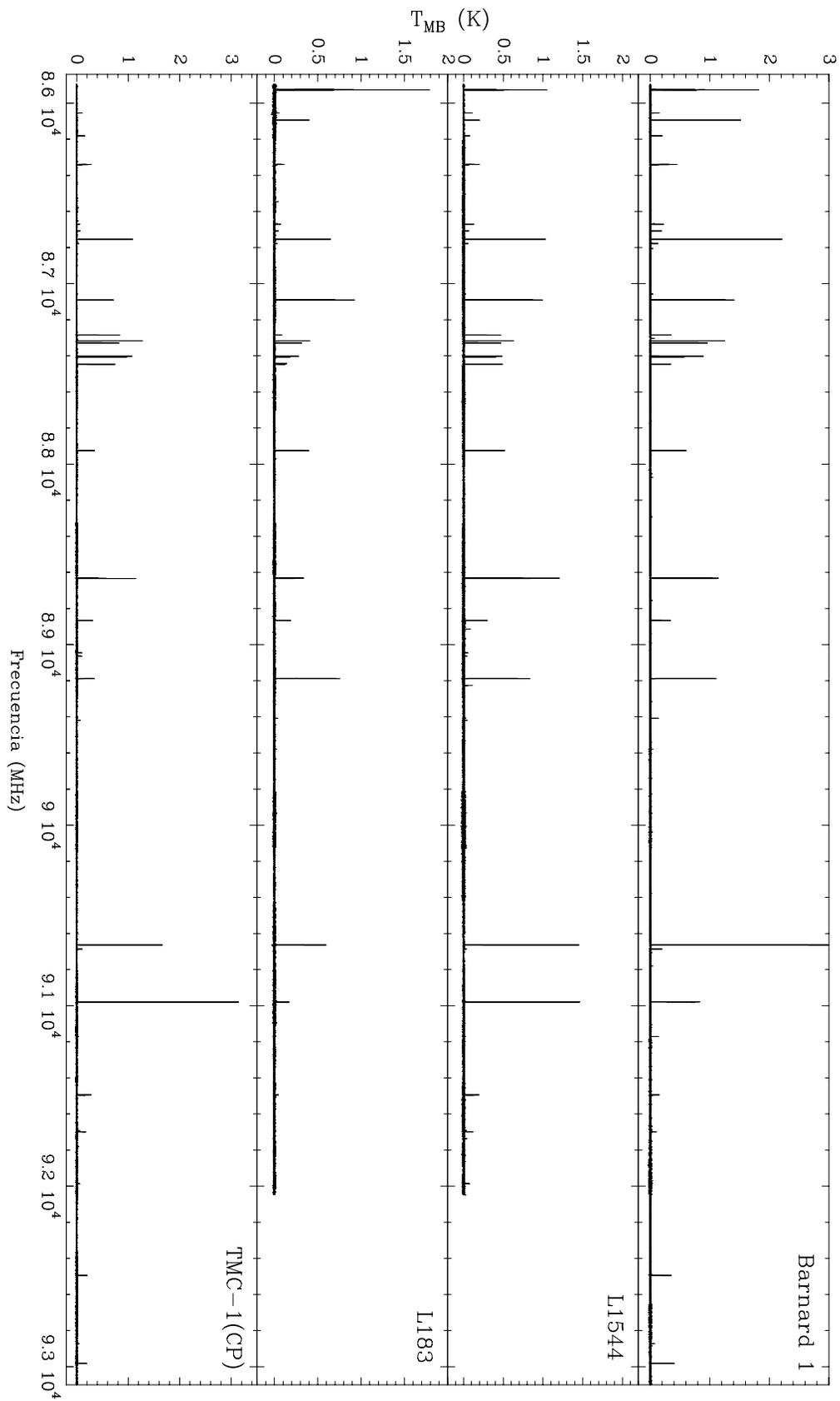


FIGURA 2.7: Barrido espectral observado entre 85.9 y 93.1 GHz para todas las fuentes. En el caso de L1544 y L183 sólo se observó entre 85.9 y 92 GHz.

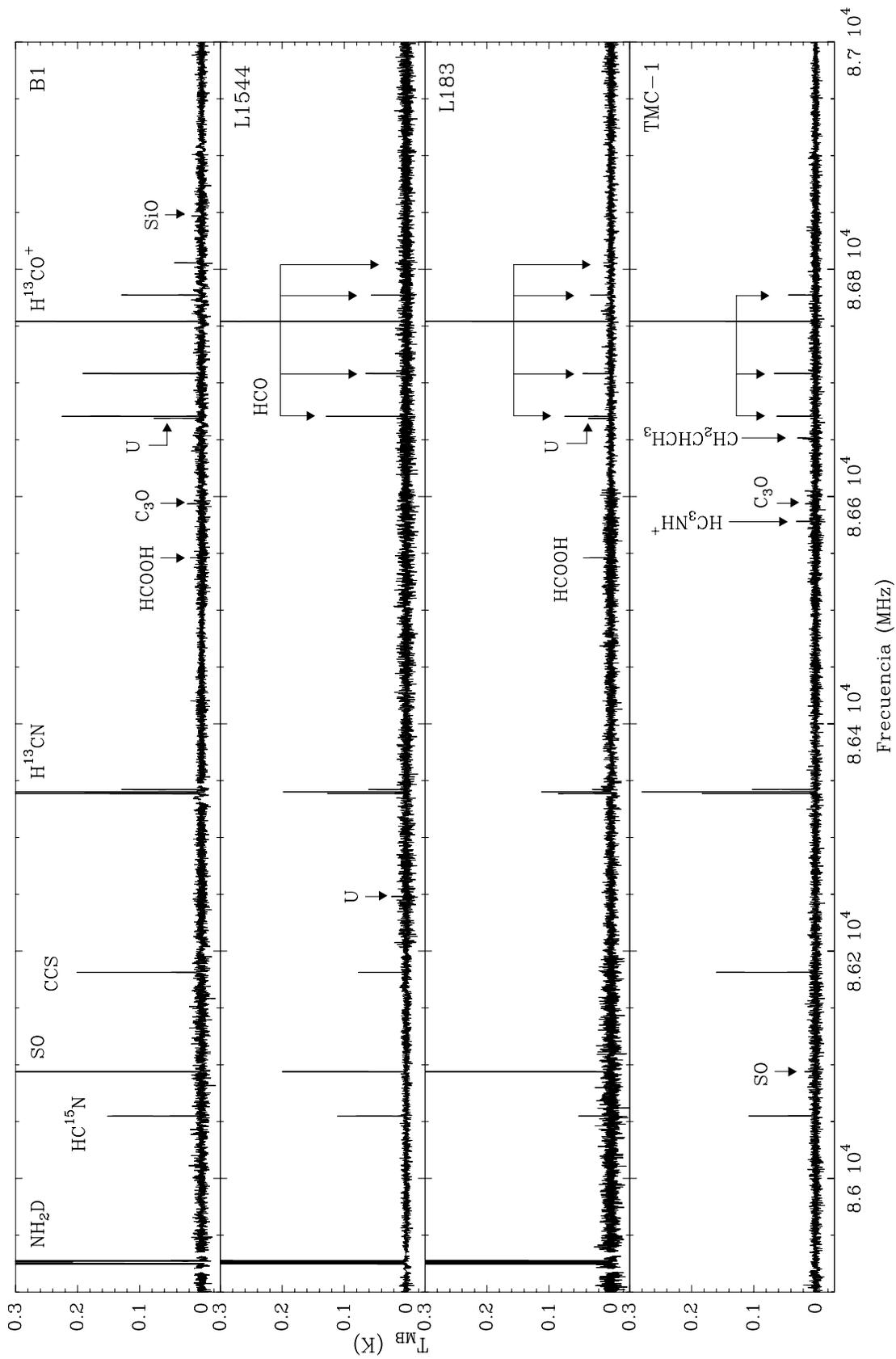


FIGURA 2.8: Espectro observado entre 85.9 y 87 GHz.

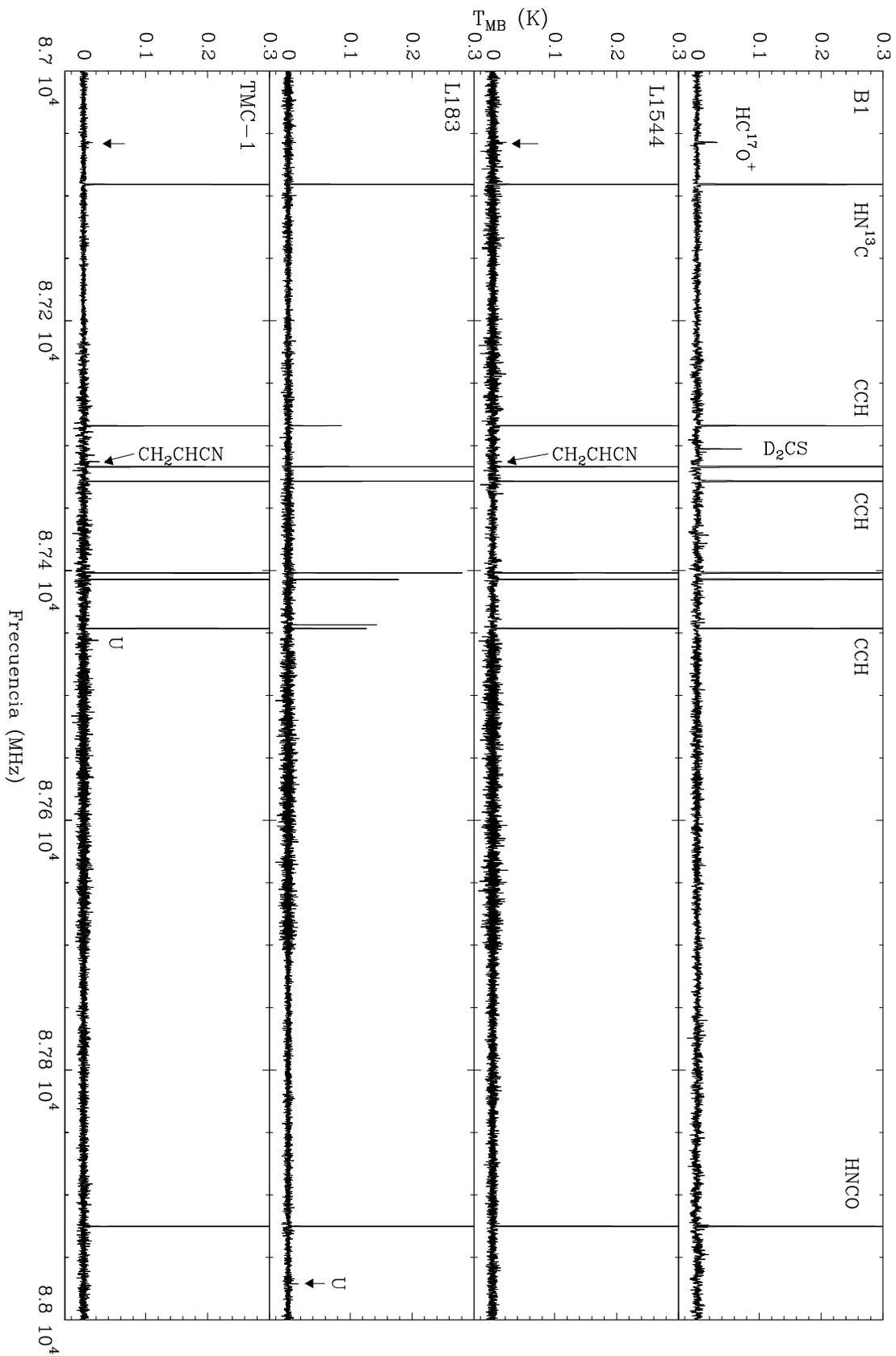


FIGURA 2.9: Espectro observado entre 87 y 88 GHz.

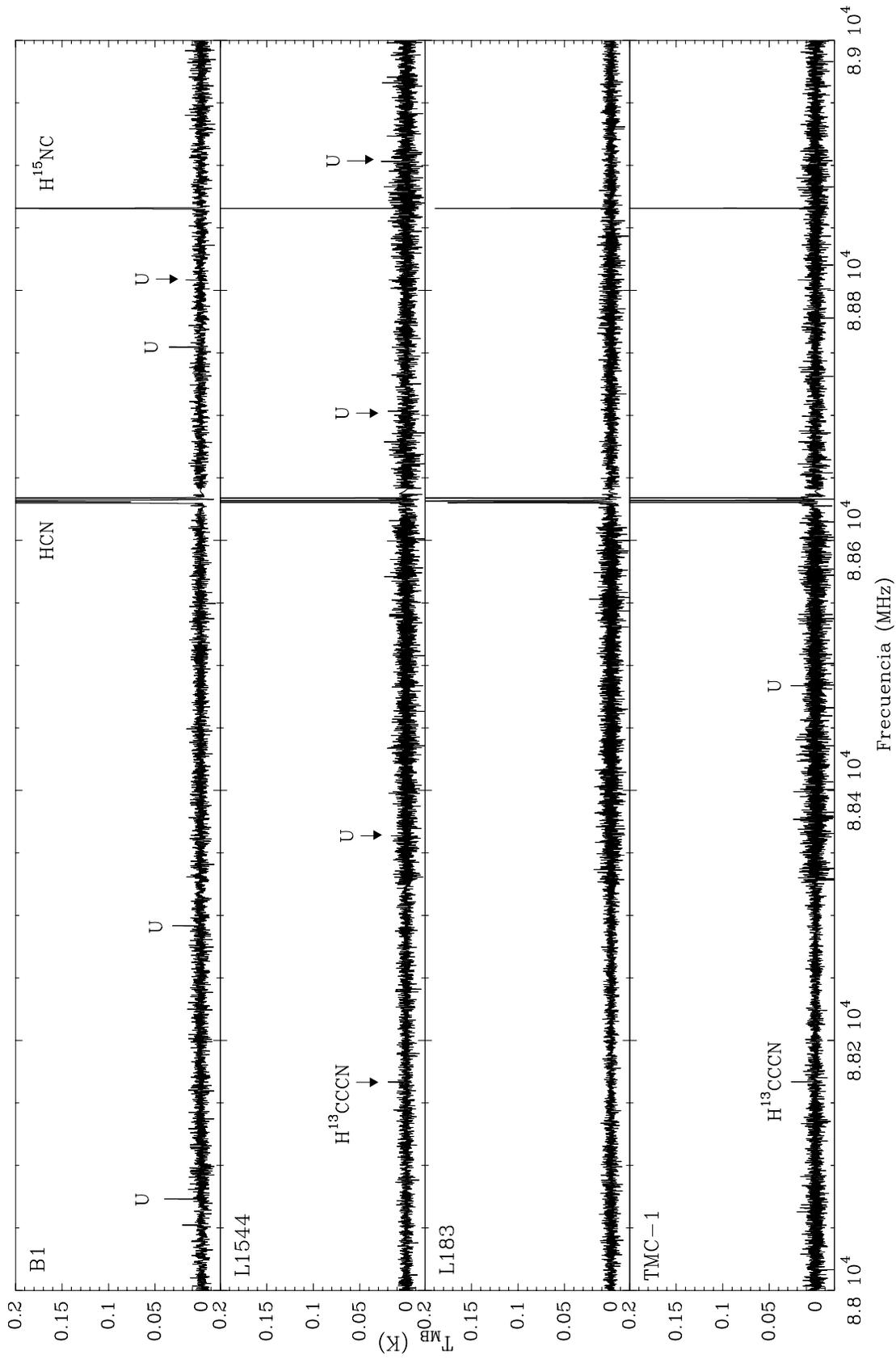


FIGURA 2.10: Espectro observado entre 88 y 89 GHz.

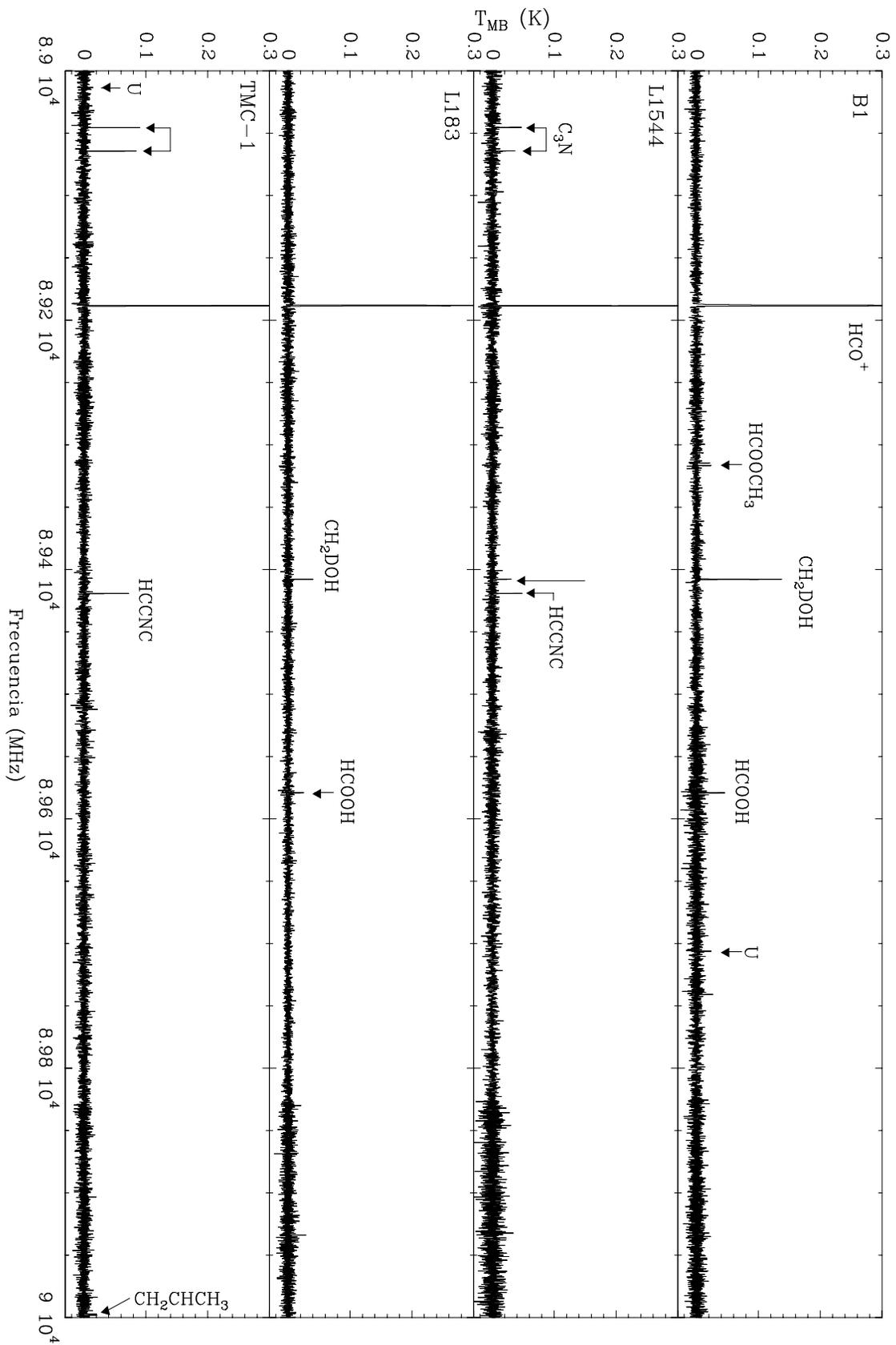


FIGURA 2.11: Espectro observado entre 89 y 90 GHz.

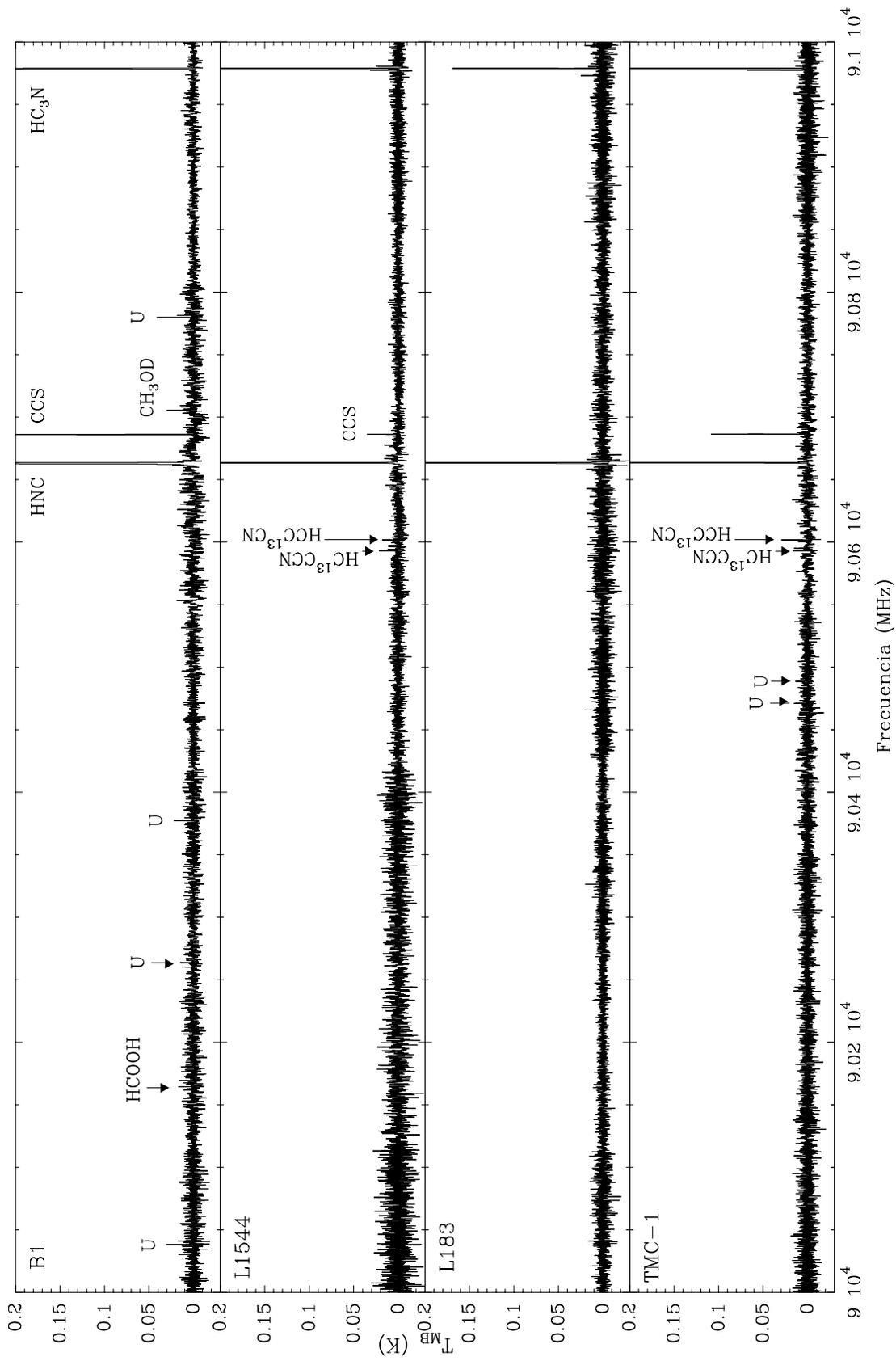


FIGURA 2.12: Espectro observado entre 90 y 91 GHz.

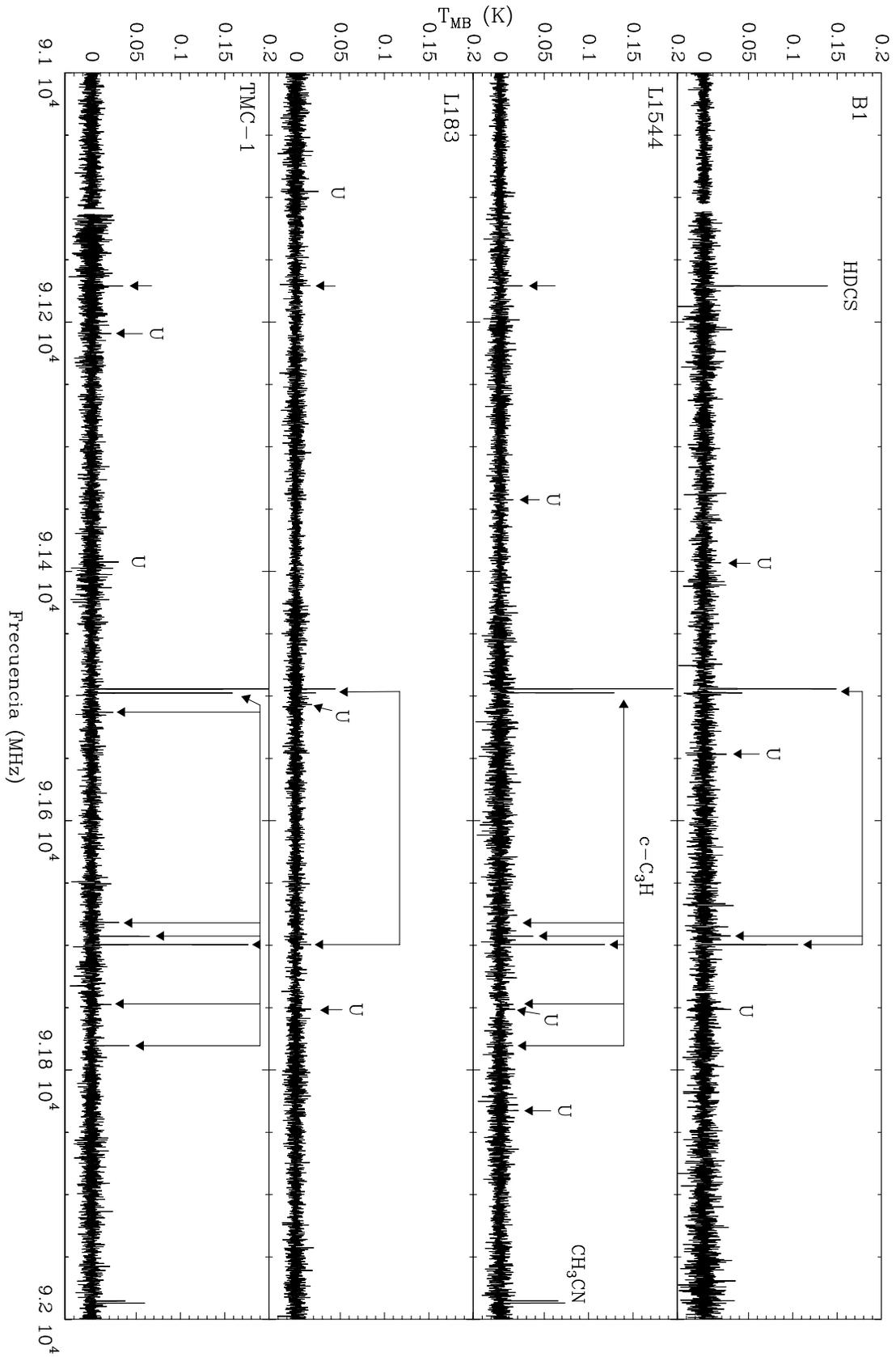


FIGURA 2.13: Espectro observado entre 91 y 92 GHz.

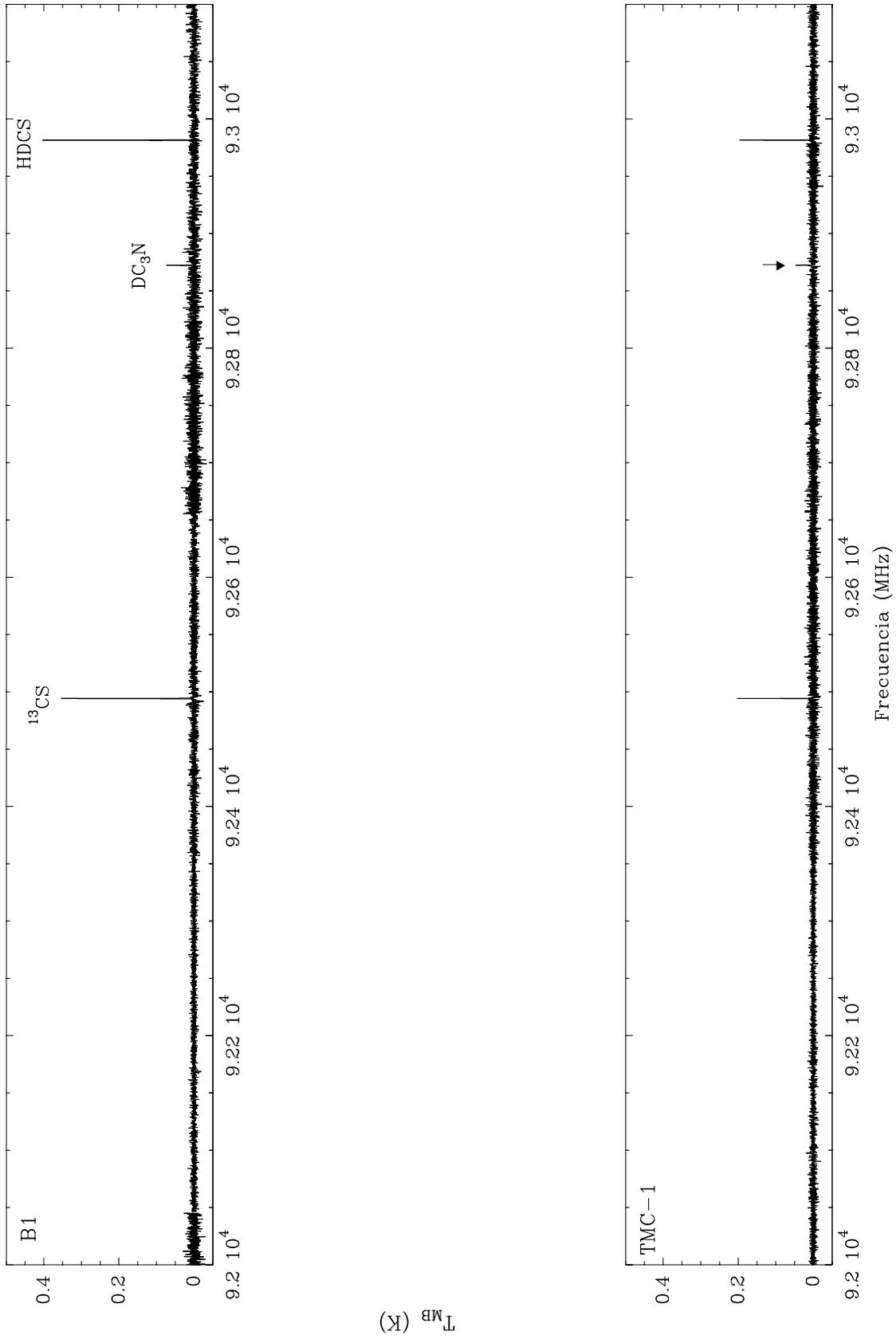


FIGURA 2.14: Espectro observado entre 92 y 93.1 GHz.

TABLA 2.4: Parámetros de las líneas observadas en las cuatro fuentes, obtenidos a partir de ajustes gaussianos.

Frecuencia (MHz)	Molécula	Barnard I			L1544			L183			TMC-1		
		V_{LSR} (km s^{-1})	Δv (km s^{-1})	T_{MB} (K)	V_{LSR} (km s^{-1})	Δv (km s^{-1})	T_{MB} (K)	V_{LSR} (km s^{-1})	Δv (km s^{-1})	T_{MB} (K)	V_{LSR} (km s^{-1})	Δv (km s^{-1})	T_{MB} (K)
85924.789	<i>o</i> -NH ₂ D	6.825	0.835	0.928(8)	7.250	0.464	0.792(5)	2.569	0.570	0.768(9)	5.797	0.563	0.160(6)
85925.703	<i>o</i> -NH ₂ D	6.715	0.897	1.134(8)	7.148	0.483	1.014(5)	2.462	0.580	1.015(8)	5.917	0.496	0.030(7)
85926.278	<i>o</i> -NH ₂ D	6.758	1.094	2.074(8)	7.178	0.647	1.591(4)	2.496	0.692	2.019(8)	5.698	0.540	0.235(7)
85926.885	<i>o</i> -NH ₂ D	6.800	0.879	1.087(8)	7.224	0.475	0.901(4)	2.536	0.577	0.918(9)	5.768	0.547	0.285(7)
85927.723	<i>o</i> -NH ₂ D	6.691	0.839	0.986(7)	7.118	0.456	0.877(4)	2.422	0.560	0.830(9)	5.764	0.581	0.437(7)
86054.961	<i>o</i> -NH ₂ D	6.644	1.002	0.182(8)	7.181	0.514	0.173(5)	2.362	0.442	0.066(10)	5.777	0.570	0.157(6)
86093.950	HC ¹⁵ N	6.533	0.805	1.843(9)	7.173	0.373	0.355(5)	2.387	0.599	0.477(9)	5.681	0.608	0.076(5)
86181.391	SO	6.524	0.871	0.235(8)	7.186	0.423	0.116(5)	no detectada	no detectada	no detectada	5.522	0.622	1.481(6)
86248.146	CCS	no detectada	no detectada	no detectada	7.193	0.965	0.036(9)	no detectada	no detectada	no detectada	5.690	0.455	0.048(8)
86338.733	U86248	6.613	1.077	0.357(6)	7.157	0.458	0.250(9)	2.379	0.638	0.133(9)	6.218	0.342	0.035(7)
86340.163	H ¹³ CN	6.619	1.136	0.497(7)	7.136	0.511	0.338(9)	2.364	0.606	0.171(8)	5.861	0.608	0.076(5)
86342.251	H ¹³ CN	6.615	0.944	0.154(7)	7.140	0.456	0.118(9)	2.334	0.452	0.050(9)	5.849	0.639	0.090(5)
86546.185	H ¹³ CN	6.709	0.634	0.028(7)	no detectada	no detectada	no detectada	2.415	0.698	0.055(7)	5.925	0.622	1.481(6)
86578.136	HCOOH	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada
86593.687	HC ₃ NH ⁺	6.429	0.605	0.041(9)	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	5.690	0.455	0.048(8)
86650.873	COCO	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	6.218	0.342	0.035(7)
86651.566	CH ₂ CHCH ₃ - E	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	5.68	0.35	0.044(4)
86668.884	CH ₂ CHCH ₃ - A	6.700	0.753	0.086(5)	no detectada	no detectada	no detectada	2.398	0.419	0.054(6)	5.52	0.62	0.041(4)
86670.760	U86668	6.741	1.004	0.243(5)	no detectada	no detectada	no detectada	2.566	0.368	0.124(5)	5.861	0.608	0.076(5)
86708.360	HCO	6.782	1.159	0.194(5)	7.409	0.448	0.104(8)	2.639	0.458	0.080(5)	5.849	0.639	0.090(5)
86754.330	HCO	6.494	0.749	2.119(5)	7.298	0.523	1.176(7)	2.570	0.561	0.834(7)	5.925	0.622	1.481(6)
	H ¹³ CO ⁺	7.220	0.960	1.494	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada
86777.460	HCO	6.775	1.051	0.143(5)	7.310	0.369	0.094(7)	2.535	0.353	0.074(5)	5.851	0.717	0.050(4)
86805.780	HCO	6.769	0.819	0.047(5)	7.430	0.294	0.037(7)	2.694	0.527	0.018(5)	no detectada	no detectada	no detectada
86846.960	HCO	6.228	0.853	0.022(5)	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada
87056.966	SiO	6.604	1.255	0.038(5)	no detectada	no detectada	no detectada	2.654	0.722	0.015(7)	5.789	0.461	0.023(5)
87057.258	HC ¹⁷ O ⁺	6.522	0.820	0.049(5)	7.241	0.371	0.033(6)	2.386	0.396	0.033(6)	5.721	0.378	0.033(5)
87058.294	HC ¹⁷ O ⁺	6.748	0.864	0.021(5)	7.196	0.401	0.028(7)	no detectada	no detectada	no detectada	5.791	0.363	0.019(5)
87090.850	HN ¹³ C	6.789	1.173	1.530(6)	7.256	0.797	1.132(9)	2.461	0.557	1.093(7)	5.906	0.779	0.921(5)
87134.576	CH ₂ CHCH ₃ - A	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	5.68	0.32	0.016(3)
87137.941	CH ₂ CHCH ₃ - E	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	5.76	0.42	0.024(3)
87154.680	U87154	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	no detectada	6.004	0.353	0.022(4)

^aNota. — Los números entre paréntesis representan la incertidumbre a 1 σ para la última cifra.

TABLA 2.4: (Continuación).

Frecuencia (MHz)	Molécula	Barnard 1			L1544			L183			TMC-1		
		V_{LSR} (km s^{-1})	Δv (km s^{-1})	T_{MB} (K)	V_{LSR}	Δv	T_{MB}	V_{LSR}	Δv	T_{MB}	V_{LSR}	Δv	T_{MB}
90979.023	HC ₃ N	6.605	0.891	0.972(5)	7.339	0.462	1.983(6)	2.434	0.478	0.192(7)	5.902	0.513	3.538(6)
91095.303	U91095	7.521	0.475	0.265									
91171.086	HDCS	6.698	no detectada					2.403	0.492	0.033(7)		no detectada	
91209.248	U91209		0.746	0.171(9)	7.367	0.580	0.040(7)	2.715	0.291	0.035(7)	5.870	0.564	0.050(10)
91342.647	U91342		no detectada					no detectada			6.000	0.433	0.038(10)
91392.544	U91392		no detectada		7.205	0.481	0.031(7)	no detectada			6.000	0.313	0.049(10)
91494.349	c-C ₃ H	6.698	0.341	0.039(8)				no detectada			5.798	0.451	0.465(8)
		6.531	0.764	0.171(10)	7.281	0.387	0.272(9)	2.434	0.408	0.062(7)			
		7.383	0.624	0.127									
91497.608	c-C ₃ H	6.692	0.703	0.059(10)	7.341	0.431	0.162(8)	2.528	0.345	0.042(8)	5.871	0.435	0.299(8)
		7.602	0.439	0.050									
91506.898	U91506		no detectada					2.401	0.396	0.026(8)		no detectada	
91512.969	c-C ₃ H		no detectada					no detectada			5.789	0.308	0.068(11)
91546.737	U91546	6.698	0.312	0.042(9)				no detectada				no detectada	
91681.696	c-C ₃ H	6.492	0.542	0.034(10)	7.314	0.224	0.035(7)				5.880	0.582	0.040(11)
91692.752	c-C ₃ H	7.352	0.450	0.043	7.273	0.491	0.053(9)				5.673	0.359	0.137(9)
		6.656	1.110	0.119(9)									
91699.471	c-C ₃ H	7.555	0.442	0.054	7.314	0.385	0.178(9)	2.405	0.423	0.037(7)	5.758	0.388	0.311(10)
91747.372	c-C ₃ H		no detectada										
91750.709	U91750	6.800	0.474	0.044(13)	7.284	0.379	0.042(7)				5.709	0.290	0.045(9)
91751.352	U91751	6.582	0.783	0.049(13)	7.205	0.364	0.024(7)				no detectada		
91780.518	c-C ₃ H		no detectada		7.202	0.305	0.036(7)	2.401	0.281	0.037(9)		no detectada	
91832.678	U91832		no detectada		7.364	0.227	0.035(10)				5.886	0.469	0.074(9)
91913.529	CC ³⁴ S		no detectada		7.198	0.373	0.041(8)				no detectada		
91960.950	U91960		no detectada					no detectada			5.731	0.426	0.035(11)
91985.284	CH ₃ CN		no detectada					no detectada			no detectada		
91987.054	CH ₃ CN		no detectada		7.214	0.498	0.082(9)	2.399	0.264	0.032(7)	5.503	0.527	0.060(9)
92494.308	¹³ CS	6.544	0.715	0.4056(11)	7.199	0.426	0.101(9)				5.670	0.479	0.081(9)
		7.234	0.774	0.171				no observada			5.905	0.586	0.241(11)
92872.378	DC ₃ N	6.614	0.663	0.104(14)				no observada			5.799	0.705	0.057(9)
92981.658	HDCS	6.698	0.682	0.484(14)				no observada			6.033	0.507	0.262(9)
		7.365	0.788	0.150				no observada					

2.5. Moléculas individuales

2.5.1. Monosulfuro de carbono: CS

El monosulfuro de carbono interestelar fue descubierto por Penzias et al. (1971), quienes detectaron su transición rotacional $J = 3 - 2$ en regiones de formación de estrellas masivas como Orión A y W51, y también en la envoltura de la estrella evolucionada IRC+10216. Desde entonces, el CS se ha observado en gran variedad de nubes interestelares y se ha utilizado como prueba en la búsqueda de núcleos densos en las nubes moleculares y en el estudio de núcleos pre-estelares.

Es una molécula lineal con un espectro rotacional simple. Esto se debe al hecho de que en el estado fundamental electrónico, $^1\Sigma$, los electrones de la molécula tienen los espines apareados. Además no posee momento angular orbital y los núcleos de los átomos C y S no poseen espín. Por tanto, los estados se denotan por el número cuántico de momento angular total J .

Está considerada una molécula de formación temprana, puesto que es en regiones jóvenes donde alcanza el máximo de su abundancia. Más tarde, cuando las condensaciones se encuentran más evolucionadas químicamente y la densidad es mayor, el CS empieza a congelarse en la superficie de los granos de polvo, desapareciendo de la fase gas (ver, por ej., Bergin & Langer 1997). También se ha utilizado para detectar movimientos de colapso en objetos de Clase 0, a partir de la asimetría del doble pico que presentan sus líneas ópticamente espesas (ver Zhou 1992).

La Figura 2.15 muestra las líneas observadas correspondientes a la transición $J = 2 - 1$ del ^{13}CS , para las fuentes B1 y TMC-1. Esta frecuencia no se observó en las otras fuentes. La intensidad de línea es algo mayor en B1 que en TMC-1 y también muestra una mayor anchura, debido probablemente a la emisión en la segunda componente de velocidad que presenta esta fuente (ver Sección 2.2.4).

2.5.2. Monóxido de azufre: SO

Desde su primera detección en el medio interestelar por Gottlieb & Ball (1973) en varias regiones de formación estelar, el monóxido de azufre se ha utilizado para estudiar las propiedades del gas en regiones con condiciones muy diferentes, como por ejemplo, nubes oscuras, nubes moleculares calientes, envolturas de estrellas evolucionadas, choques, etc. Esto se debe a que su gran momento dipolar permite trazar regiones de diferentes densidades. En nubes oscuras, el SO fue observado por primera vez en L183, TMC-1 y B335 por Rydbeck et al. (1980), en su transición $N_J = 0_1 - 1_0$ a 30 GHz.

El radical SO se encuentra en un estado fundamental electrónico $^3\Sigma$, por lo que no tiene un momento angular orbital neto, pero sí un espín total distinto de cero debido a los dos electrones con espines no apareados. El espín electrónico $S = 1$ se acopla con el pequeño campo magnético que surge de la rotación de la molécula (interacción espín-rotación). Entonces, para cada nivel rotacional con un número cuántico de momento angular rotacional $N > 0$, el momento angular total J toma tres valores posibles: $J = N - 1$, $J = N$, o $J = N + 1$. De este modo, los niveles rotacionales con $N > 0$ se desdoblán en tripletes, mientras que para $N = 0$ sólo existe un estado singlete ($J_N = 1_0$). Esta estructura fina proporciona transiciones

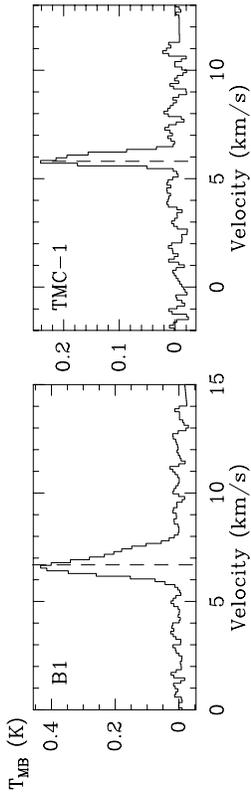


FIGURA 2.15: Perfiles de línea para la transición $J = 2 - 1$ del ^{13}CS . Las otras dos fuentes, L1544 y L183 no fueron observadas a esta frecuencia.

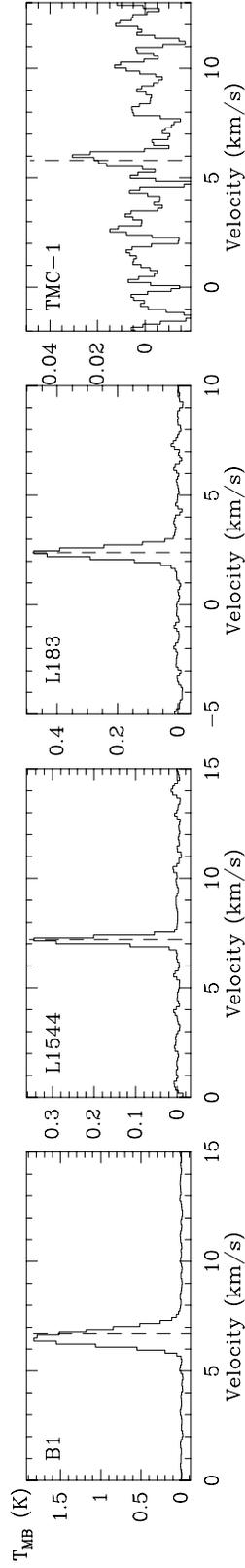


FIGURA 2.16: Perfiles de línea para $\text{SO} (2_2 - 1_1)$.

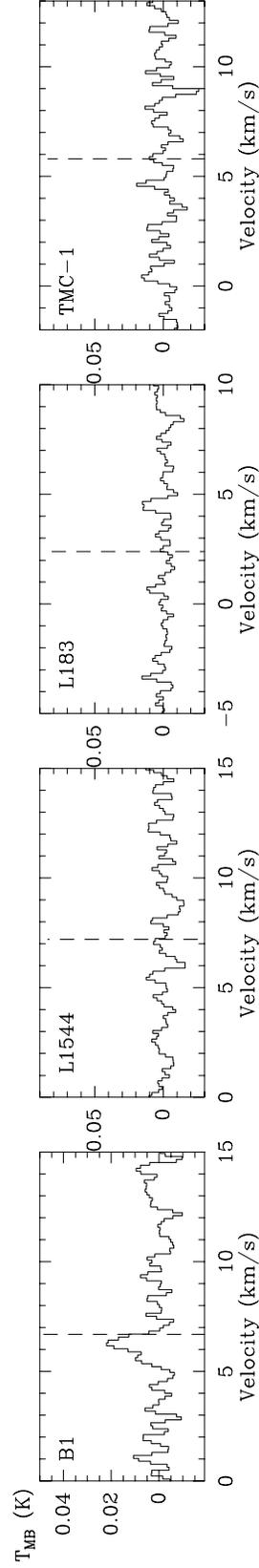


FIGURA 2.17: Perfil de línea para $\text{SiO} (2 - 1), v = 0$. En el caso de L1544, L183 y TMC-1 se muestran los límites superiores.

rotacionales relativamente cercanas.

Se considera una molécula tardía puesto que su mecanismo de formación involucra reacciones relativamente lentas entre neutros. Además, el SO es destruido por el carbono atómico, el cual en épocas tempranas se encuentra almacenado en forma de CO (Nilsson et al. 2000). También se ha encontrado que la abundancia del SO aumenta de forma importante en el gas afectado por choques en los flujos proto-estelares (Bachiller & Pérez-Gutiérrez 1997; Jørgensen et al. 2004). Por estas razones, se ha convertido en un importante trazador de las regiones químicamente más evolucionadas y también, junto a SO₂, de la presencia de choques.

Hemos detectado una transición correspondiente al SO en todas las fuentes (ver Figura 2.16). La línea más intensa se observa en B1, las fuentes L1544 y L183 muestran intensidades similares de esta línea, mientras que en TMC-1 se detecta débilmente.

2.5.3. Monóxido de silicio: SiO

El monóxido de silicio es la molécula interestelar más simple que contiene Si, y se detectó por primera vez en el Centro Galáctico (CG) por Wilson et al. (1971). Más tarde fue observada en regiones de formación de estrellas masivas y en condensaciones producidas por choques en un remanente de supernova (Ziurys et al. 1989a,b). Sin embargo, Ziurys et al. (1989b) no encontraron emisión de SiO en nubes oscuras como TMC-1 y L183, o en regiones de formación estelar poco masiva como B335 y L1551. Esto les llevó a pensar que el SiO se formaba a partir de reacciones endotérmicas con barreras de activación ~ 90 K. Sin embargo, el hecho de que en regiones calientes pero quiescentes, se encontraran abundancias pequeñas para el SiO del mismo orden que en nubes frías, hizo dudar de la relación de la temperatura cinética con la formación del SiO (Martín-Pintado et al. 1992).

Los modelos de química en fase gas predicen la producción de SiO en gran abundancia a través de reacciones ión-molécula, incluso para las nubes frías (Herbst et al. 1989). Si esto es correcto, las bajas abundancias relativas a H₂ observadas en nubes como TMC-1 ($\leq 10^{-12}$) implicarían que el Si se encuentra congelado en los granos de polvo. La primera vez que se detectó SiO en una región de formación estelar poco masiva fue en B1 (Bachiller et al. 1990b; Martín-Pintado et al. 1992; Yamamoto et al. 1992), y en L1448 (Bachiller et al. 1991). La emisión encontrada en los flujos moleculares contenidos en estas nubes sugiere que el SiO se forma a partir de reacciones ión-molécula después de la evaporación del Si de los granos producida por los choques.

Los perfiles de línea de SiO observados en regiones de formación estelar son muy diferentes de los que presentan otras moléculas. Las líneas de SiO suelen ser muy anchas y, en algunos casos muestran dos componentes, una ancha (llamada ala) y otra componente intensa y delgada. La anchura de esta última y su velocidad son las del gas quiescente. La componente ancha se encuentra relacionada con el gas chocado, de hecho esta emisión se suele observar en el mismo rango de velocidades de las alas observadas en las líneas de CO típicas de los flujos moleculares.

La transición $J = 2 - 1, v = 0$ se ha detectado únicamente en B1 (Figura 2.17), lo que debe reflejar la influencia del flujo molecular procedente de la fuente IRAS 03301+3057. La emisión está ligeramente desplazada hacia el azul respecto a las

líneas de otras moléculas, con una velocidad de $V_{\text{LSR}}=6.2 \text{ km s}^{-1}$ (mientras que la velocidad del gas ambiente es de $\sim 6.7 \text{ km s}^{-1}$), y es más débil que la emisión cercana a la fuente IRAS (Martín-Pintado et al. 1992; Yamamoto et al. 1992). Martín-Pintado et al. (1992) realizaron mapas de la emisión de SiO y de H^{13}CO^+ . Ambas moléculas presentan distribuciones espaciales muy diferentes, lo que implica que incluso la componente delgada observada en las líneas de SiO no procede del gas quiescente.

2.5.4. Etinilo: C_2H

El radical etinilo fue identificado por primera vez en el medio interestelar por Tucker et al. (1974), quienes observaron la transición $N = 1 - 0$ en varias nubes moleculares asociadas a formación estelar masiva. Más tarde, Tucker & Kutner (1978) realizaron una búsqueda de C_2H en varias fuentes y no fue detectado en nubes oscuras, por lo que pensaron que esta especie sólo se encontraba en nubes asociadas a regiones H II. Sin embargo, esto pudo ser debido a la baja resolución espectral que utilizaron para este tipo de fuentes, ya que Wootten et al. (1980), utilizando una resolución espectral de hasta 62.5 kHz, sí pudieron detectar esta molécula en varias nubes oscuras. Desde entonces, el etinilo ha resultado ser una de las moléculas poliatómicas más abundantes ($N \sim 10^{14} - 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) en una amplia variedad de fuentes interestelares.

El C_2H es una molécula lineal con un estado fundamental electrónico $^2\Sigma$, por tanto el momento angular orbital del electrón es $\Delta = 0$ y el momento angular de espín $S = 1/2$. Su espectro presenta desdoblamiento espín y estructura hiperfina. El desdoblamiento espín, que viene dado por el número cuántico J , se produce por el acoplamiento entre el momento angular rotacional N y el espín del electrón desapareado S . La estructura hiperfina, dada por el número cuántico F , es el resultado del acoplamiento entre el momento angular J con el espín del núcleo de hidrógeno I .

La abundancia de C_2H se ha relacionado con la de otras moléculas carbonadas, especialmente con las que como ella, contienen el enlace triple $\text{C}\equiv\text{C}$, como por ejemplo C_2S , HC_3N , HC_5N (Wootten et al. 1980; Ruffle et al. 1997, 1999). De hecho se piensa que C_2H y HC_3N tienen un mismo precursor químico, el C_2H_2^+ (ver Sección 3.3.2). Esta relación con otras cadenas de carbono, las cuales se piensa se forman a edades tempranas, hace que la abundancia esperada para el C_2H sea mayor en nubes jóvenes. Sin embargo varios modelos predicen un segundo pico de abundancia tardío para todas estas especies carbonadas (ver, por ej., Ruffle et al. 1997).

Hemos detectado todas las componentes hiperfinas de la transición $N = 1 - 0$ en todas las fuentes. La Figura 2.18 muestra en detalle las seis líneas. En B1 se puede distinguir la segunda componente de velocidad presente en la nube a 7.2 km s^{-1} . Para el resto de las fuentes las líneas son muy estrechas ($\sim 0.5 \text{ km s}^{-1}$). Las intensidades relativas de las componentes hiperfinas no son las esperadas para todas las fuentes. En la Figura 2.19 se muestran las intensidades relativas esperadas para una temperatura de 10 K y condiciones de ETL (panel superior), junto con las líneas observadas en las cuatro fuentes. Mientras B1 y L183 muestran unas intensidades similares a las esperadas, en L1544 y TMC-1 las componentes más

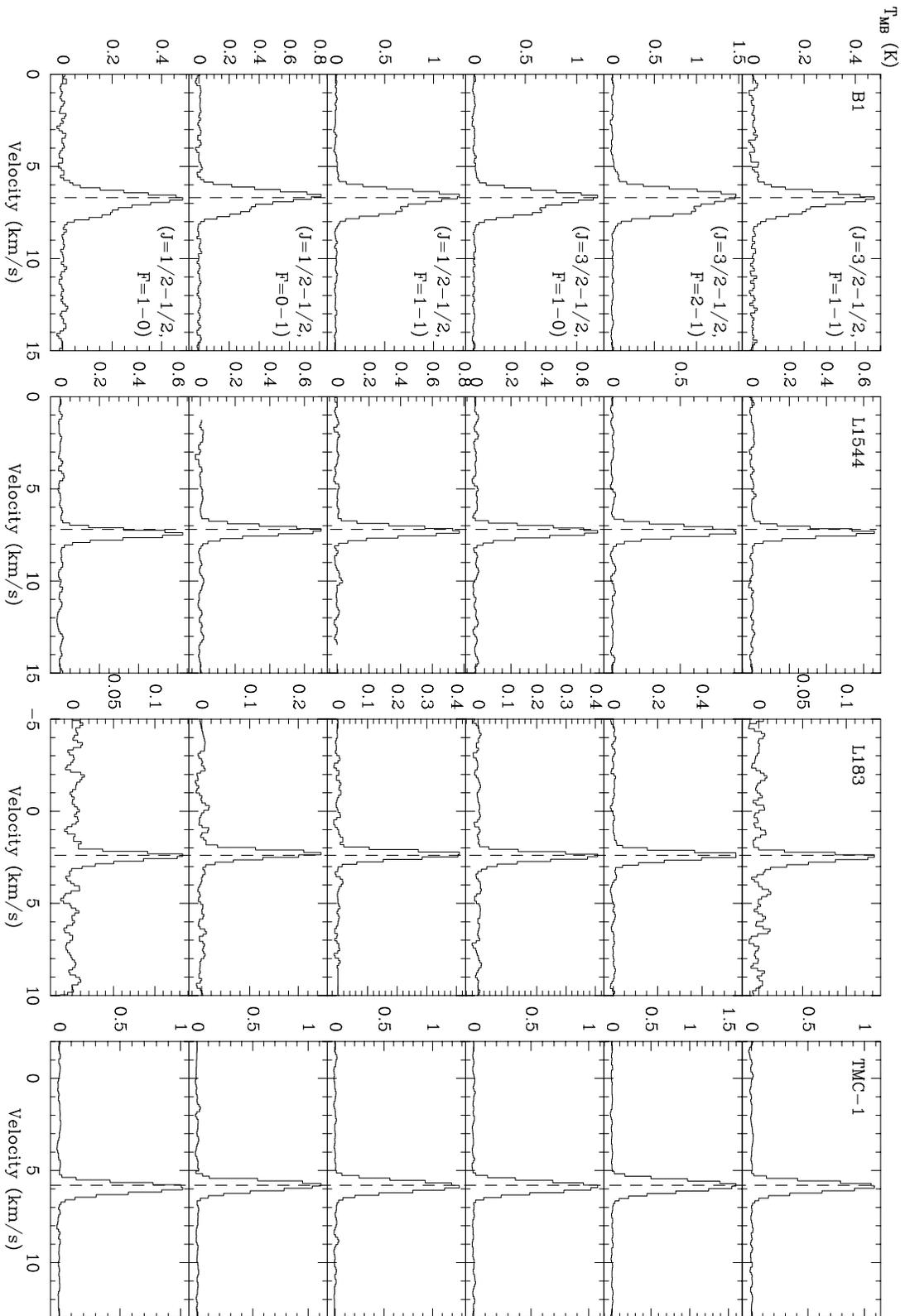


FIGURA 2.18: Perfiles de línea para las componentes hiperfinas de $C_2H(1-0)$.

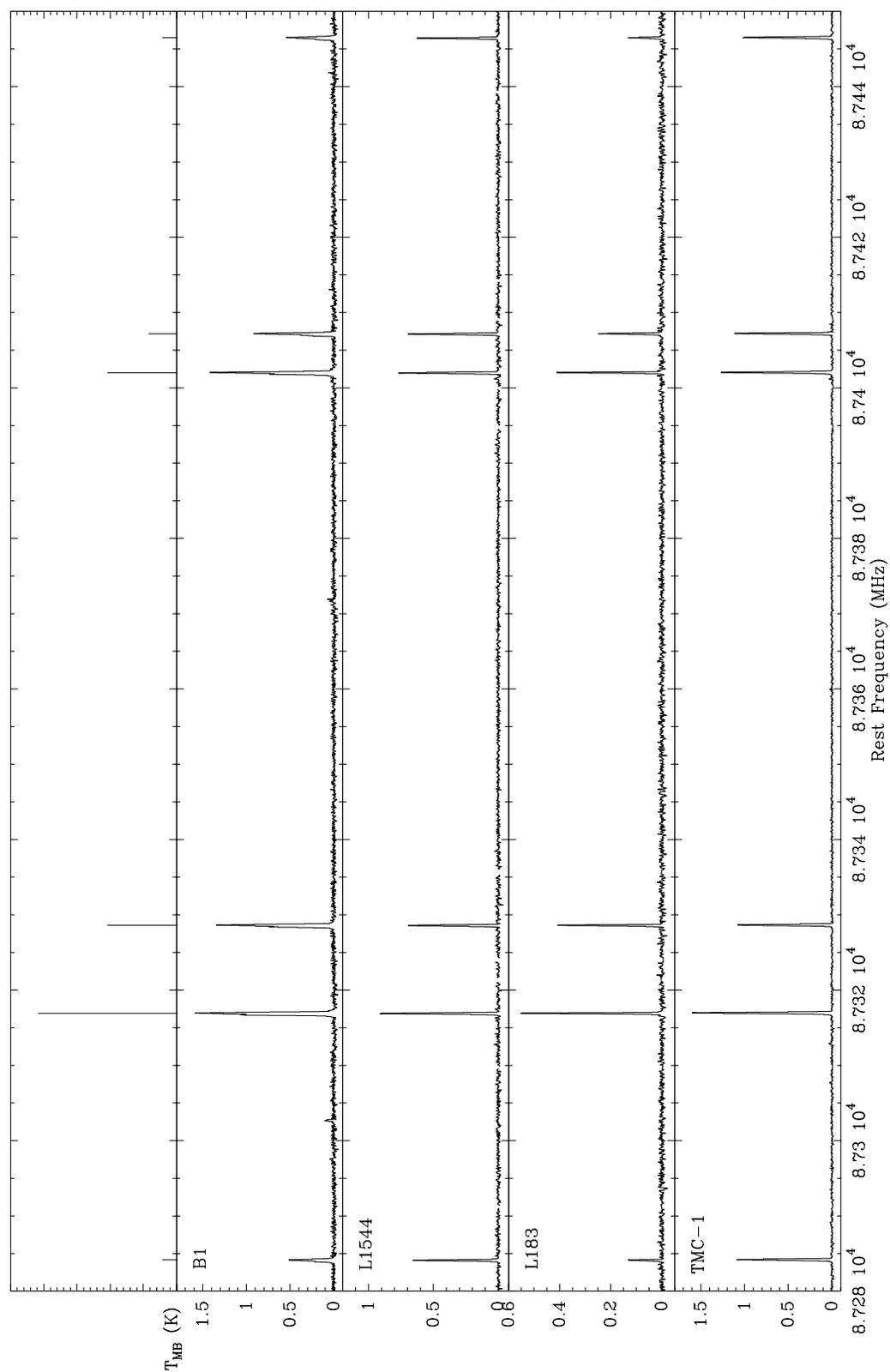


FIGURA 2.19: Componentes hiperfinas de C_2H ($1 - 0$). El panel superior muestra una simulación de las intensidades esperadas para una $T_{\text{kin}} = 10 K$.

débiles ($J = 3/2 - 1/2, F = 1 - 1$ y $J = 1/2 - 1/2, F = 1 - 0$) son más intensas. Esto es debido, probablemente a que las líneas son ópticamente espesas, y existe un efecto de dispersión y difusión de la radiación en las capas más exteriores y de menor densidad. Un fenómeno similar se observa también en la estructura hiperfina del HCN en nubes oscuras, cuyo caso ha sido estudiado en detalle (ver Sección 2.5.6).

2.5.5. Monosulfuro de dicarbono: C₂S

El monosulfuro de dicarbono (o radical tioetinilo) se detectó por primera vez en TMC-1 (Suzuki et al. 1984), y ha resultado ser una molécula abundante en condensaciones frías y quiescentes, mientras que su abundancia parece ser mucho menor en regiones de formación estelar.

Es una molécula lineal y su estado fundamental electrónico se denota $^3\Sigma$, por lo que presenta interacción espín-rotación. Así, el momento angular total J se obtiene del acoplamiento del espín $S = 1$ con el momento angular rotacional N , y toma valores $J = N - 1$, $J = N$, o $J = N + 1$.

Como se ha dicho anteriormente, el C₂S está relacionado con otras cadenas carbonadas y al igual que éstas, se considera que alcanza su máximo de abundancia a una edad temprana dentro de la evolución de la nube. Aunque varios modelos predicen un segundo máximo en su abundancia, debido al aumento de sus precursores, como el C₂H (Ruffle et al. 1997, 1999). Además, observaciones realizadas de C₂S en proto-estrellas de Clase 0 muestran un segundo aumento, el cual podría ser debido a la química inducida por choques (de Gregorio-Monsalvo et al. 2005).

En el rango de frecuencias observado hemos detectado dos transiciones procedentes del C₂S en todas las fuentes, excepto en L183 (ver Figura 2.20). También hemos detectado, aunque débilmente, en TMC-1 una transición correspondiente a la especie isotópica menos abundante CC³⁴S.

2.5.6. Ácido cianhídrico: HCN

El cianuro de hidrógeno (o ácido cianhídrico) es una molécula muy común y abundante en el medio interestelar. Fue detectada en 1970 en varias nubes moleculares asociadas a formación estelar masiva y en el Centro Galáctico (Buhl & Snyder 1970a). La primera vez que se observó en una nube oscura fue en L183, junto con HNC (Snyder & Hollis 1976).

TABLA 2.5: Razones entre las intensidades de las componentes hiperfinas para la transición $J = 1 - 0$ de H¹²CN y H¹³CN.

Fuente	H ¹² CN		H ¹³ CN	
	R_{12}	R_{02}	R_{12}	R_{02}
B1	0.76	0.75	0.60	0.26
L1544	0.62	0.68	0.66	0.31
L183	0.61	0.47	0.82	0.22
TMC-1	0.88	1.95	0.61	0.35

Nota.— Los valores de estos cocientes en ETL son $R_{12} = 0.6$ y $R_{02} = 0.2$.

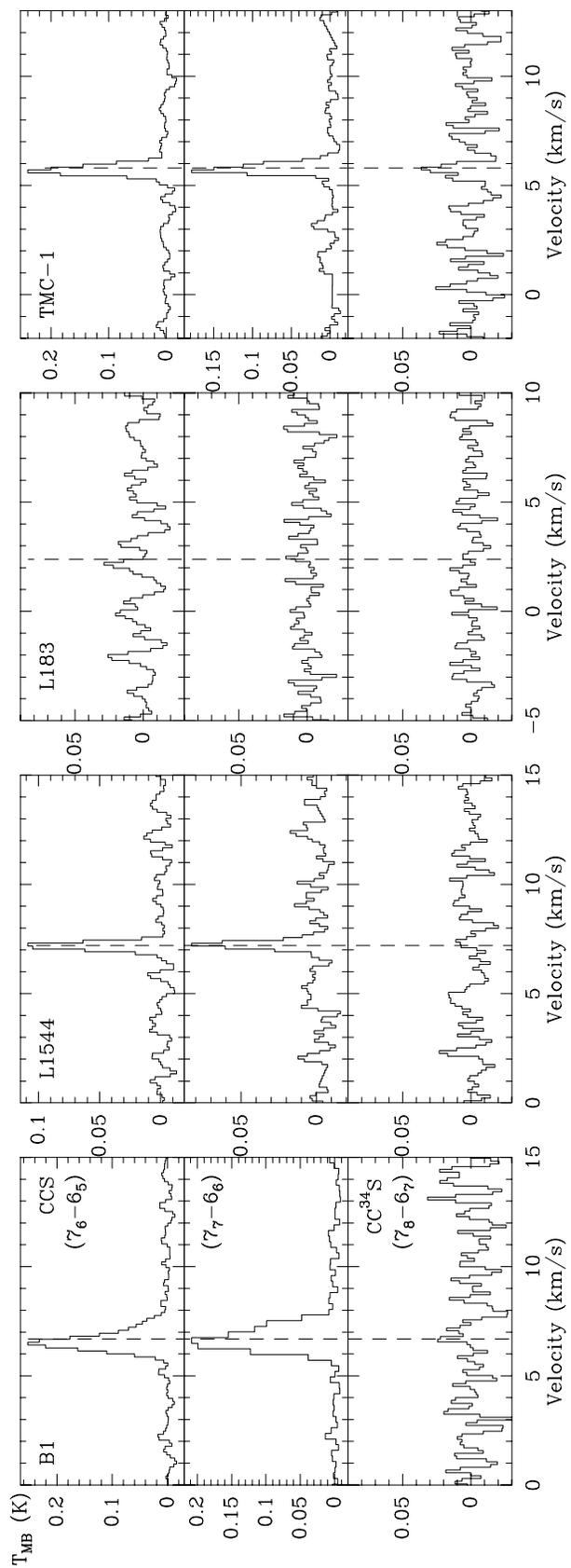


FIGURA 2.20: Perfiles de línea para las transiciones observadas de C_2S y $CC^{34}S$. En L183 se muestran los límites superiores. La especie isotópica se detectó únicamente en TMC-1.

Las líneas de HCN y también de la especie menos abundante H^{13}CN , muestran una estructura hiperfina resuelta con tres componentes, resultado de la interacción del momento cuadrupolar eléctrico del núcleo de ^{14}N con el campo eléctrico producido por la rotación de la molécula. Las razones entre éstas componentes hiperfinas, $R_{12} = F(1-1)/F(2-1)$ y $R_{02} = F(0-1)/F(2-1)$, para ambas especies isotópicas en las cuatro fuentes se muestran en la Tabla 2.5. Bajo condiciones de equilibrio termodinámico local (ETL), y cuando las líneas son ópticamente delgadas, estos cocientes toman los valores $R_{12} = 0.6$ y $R_{02} = 0.2$. Como muestra la tabla, los valores obtenidos para la sustitución isotópica ^{13}C , menos abundante y que sufre de menor opacidad, son similares a los valores en ETL. Sin embargo, para la especie isotópica principal existen variaciones importantes especialmente en la razón entre las componentes $F = 0 - 1$ y $F = 2 - 1$.

Las anomalías encontradas en las razones de las componentes hiperfinas del HCN en nubes oscuras, donde la componente intrínsecamente más débil $F = 0 - 1$, es más intensa que las componentes $F = 2 - 1$ y $F = 1 - 1$, han sido ampliamente estudiadas (p.ej., Walmsley et al. 1982; Cernicharo et al. 1984b), en particular en TMC-1, donde la componente central que debería ser la más intensa, es fuertemente absorbida (ver Figura 2.21). Walmsley et al. (1982) sugieren que este efecto se debe a la absorción de la radiación de las líneas $F = 2 - 1$ y $F = 1 - 1$ por una envoltura de menor densidad, y por tanto de menor T_{ex} , mientras que la componente $F = 0 - 1$ no se ve afectada por esta envoltura. Sin embargo, concluyen que la absorción no explica por sí sola estas anomalías, y proponen que el estado $J = 1 - 0$ $F = 0 - 1$ está sobrepoblado. Cernicharo et al. (1984b) observaron varias posiciones a lo largo de la nube Heiles y en TMC-1, y calcularon las opacidades de cada componente hiperfina en cada línea de visión. Estos autores sugieren que además de la difusión de la radiación en la envoltura de menor densidad, el fenómeno de dispersión debe jugar un papel importante para producir las anomalías. Cuando se tiene en cuenta la dispersión, las tres componentes se forman en regiones diferentes. Entonces, la línea $F = 0 - 1$ se encuentra restringida a una pequeña región alrededor del núcleo de la nube, y en la dirección del núcleo la emisión proviene del núcleo y de la envoltura. Sin embargo, para las otras dos componentes que tienen mayor opacidad, los fotones emitidos desde el núcleo se absorben completamente en la envoltura y son reemitidos en todo el volumen de la envoltura. El hecho de que las componentes hiperfinas del H^{13}CN no muestran anomalías, puesto que la opacidad es menor, confirma este esquema.

Hemos detectado en todas las fuentes la transición $J = 1 - 0$ del HCN y de sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{15}N (ver Figura 2.21). La transición $J = 1 - 0$ del HCN muestra perfiles de auto-absorción, lo que confirma que la línea es ópticamente espesa. Estos perfiles de auto-absorción pueden ser utilizados para detectar movimientos de caída del gas hacia el interior de la nube (ver, p.ej., Sohn et al. 2004). Además, puesto que la componente hiperfina $F = 0 - 1$ se produce en el núcleo de la nube –como demuestra su distribución similar a la de N_2H^+ , esta componente debe reflejar la cinemática en la parte más interior de la nube.

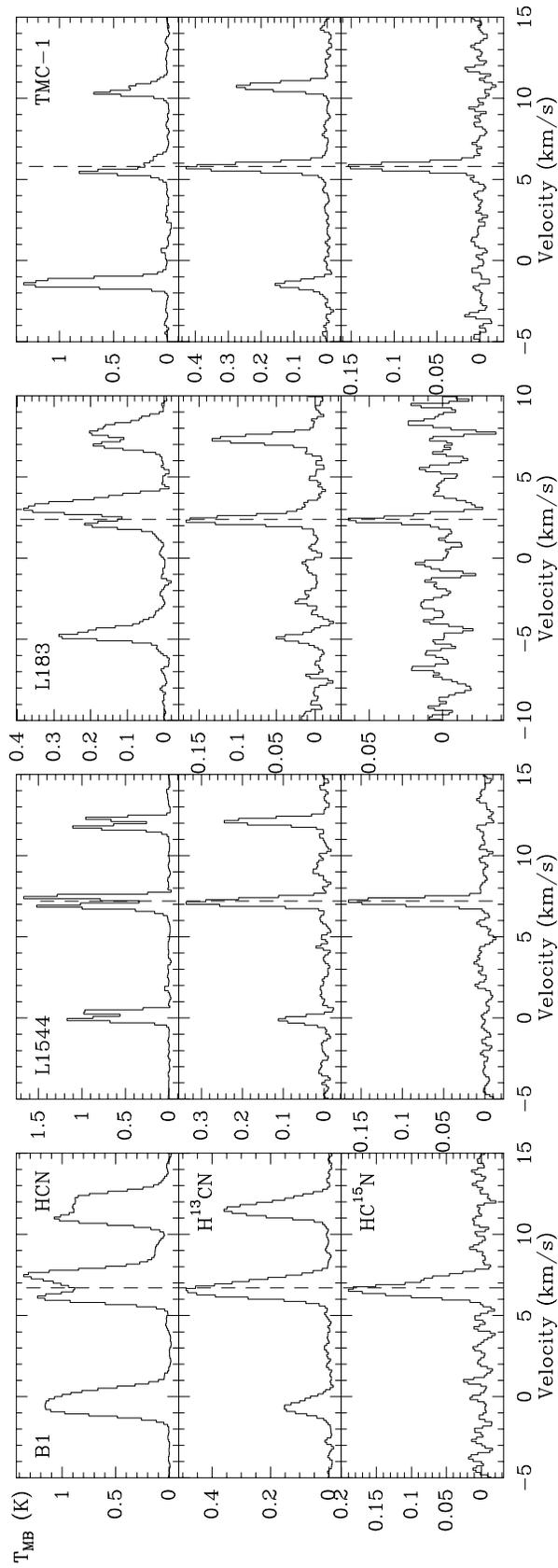


FIGURA 2.21: Perfiles de línea para el HCN $J = 1 - 0$ y sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{15}N . Nótese las diferencias entre las intensidades de las componentes hiperfinas de la especie principal y de la menos abundante H^{13}C (ver texto).

2.5.7. Ácido isocianhídrico: HNC

El isocianuro de hidrógeno, isómero geométrico del HCN, fue observado por primera vez en las nubes moleculares W51 y DR 21 (Snyder & Buhl 1971). En los años posteriores se observó también en otras fuentes antes de ser identificado en el laboratorio en 1976 por tres grupos diferentes, Saykally et al., Creswell et al. y Blackman et al. Aunque este isómero metaestable es difícil de producir en el laboratorio, su abundancia ha resultado ser importante en las nubes interestelares densas. Se piensa que ambos isómeros, HCN y HNC se encuentran químicamente relacionados. Pero la variación encontrada en la razón de abundancias HNC/HCN de una fuente a otra, e incluso dentro de una misma fuente, es objeto de discusión y un problema aún no resuelto en astroquímica (ver Sección 3.3.3).

El desdoblamiento hiperfino resultante del momento cuadrupolar eléctrico para las líneas del HNC es menor que para su isómero HCN. En el caso de la transición $J = 1 - 0$ observada aquí, las componentes $F = 1 - 1$ y $F = 0 - 1$ están separadas de la componente principal ($F = 2 - 1$), -0.27 km s^{-1} y $+0.41 \text{ km s}^{-1}$ respectivamente (Frerking et al. 1979). Por tanto esta estructura hiperfina es difícil de resolver, sin embargo puede dar lugar a una mayor anchura de línea que la observada para otras especies.

Hemos observado en todas las fuentes, la transición $J = 1 - 0$ de las especies isotópicas HNC, HN^{13}C , y H^{15}NC (ver Figura 2.22). Como en el caso del HCN, la especie principal es ópticamente espesa y presenta perfiles de auto-absorción en los que la máxima absorción coincide con el pico de las especies isotópicas menos abundantes.

2.5.8. Formilo: HCO

El formilo es un radical libre que fue observado por primera vez en el medio interestelar por Snyder et al. (1976a). Estos autores encontraron que el HCO está relacionado con campos intensos de radiación UV, y que por tanto suele encontrarse en regiones con una densidad moderada donde el carbono se encuentra ionizado. Este hecho y la no detección del cuarteto a 3 mm, llevó a la conclusión de que el HCO era poco abundante en las nubes moleculares densas. Más adelante, Schenewerk et al. (1986, 1988) observaron las transiciones hiperfinas de la transición $N_{K-K^+} = 1_{01} - 0_{00}$, en varias nubes moleculares demostrando que el HCO sí se puede encontrar de forma abundante en las nubes moleculares típicas. Aunque aún existe evidencia de la conexión entre el HCO y el C^+ , la radiación UV, y las regiones de interfaz H II-nube molecular, el HCO también se puede formar a partir de varias moléculas importantes como HCO^+ y CH_2 . Schenewerk et al. (1988) observaron varias posiciones en la nube oscura L183 pero no detectaron emisión procedente del HCO, por tanto concluyeron que el HCO no se detectaba en fuentes donde no había regiones H II o signos de formación estelar. Recientemente, el HCO ha sido detectado por primera vez en la nube oscura L1448-mm (Jiménez-Serra et al. 2004), y aunque esta fuente contiene un flujo bipolar muy joven, la emisión se detectó también en la componente quiescente del gas. Nosotros hemos detectado aquí el cuarteto a 3 mm en todas las fuentes (ver Figura 2.23), confirmando que la emisión de HCO no se encuentra ligada únicamente a regiones de formación estelar.

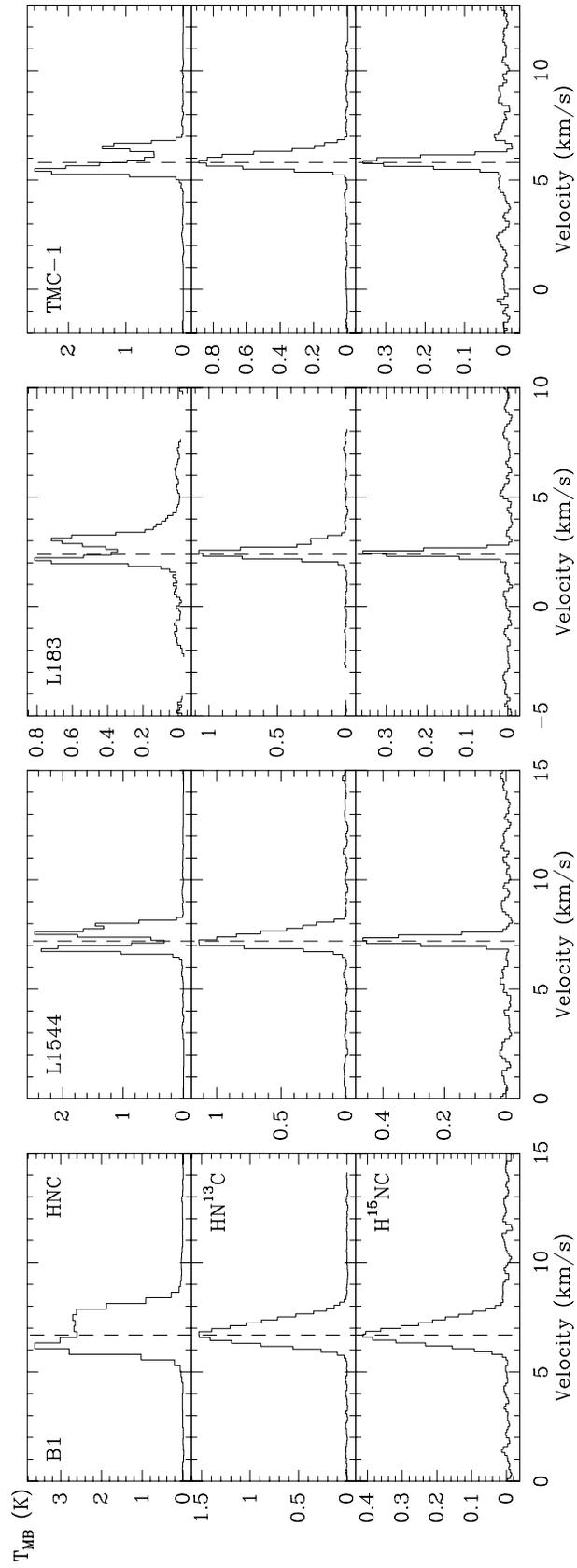


FIGURA 2.22: Perfiles de línea para el HNC ($1-0$) y sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{15}N . La especie principal es ópticamente espesa, por lo que muestra perfiles de auto-absorción cuyo mínimo coincide con la posición del máximo en las especies menos abundantes.

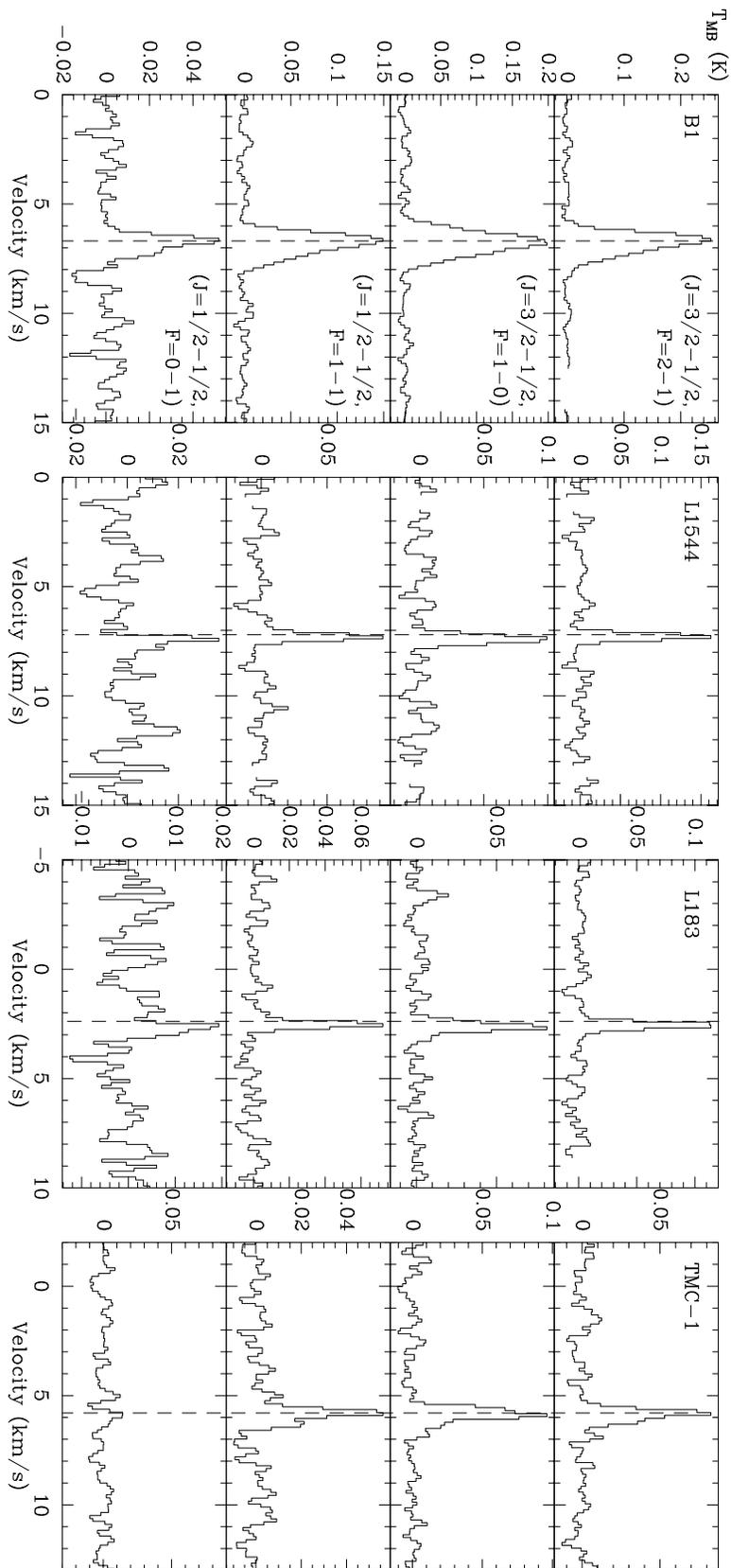


FIGURA 2.23: Perfiles de línea de las componentes hiperfinas de la transición ($1_{01} - 0_{00}$) del HCO. En TMC-1 la última componente no fue detectada.

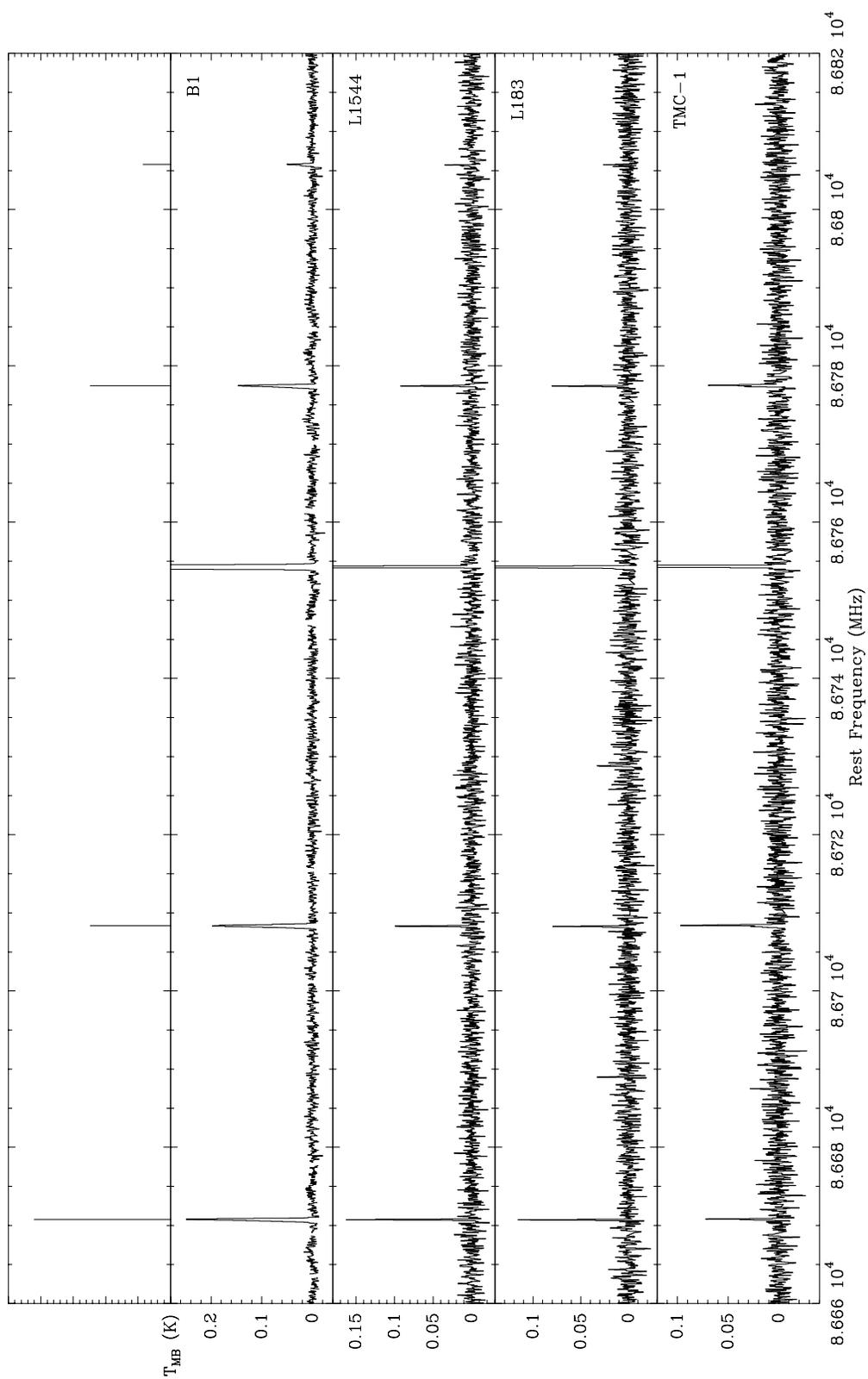


FIGURA 2.24: Intensidades relativas de las componentes hiperfinas del HCO ($1_{01} - 0_{00}$). El panel superior muestra la intensidades esperadas para una temperatura $T_{\text{kin}} = 10 \text{ K}$.

El HCO tiene un espectro complicado, con desdoblamiento fino e hiperfino resultado de las interacciones espín-rotación nuclear y de espín electrón-protón respectivamente, debido a su estructura asimétrica, electrón desapareado, y el núcleo de hidrógeno no apareado (Blake et al. 1984). También en este caso hemos encontrado pequeñas anomalías en las intensidades relativas de las componentes hiperfinas. La Figura 2.24 muestra las cuatro componentes observadas y también las intensidades esperadas para una $T_{\text{kin}} = 10$ K. En concreto, TMC-1 es la fuente donde se observa mayor discrepancia. Estas anomalías, podrían ser otra vez el resultado de opacidad óptica de las líneas, como ocurre en el caso del HCN tan pronunciado en TMC-1.

2.5.9. Cation formilo: HCO^+

El ión formilo fue la primera molécula interestelar identificada en la región de las ondas milimétricas. Buhl & Snyder (1970b) llamaron *X-ogen* a la especie responsable de la transición que observaron a 89.190 GHz en varias fuentes, entre las que se encontraba la nube oscura L183. Más tarde Klemperer (1970) postuló teóricamente que esa especie misteriosa era el ión molecular HCO^+ , además predijo que debía ser una especie abundante bajo las condiciones típicas de las nubes interestelares. Observaciones posteriores afianzaron la idea de que se trataba efectivamente de la transición $J = 1 - 0$ del HCO^+ (Hollis et al. 1975; Snyder & Hollis 1976, y sus referencias). La detección en el laboratorio de la línea a 89 GHz (Woods et al. 1975), junto con la identificación de la transición $J = 1 - 0$ del H^{13}CO^+ a 86.754 GHz (Snyder et al. 1976b), confirmaron esta idea.

A partir de entonces se ha demostrado que el ión formilo es una especie abundante en el medio interestelar y ha cobrado gran interés astroquímico. En primer lugar, porque regula la densidad electrónica y por tanto la estructura de ionización en la nube (ver, p.ej., Caselli et al. 2002). De este modo, va a jugar un papel importante en regiones de formación estelar en el momento del colapso gravitacional de la nube. Además, al ser sus líneas ópticamente espesas sirven para detectar movimientos del gas hacia el interior de la nube, gracias a las asimetrías que muestran sus perfiles en doble pico (Leung & Brown 1977; Zhou 1992). De este modo el HCO^+ , junto con otras especies ópticamente espesas como el CS y el H_2CO , se ha convertido en un trazador importante en proto-estrellas y objetos de Clase 0 para intentar identificar el momento en que comienza el colapso gravitacional (Gregersen et al. 1997; Tafalla et al. 1998). Su papel en la química del medio interestelar es también decisivo, puesto que es el destructor más importante de muchas moléculas neutras (p.ej., Bergin & Langer 1997). Su especie isotópica menos abundante, el H^{13}CO^+ cuyas líneas son ópticamente delgadas, se encuentra relacionado con la emisión del N_2H^+ y coincide normalmente con la emisión continua del polvo en el rango submilimétrico (Morata et al. 2005). Por tanto, parece trazar las condensaciones más evolucionadas hacia la formación estelar.

Hemos detectado en todas las fuentes la transición $J = 1 - 0$ de HCO^+ , y sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{17}O (ver Figura 2.25), donde esta última se ha detectado débilmente en alguna de las fuentes. Todas las líneas observadas correspondientes a la especie principal presentan auto-absorción. Aunque L1544 es una de las fuentes en las que la presencia de perfiles en doble pico indican movimientos de colapso del gas, las líneas observadas aquí de HCO^+ no reflejan esto. De hecho, puesto que esta

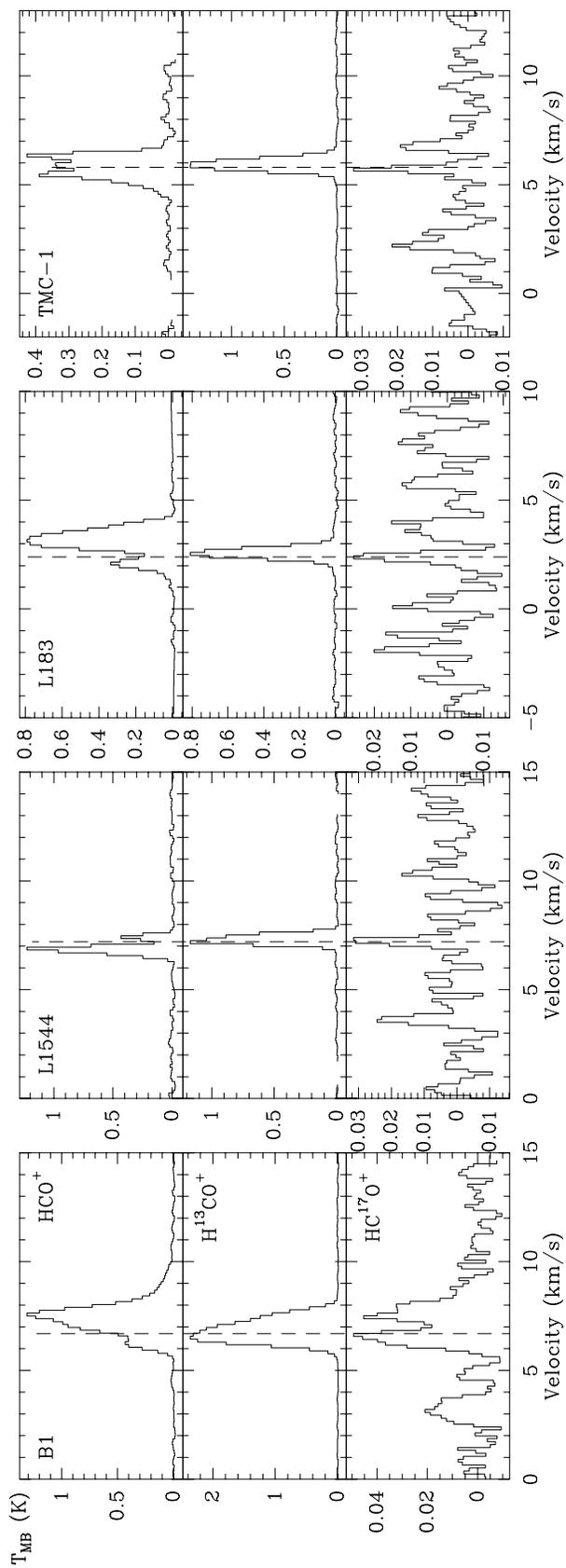


FIGURA 2.25: Perfiles de línea para el $\text{HCO}^+(1-0)$ y sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{17}O .

transición es ópticamente espesa hay que recurrir a transiciones de mayor J , y por tanto mayor energía para poder observar el efecto del movimiento de caída del gas. Por tanto, los perfiles observados son el resultado de la absorción en una envoltura de menor densidad (Cernicharo & Guélin 1987).

2.5.10. Propinilidino cíclico: $c\text{-C}_3\text{H}$

El radical C_3H es de un interés especial en astroquímica porque puede encontrarse en dos formas isoméricas, una cíclica –el ciclo-propenilidino ($c\text{-C}_3\text{H}$)– y otra lineal –propenilidino ($l\text{-C}_3\text{H}$). El isómero cíclico fue detectado por primera vez en la nube oscura TMC-1 por Yamamoto et al. (1987), quienes también observaron su espectro en el laboratorio. Este es el segundo anillo hidrocarbónico detectado en el espacio, después del $c\text{-C}_3\text{H}_2$. De las dos especies isoméricas del C_3H , el $c\text{-C}_3\text{H}$ se considera químicamente menos estable que la forma lineal. Aún así, se ha encontrado que ambas tienen una abundancia similar en el medio interestelar, incluso en algunas nubes oscuras el $c\text{-C}_3\text{H}$ resulta ser más abundante que el $l\text{-C}_3\text{H}$ (ver, p.ej., Turner et al. 2000; Fossé et al. 2001).

Esta molécula se representa por un rotor asimétrico donde cada nivel rotacional se desdobra por interacción espín-rotación en dobletes, y cada uno de estos niveles finos se desdobra a su vez en una estructura hiperfina debido a la interacción del electrón desapareado con el espín nuclear del átomo de hidrógeno. Tiene una estructura plana con simetría C_{2v} y su estado electrónico fundamental es 2B_2 .

Hemos detectado al menos tres de las componentes hiperfinas de la transición $2_{12} - 1_{11}$, y hasta ocho componentes en TMC-1 (ver Figura 2.26), donde se observan las mayores abundancias de cadenas carbonadas. En B1 se observa otra vez la segunda componente de velocidad, haciendo que las líneas muestren un doble pico.

2.5.11. Cianoetinilo: C_3N

El radical C_3N fue identificado por primera vez en el espacio por Friberg et al. (1980) en las nubes TMC-1 y TMC-2 a partir de su transición rotacional $N = 3 - 2$, después de una detección tentativa en la atmósfera de la estrella de carbono IRC+10216 (Guélin & Thaddeus 1977). Algo más tarde, Guélin et al. (1982b) observaron las transiciones de más baja energía $N = 2 - 1$ y $N = 1 - 0$, donde la estructura hiperfina de esta especie se observa completamente resuelta, y pudieron obtener a partir de estas observaciones las constantes moleculares y del desdoblamiento fino e hiperfino. Hasta ese momento las constantes rotacionales de esta especie sólo habían sido obtenidas teóricamente a partir de cálculos *ab initio*.

Es una molécula lineal con un estado electrónico fundamental $^2\Sigma$. La presencia de un electrón desapareado y del núcleo de nitrógeno en C_3N da lugar a una estructura fina e hiperfina. El desdoblamiento en estructura fina de los niveles rotacionales es el resultado de la interacción entre el espín del electrón desapareado (S) y el campo magnético asociado con la rotación de la molécula (interacción espín-rotación). Esta interacción produce dobletes que a su vez se desdoblan en varias componentes hiperfinas, debido a la interacción débil entre el espín nuclear y el espín electrónico ($I \cdot S$), y también de las interacciones ($I \cdot N$) y cuadrupolar eléctrica. Esta última sólo se resuelve completamente en las transiciones entre los niveles más bajos de

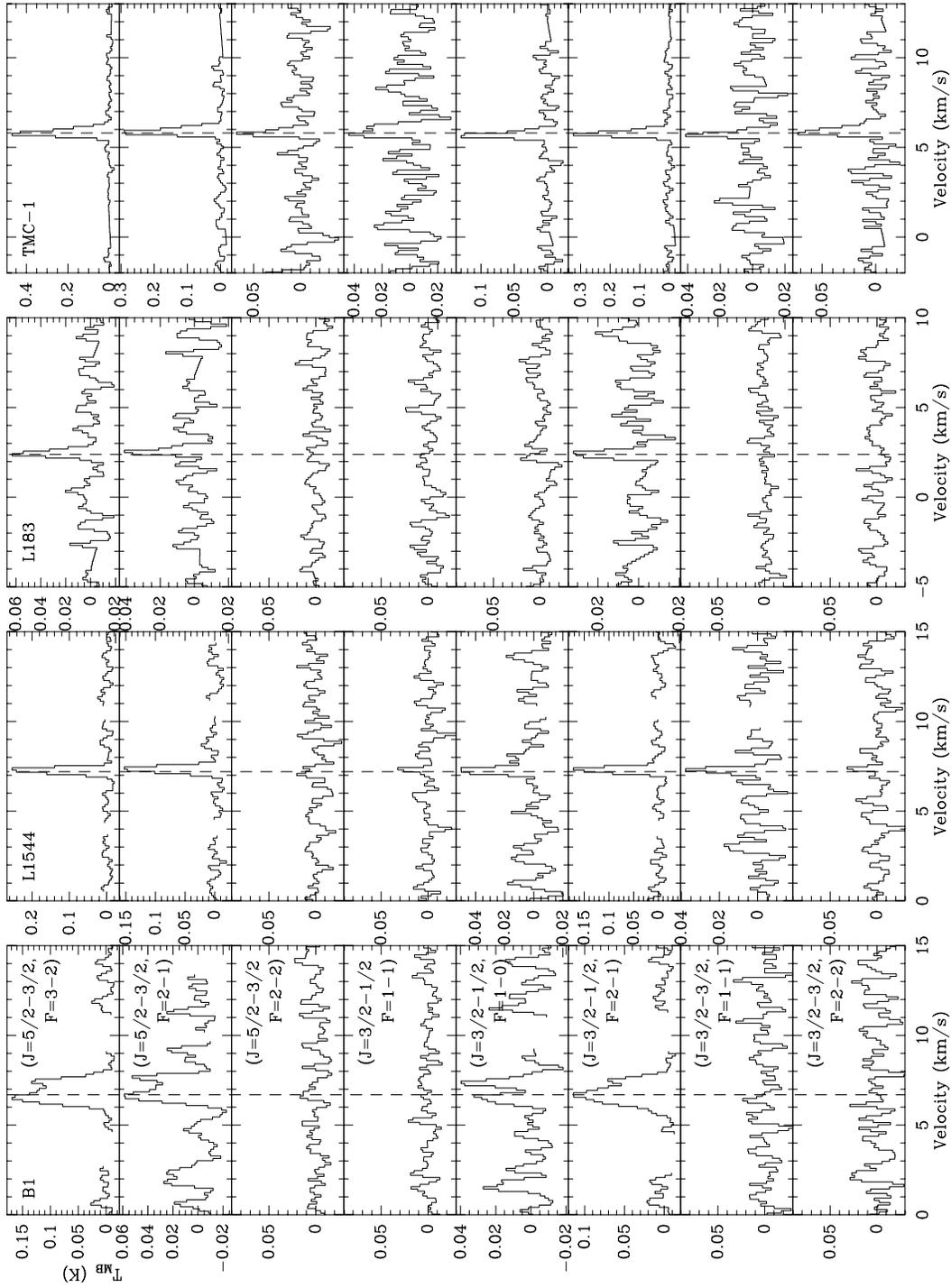


FIGURA 2.26: Perfiles de línea para las componentes hiperfinas de $c\text{-C}_3\text{H}$ ($2_{12} - 1_{11}$). En los casos de no detección se muestran los límites superiores. En B1 se observan otra vez las dos componentes de velocidad de esta fuente, aunque la línea discontinua señala únicamente la componente a 6.7 km s^{-1} .

energía $N = 2 - 1$ y $N = 1 - 0$ (Guélin et al. 1982b). En este trabajo hemos detectado el doblete perteneciente a la transición $N = 9 - 8$ en dos de las fuentes, L1544 y TMC-1 (Figura 2.27).

2.5.12. Monóxido tricarbónico: C_3O

El monóxido de tricarbono fue la primera cadena carbonada con oxígeno observada en el medio interestelar. Se detectó por primera vez en la nube oscura TMC-1, a partir de su transición $J = 2 - 1$ (Matthews et al. 1984), poco después de su primer estudio espectroscópico en el laboratorio (Brown et al. 1983). Más tarde, Brown et al. (1985) observaron tres nuevas líneas de esta especie en TMC-1 y buscaron emisión procedente de C_3O en otras seis regiones con resultado negativo. Recientemente ha sido detectado en la envoltura de la estrella de carbono IRC+10216 (Tenenbaum et al. 2006), donde se han observado seis de sus transiciones rotacionales. En este trabajo, hemos detectado la transición $J = 9 - 8$ en B1 y en TMC-1 (ver Figura 2.28).

Poco después de su primera detección en el espacio, Herbst et al. (1984) pudieron reproducir en sus modelos la abundancia observada en TMC-1 asumiendo la formación del C_3O en reacciones ión-molécula en fase gas. Brown et al. (1985), utilizando sus nuevos datos, pudieron reproducir este esquema, y encontraron una predicción para la abundancia del C_3O que alcanzaba su máximo a los 10^5 años, es decir la fase en la evolución química de la nube en la que otras cadenas de carbono como los cianopoliinos y cianoacetilenos, alcanzan el pico de su abundancia.

2.5.13. Ácido isociánico: HNCO

El ácido isociánico fue detectado por primera vez en Sgr B2 (Snyder & Buhl 1972), y resultó ser una molécula muy abundante en las nubes moleculares del Centro Galáctico. Es una molécula de un interés especial porque, además de excitarse de forma colisional como la mayor parte de las moléculas interestelares, también es excitada en la presencia de un campo radiativo intenso en el infrarrojo lejano (ver, p.ej., Churchwell et al. 1986).

La primera vez que se observó HNCO fuera de las nubes moleculares asociadas al CG fue en una nube oscura, en TMC-1 (Brown 1981). Brown observó la transición $1_{01} - 0_{00}$, donde la estructura hiperfina de esta especie se muestra totalmente resuelta. Esta fue también la primera vez que se detectaron las componentes hiperfinas de esta especie en una fuente astronómica, gracias a la pequeña anchura de las líneas en esta fuente. Además de en el Centro Galáctico (Kuan & Snyder 1996; Cummins et al. 1986; Turner 1991), y en TMC-1 (Brown et al. 1981; Kaifu et al. 2004), se ha observado HNCO en nubes calientes asociadas a formación estelar masiva (Jackson et al. 1984; Zinchenko et al. 2000) y en nubes difusas (Turner et al. 1999). Por tanto, esta especie se puede encontrar en regiones con condiciones físicas muy diferentes. De hecho, en este trabajo hemos detectado una transición del HNCO con intensidades similares en todas las fuentes (ver Figura 2.29).

Es la molécula más simple que contiene H, O, C y, N. Es un rotor ligeramente asimétrico, debido al átomo de hidrógeno. Sus niveles rotacionales se designan con los números cuánticos $J_{K_{-1}K_{+1}}$, siendo J el momento angular total y K_{-1}, K_{+1} los números cuánticos correspondientes a las proyecciones de J en los ejes de simetría

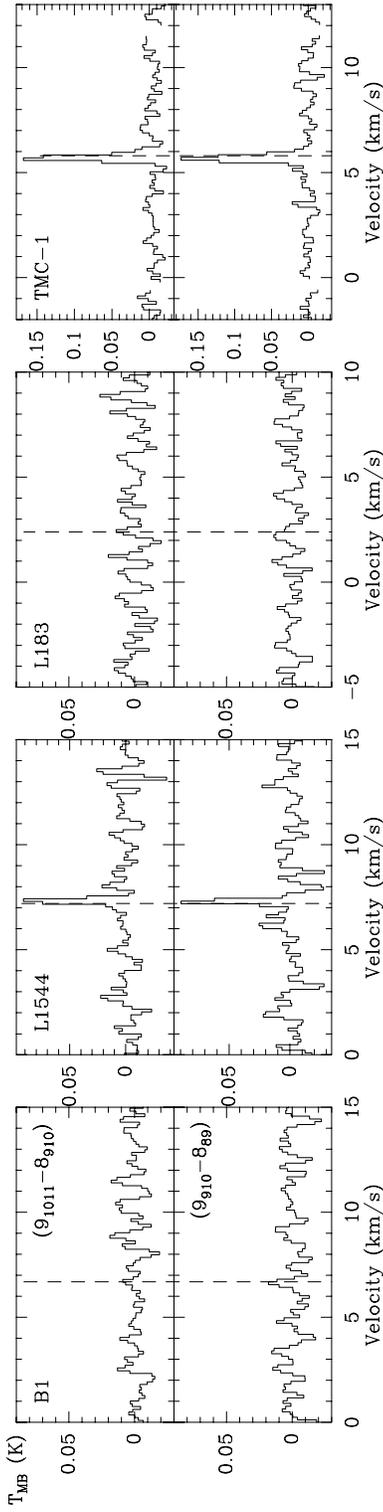


FIGURA 2.27: Perfiles de línea de las componentes hiperfinas de C_3N (9 – 8). En B1 y L183 se muestran los límites superiores.

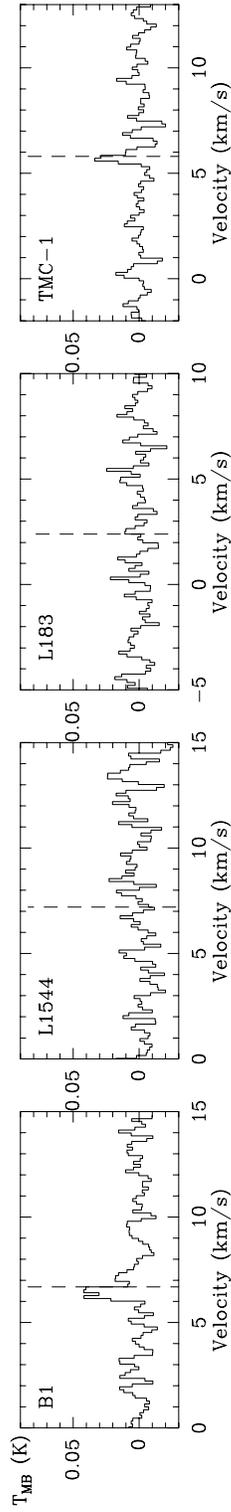


FIGURA 2.28: Perfiles de línea para el C_3O (9 – 8). En L1544 y L183 no fue detectada.

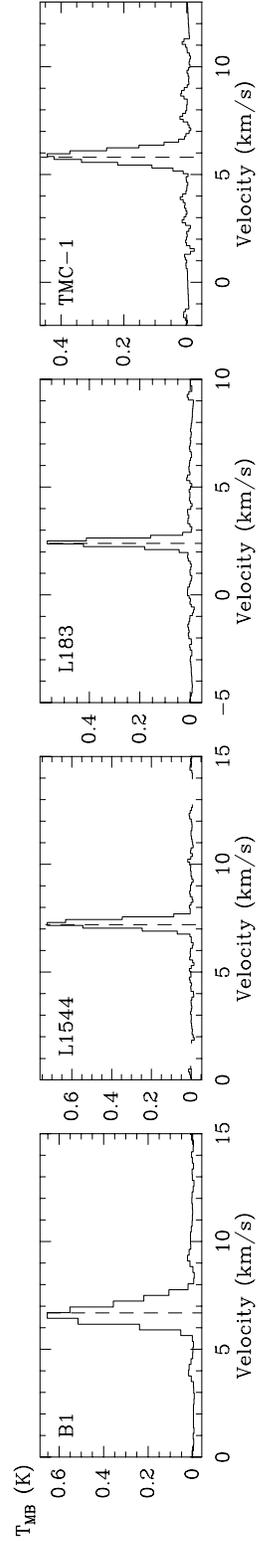


FIGURA 2.29: Perfiles de línea para el HNC (4₀₄ – 3₀₃).

correspondientes a los casos de simetría alargada y achatada, respectivamente. Presenta transiciones de tipo-*a* (dentro de la misma capa K_{-1}), y de tipo-*b* (transiciones entre diferentes capas K_{-1}). Las transiciones de tipo-*b* para el HNC₁ ocurren todas en el infrarrojo lejano, mientras que las de tipo-*a* se presentan en el rango de las ondas milimétricas.

2.5.14. Tioformaldehído deuterado: HDCS y D₂CS

El HDCS se detectó por primera vez en TMC-1 durante el barrido espectral de Nobeyama (Ohishi & Kaifu 1998; Kaifu et al. 2004), y pudo ser identificado gracias a las frecuencias medidas en el laboratorio por Minowa et al. (1997). Nosotros hemos observado una transición de esta especie en todas las fuentes, y una segunda línea en el rango de frecuencias observado únicamente en B1 y TMC-1 (ver Figura 2.30).

Por otro lado, el tioformaldehído dos veces deuterado se ha observado por primera vez en una fuente radioastronómica durante este trabajo (ver Marcelino et al. 2005, y Cap. 4), a partir de una línea no identificada a 87 GHz que se detectó únicamente en B1. Debido a la gran riqueza que muestra esta fuente en especies deuteradas (ver, p.ej., Roueff et al. 2000; Gerin et al. 2001; y sus referencias), y la intensidad que mostraban sus líneas de HDCS, consideramos la posibilidad que dicha línea-U perteneciera a una transición del D₂CS. Una vez identificada la primera línea del D₂CS, realizamos un estudio exhaustivo en B1 donde observamos varias transiciones procedentes de ambas especies isotópicas, HDCS y D₂CS, junto con varias líneas de la especie principal y del H₂C³⁴S. Sin embargo, en muchos casos las frecuencias observadas sobre la fuente diferían considerablemente ($\sim 20 - 50$ kHz) de las calculadas teóricamente. De manera que, utilizando las frecuencias obtenidas en el espacio recalculamos las constantes moleculares y con ellas obtuvimos nuevas frecuencias que se ajustaban de forma satisfactoria a los espectros observados. La Figura 2.30 muestra la primera transición detectada en esta especie y la única que se encuentra dentro del rango espectral observado en este barrido.

2.5.15. Amoniaco deuterado: NH₂D

Olberg et al. (1985) detectaron por primera vez el amoniaco una vez deuterado en varias nubes moleculares. Entre las fuentes observadas se incluyeron dos nubes oscuras, L183 y TMC-1, ya que al poseer líneas muy estrechas la estructura hiperfina de esta molécula puede resolverse completamente y así se pudo identificar esta especie de forma inequívoca. Sin embargo el NH₂D no se detectó en TMC-1, lo que fue atribuido a diferencias en la composición química entre las dos fuentes, ya que sus condiciones físicas y su abundancia en NH₃ son comparables. Estos autores concluyeron que el NH₂D podría ser detectado en la mayoría de fuentes con una gran abundancia en amoniaco, pero esto no siempre se cumple. Saito et al. (2000) detectaron NH₂D en 8 de las 16 nubes oscuras observadas con grandes abundancias relativas $[\text{NH}_2\text{D}]/[\text{NH}_3]$. Entre las fuentes donde no hubo detección se encontraba otra vez TMC-1 y también otras fuentes ricas en amoniaco. Dentro de esta nube, el NH₂D se ha detectado únicamente en una posición cercana al pico del amoniaco, aunque con una abundancia menor que la observada en otras nubes oscuras (Tiné et al. 2000). En nuestro caso, hemos detectado todas las componentes hiperfinas de la

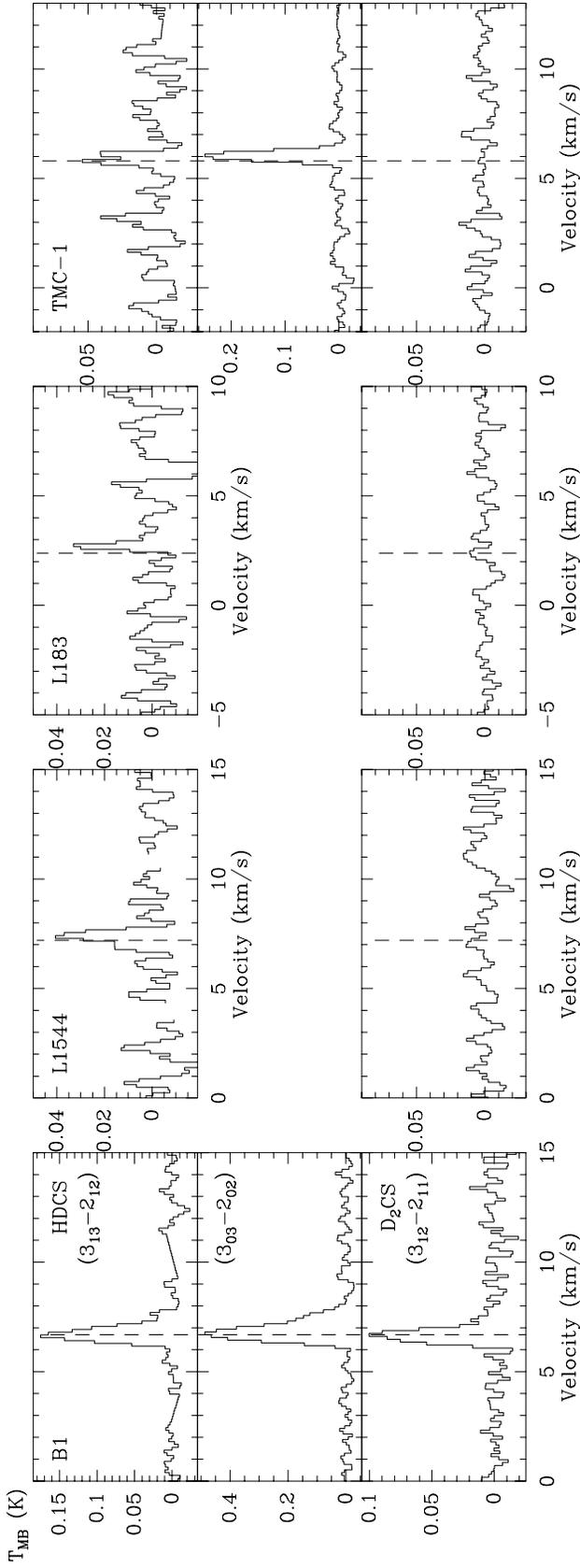


FIGURA 2.30: Perfiles de línea de las especies deuteradas del tioformaldehído. La frecuencia de la transición $3_{03} - 2_{02}$ del HDCS sólo se observó en B1 y TMC-1. Para el D₂CS, que sólo se detectó en B1, se muestran los límites superiores.

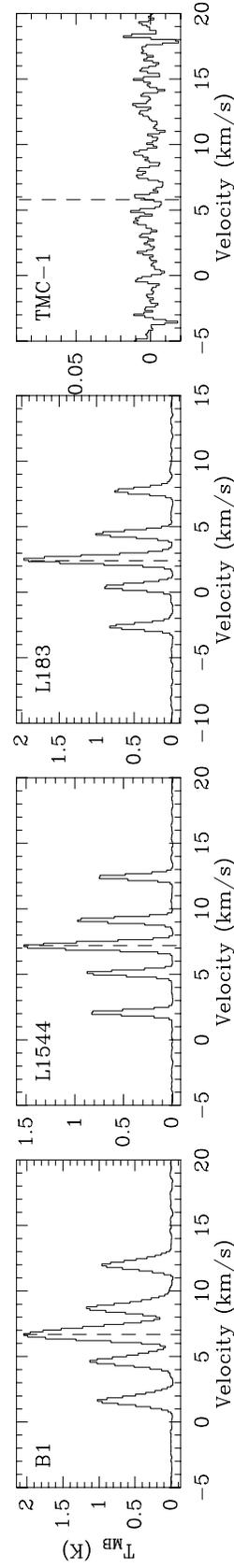


FIGURA 2.31: Perfiles de línea del multiplete NH₂D ($1_{11} - 1_{01}$). Las estrechas líneas, en particular para L1544 y L183, permite resolver completamente la estructura hiperfina. Para TMC-1 se muestran los límites superiores.

transición $N_{K-K_+} = 1_{11} - 1_{01}$ correspondientes al *orto*-NH₂D en todas las fuentes excepto en TMC-1 (ver Figura 2.31).

El NH₂D es una molécula asimétrica cuyos niveles rotacionales se desdoblan en las formas *orto* y *para* debido al fenómeno de inversión de la molécula por efecto tunel, como ocurre en la especie principal. Los pesos estadísticos son 3 y 1 para los estados *orto* y *para*, respectivamente. Además existe un desdoblamiento en cinco componentes hiperfinas debido al momento cuadrupolar del núcleo de ¹⁴N.

2.5.16. Cianoacetileno: HC₃N y DC₃N

Desde su primera detección en Sgr B2 (Turner 1971), el cianoacetileno ha sido observado en una amplia variedad de nubes moleculares, como nubes difusas, nubes moleculares densas, y regiones de formación estelar. La primera nube oscura en la que se observó esta especie fue en TMC-1 (Morris et al. 1976), en el ahora conocido como pico de los cianopoliinos. El HC₃N se convirtió en la primera especie compleja observada en una nube oscura. Por su amplia distribución en el espacio y su alto momento dipolar, el cianoacetileno ha llegado a ser un importante trazador de las condiciones físicas en las nubes moleculares. Además, al ser una molécula de formación temprana en los modelos de química en fase gas, el HC₃N debe ser una molécula útil para el estudio de las condiciones en los núcleos densos pre-estelares. Sin embargo, al igual que para el C₂H, varios modelos predicen un segundo máximo tardío en su abundancia (ver Sección 3.3.2). Aquí hemos detectado una transición del HC₃N en todas las fuentes, con TMC-1 y L1544 mostrando las mayores intensidades. En estas dos fuentes también detectamos todas las sustituciones isotópicas ¹³C (ver Figura 2.32).

El DC₃N se detectó por primera vez en la posición CP de TMC-1, a partir de su transición rotacional $J = 5 - 4$ (Langer et al. 1980b). Más tarde, Howe et al. (1994) observaron la transición $J = 3 - 2$ del DC₃N en varias nubes oscuras, donde detectaron también su estructura hiperfina. Aquí hemos observado el cianoacetileno deuterado únicamente en B1 y TMC-1 (Fig. 2.32), aunque al ser una transición de mayor J , no puede resolverse la estructura hiperfina.

El cianoacetileno es una molécula lineal, por lo que su espectro rotacional es muy simple. Debido a su gran momento de inercia tiene una pequeña constante rotacional (B), y sus transiciones rotacionales $J \rightarrow J-1$ se encuentran relativamente cercanas en frecuencia. Otra ventaja de esta molécula es que sus líneas suelen ser ópticamente delgadas a pesar de ser muy intensas, por lo que existe gran posibilidad de que sus tres especies isotópicas ¹³C sean detectables y, debido a la baja opacidad, proporcionar muy buenas medidas para el estudio de la razón ¹²C/¹³C. Al igual que otras especies que contienen el átomo de ¹⁴N, presenta una estructura hiperfina debido a la interacción del espín nuclear del nitrógeno con la rotación de la molécula. Todas las especies isotópicas tienen desdoblamiento pero no puede resolverse en todas ellas. En nuestro caso, sólo para la especie principal y en las fuentes L1544 y TMC-1 hemos observado esta estructura hiperfina (Fig. 2.32).

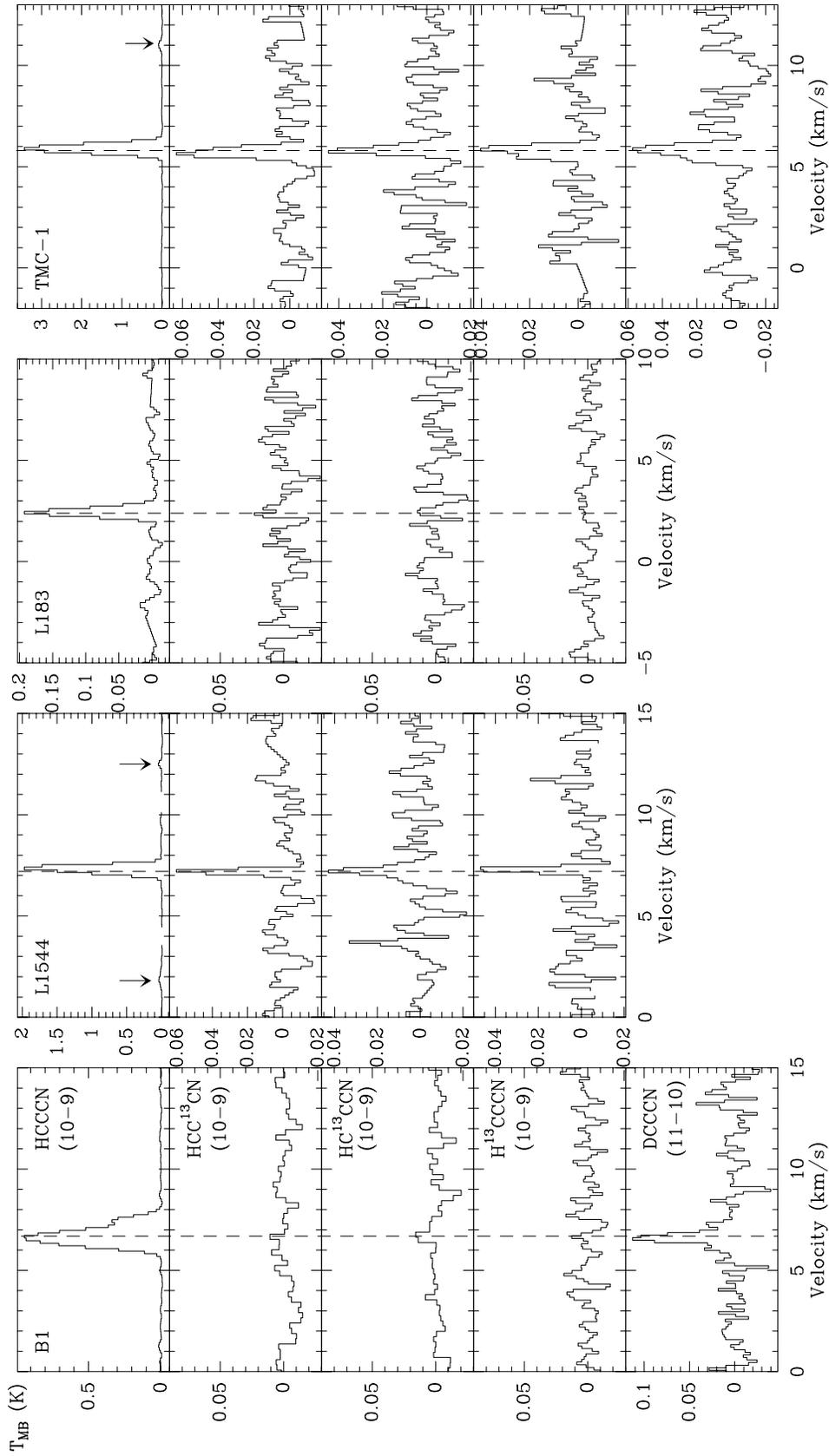


FIGURA 2.32: Perfiles de línea de las transiciones $J = 10-9$ del HC_3N y sus sustituciones isotópicas ^{13}C , y de la transición $J = 11-10$ del DC_3N . La última sólo se observó en B1 y TMC-1. Las flechas indican la posición de las componentes hiperfinas observadas. En caso de no detección se muestran los límites superiores.

2.5.17. Isocianoacetileno: HCCNC

El isocianoacetileno, uno de los isómeros metaestables del HC_3N , se detectó por primera vez en TMC-1 (Kawaguchi et al. 1992). Es otra de las especies identificadas durante el barrido espectral de Nobeyama, donde dos de las líneas no identificadas fueron asignadas al HCCNC gracias a su detección en el laboratorio poco tiempo antes (Guarnieri et al. 1992). En nuestro barrido a 3 mm hemos detectado una transición del HCCNC en L1544 y TMC-1 (Figura 2.33).

Este isómero del HC_3N tiene también una estructura lineal y un momento dipolar relativamente alto, y como en el caso de otras especies isotópicas del HC_3N , HCCNC presenta estructura hiperfina no resuelta. Ambos isómeros, HCCCN y HCCNC, se piensa que se forman por recombinación disociativa del $\text{H}_2\text{C}_3\text{N}^+$, el cual presenta diferentes estructuras de valencia. Entre ellas, la más estable es HCCCNH⁺ que produce HCCCN, mientras que el HCCNCH⁺ es el que da lugar al HCCNC.

2.5.18. Ácido fórmico: HCOOH

El ácido fórmico es el ácido orgánico más simple y fue el primero en ser detectado en el espacio, en Sgr B2 (Zuckerman et al. 1971; Winnewisser & Churchwell 1975). Desde entonces, ha sido observado comúnmente en núcleos densos asociados a formación estelar masiva y en las nubes moleculares del CG (Sutton et al. 1985; Turner 1991; Liu et al. 2001; Requena-Torres et al. 2006), y recientemente en proto-estrellas de Clase 0 (Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004). También se ha detectado en la nube oscura L183, pero no en TMC-1 ni en el joven flujo molecular L1448–mm (Irvine et al. 1990; Requena-Torres et al. 2007).

Es un rotor ligeramente asimétrico con una simetría C_s y cuyos ejes inerciales internos están orientados de manera que presenta transiciones de tipo- a y b , debido a las dos componentes del momento dipolar eléctrico paralela y perpendicular respectivamente al eje de menor momento de inercia (eje- a). Esta especie puede producirse tanto a través de reacciones en fase gas como en la superficie de los granos (ver, p.ej., Garrod & Herbst 2006), como se aprecia de su detección tanto en nubes frías como en regiones de formación estelar.

La Figura 2.34 muestra las líneas detectadas de esta especie en este trabajo, tres en B1 y dos en L183. La no detección en L1544 y en TMC-1, dos fuentes ricas en cadenas carbonadas, es consistente con los modelos de química en los que al aumentar la razón C/O disminuye la abundancia de HCOOH (ver, p.ej., Turner et al. 1999).

2.5.19. Cianuro de metilo: CH_3CN

El cianuro de metilo se observó por primera vez en el Centro Galáctico (Solomon et al. 1971; 1973), y poco después fue detectado en Orión (Lovas et al. 1976). Desde entonces se ha observado típicamente en núcleos calientes asociados a regiones de formación estelar masiva y en las nubes moleculares del CG, puesto que la temperatura y densidad de estas regiones ($T \geq 100$ K, $n(\text{H}_2) \geq 10^5$ cm⁻³) favorece su excitación. Matthews & Sears (1983a) detectaron CH_3CN por primera vez en una nube oscura. Estos autores observaron cuatro posiciones en TMC-1, y encontraron

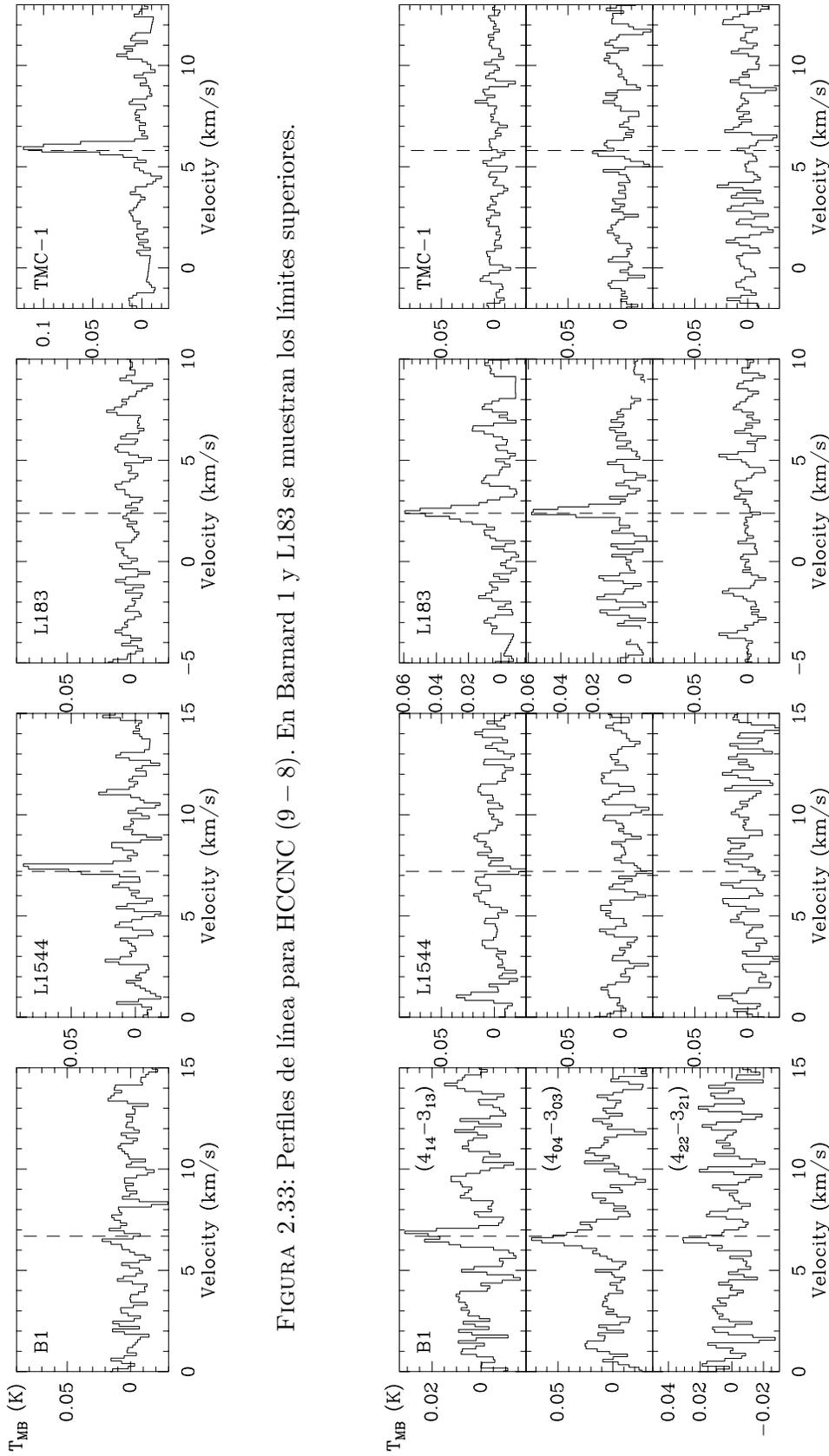


FIGURA 2.33: Perfiles de línea para HCCNC (9 – 8). En Barnard 1 y L183 se muestran los límites superiores.

FIGURA 2.34: Perfiles de línea para las transiciones observadas de HCOOH. En los casos de no detección se muestran los límites superiores.

la máxima abundancia en la posición CP. Sin embargo esta especie no fue detectada en L183. En este trabajo hemos detectado las componentes $K = 0$ y $K = 1$ de la transición $J = 5 - 4$, en L1544 y TMC-1 (ver Figura 2.35).

Es un trompo simétrico cuya estructura en niveles de energía se caracteriza por los números cuánticos J y K , los cuales representan el momento angular rotacional y su componente a lo largo del eje de simetría. Las diferentes componentes K de una transición $J \rightarrow J - 1$ se encuentran desplazadas una pequeña cantidad en frecuencia debido a la distorsión centrífuga, lo que permite observar varias componentes simultáneamente. Esta especie presenta además una estructura hiperfina asociada al núcleo de ^{14}N que viene dado por $F = J + I$, donde I es el espín nuclear del nitrógeno. Sin embargo ésta sólo puede resolverse para valores pequeños del número cuántico J . El CH_3CN se utiliza comúnmente para obtener las condiciones físicas (densidad y temperatura) de la región observada. Esto se debe a que las transiciones radiativas entre diferentes capas K están prohibidas por las reglas de selección y sus poblaciones relativas vienen dadas exclusivamente por excitación colisional. Por tanto, asumiendo ETL y líneas ópticamente delgadas, las intensidades relativas de las componentes K nos dan una medida directa de la temperatura cinética y la columna de densidad.

2.5.20. Metanol deuterado: CH_2DOH y CH_3OD

Las formas isoméricas del metanol una vez deuterado fueron observadas por primera vez en Orión (Mauersberger et al. 1988; Jacq et al. 1993). En los últimos años se han observado grandes abundancias de las diferentes especies deuteradas del metanol en la proto-estrella de Clase 0 IRAS 16293-2422, donde se detectaron por primera vez sus formas doble y triplemente deuteradas (Parise et al. 2002, 2004), y en otras regiones de formación de estrellas poco masivas (Parise et al. 2006). La producción del metanol deuterado en regiones de formación estelar, al igual que la del CH_3OH , se explica gracias a la evaporación de los granos de las especies formadas en su superficie. La deuteración sin embargo, procede del enriquecimiento en deuterio que contiene el gas acretaado y que se produce durante la fase fría pre-estelar. En este trabajo hemos detectado una transición procedente del CH_2DOH en todas las fuentes excepto en TMC-1, y una línea del CH_3OD detectada únicamente en B1. Esto demuestra que al menos la forma CH_2DOH puede encontrarse en nubes frías, donde la evaporación de los granos de polvo es improbable y por tanto la producción del metanol deuterado debería poder explicarse en base a la química en fase gaseosa.

El metanol (CH_3OH) es un rotor ligeramente asimétrico, que posee rotación interna del grupo metilo con respecto al grupo OH. Esta rotación interna produce la separación en estados A y E , entre los cuales no se permiten transiciones rotacionales o colisionales de manera que se comportan como especies diferentes. Sin embargo la deuteración puede modificar ligeramente este esquema. En el caso del CH_3OD , seguiremos teniendo la misma simetría de la especie principal, pero cuando el deuterio se encuentra dentro del grupo metilo se pierde la simetría bajo rotación y la separación en estados torsionales es diferente (ver Parise et al. 2002).

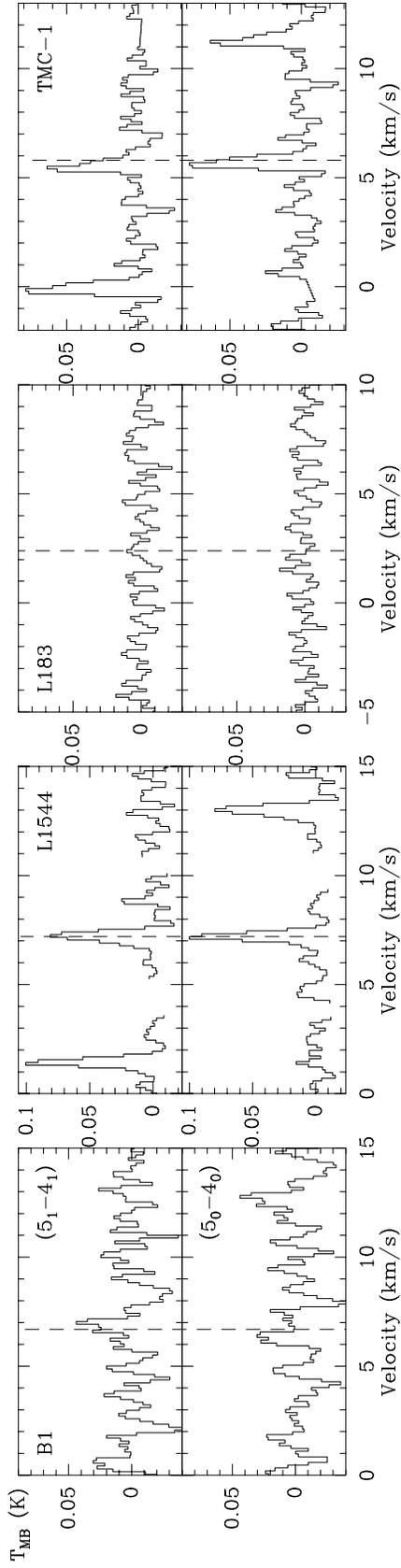


FIGURA 2.35: Perfiles de línea para las componentes $K=0$ y $K=1$ de la transición $J=5-4$ de CH_3CN . En Barnard 1 y L183 no fueron detectadas.

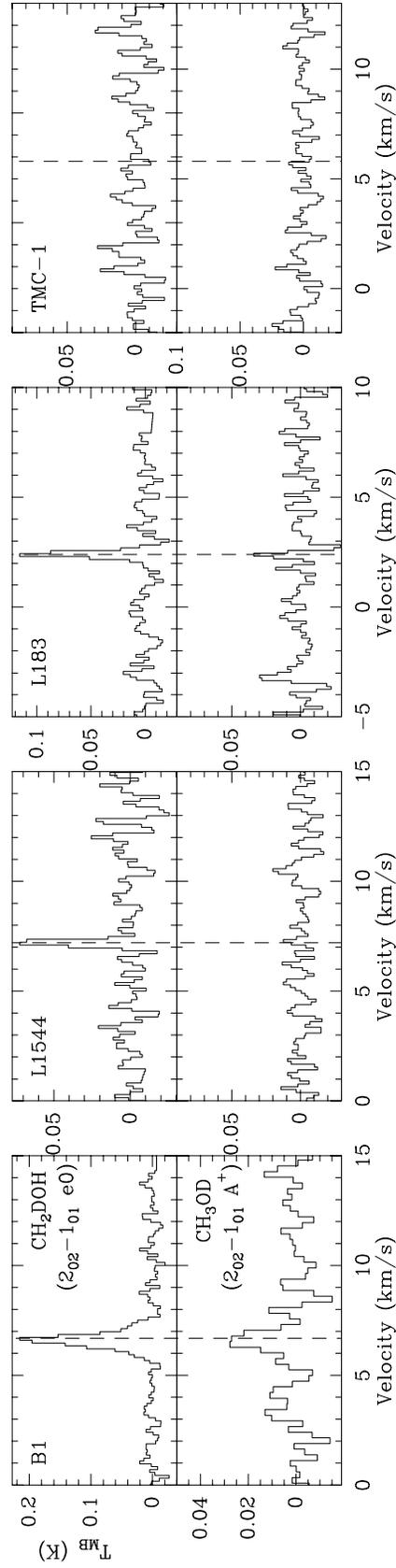


FIGURA 2.36: Perfiles de línea para las especies una vez deuteradas del metanol. Para el CH_2DOH se muestran los límites superiores en TMC-1, y el CH_3OD sólo fue detectado en B1.

2.5.21. Cianoacetileno protonado: HC_3NH^+

El cianoacetileno protonado es considerado un elemento importante en el proceso de formación del HC_3N y sus isómeros en nubes moleculares, y para la química de los cianopoliinos en general. Fue detectado por primera vez en el pico de los cianopoliinos en TMC-1 durante el barrido espectral de Nobeyama (Kawaguchi et al. 1994). Esto supuso la primera observación de transiciones puramente rotacionales de esta especie, tanto en el espacio como en el laboratorio. Kawaguchi et al. (1994) observaron dos transiciones que, junto con datos previos de laboratorio en el IR (Lee & Amano 1987), utilizaron para obtener las constantes moleculares rotacional (B) y de distorsión (D). Más tarde, Gottlieb et al. (2000) obtuvieron su espectro microondas en el laboratorio.

En este trabajo hemos detectado únicamente una transición rotacional procedente del HC_3NH^+ y sólo en una de las fuentes, en TMC-1(CP), la única fuente interestelar donde se ha detectado este ión de forma clara. La Figura 2.37 muestra la línea observada en TMC-1 y los límites superiores en el resto de las fuentes.

2.5.22. Vinil cianido: CH_2CHCN

El vinil cianido se observó por primera vez en Sgr B2 (Gardner & Winnewisser 1975). Fue la primera especie detectada en el espacio con un doble enlace $\text{C}=\text{C}$, las cuales resultan ser muy reactivas y, por tanto químicamente inestables. Desde entonces esta molécula se ha observado en numerosos núcleos calientes de formación estelar. Matthews & Sears (1983b) detectaron dos transiciones pertenecientes al CH_2CHCN por vez primera en TMC-1, y Kaifu et al. (2004) observaron hasta 12 transiciones de esta molécula durante el barrido espectral de Nobeyama. Recientemente esta especie ha sido detectada por primera vez en la envoltura de la estrella IRC+10216, prototipo de estrellas evolucionadas AGB ricas en carbono (Agúndez et al. 2007). En este trabajo hemos observado una transición del CH_2CHCN en L1544 y TMC-1 (ver Figura 2.38).

Es una molécula plana y asimétrica, con un complejo espectro rotacional (ver, p.ej. Gerry et al. 1979). La estructura hiperfina debida al momento cuadrupolar del núcleo de ^{14}N , sólo se resuelve para transiciones de bajo J puesto que las constantes de acoplamiento cuadrupolar son bastante pequeñas. En las transiciones observadas por Matthews & Sears (1983b) se detectaron algunas de las componentes hiperfinas más intensas, cuyas intensidades relativas son consistentes con ETL. Esta molécula se forma a partir de la reacción entre CN y el etileno, C_2H_4 (Herbst & Leung 1990), la cual se ha estudiado en el laboratorio y resulta ser muy rápida a bajas temperaturas (Sims et al. 1993).

2.5.23. Formato de metilo: HCOOCH_3

El formato de metilo presenta, como otras especies que contienen el grupo metilo (CH_3), movimientos de rotación interna o torsión donde cada nivel torsional se separa en dos subestados A y E (ver, p.ej., Oesterling et al. 1999). Es otra de las moléculas complejas que se encuentran típicamente en nubes moleculares gigantes asociadas a formación de estrellas masivas, como Orión KL (Schilke et al. 1997;

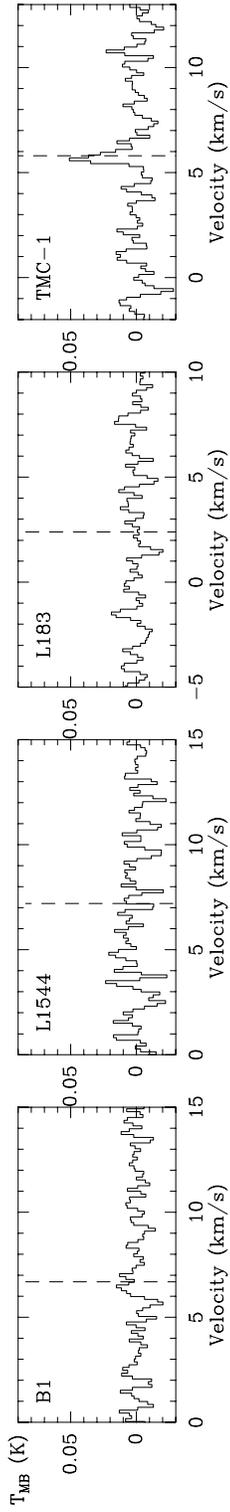


FIGURA 2.37: Perfil de línea para HC_3NH^+ (10 – 9). Sólo se detectó en TMC-1, para el resto de las fuentes se muestran los límites superiores.

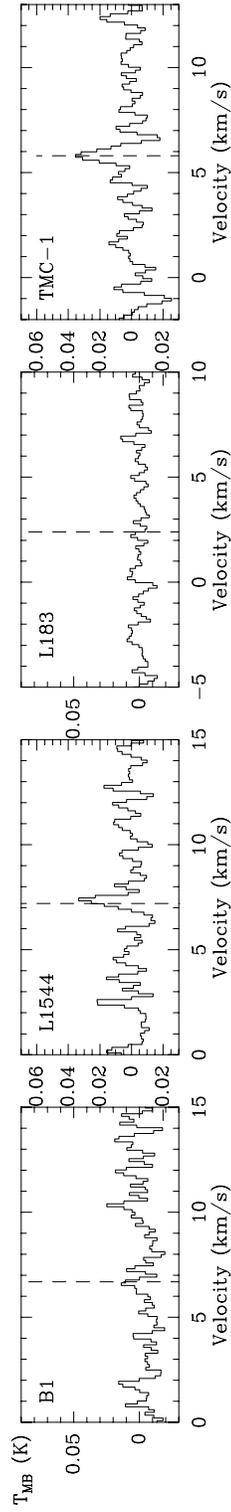


FIGURA 2.38: Perfiles de línea para CH_2CHCN ($9_{18} - 8_{17}$). Para B1 y L183 se muestran los límites superiores.

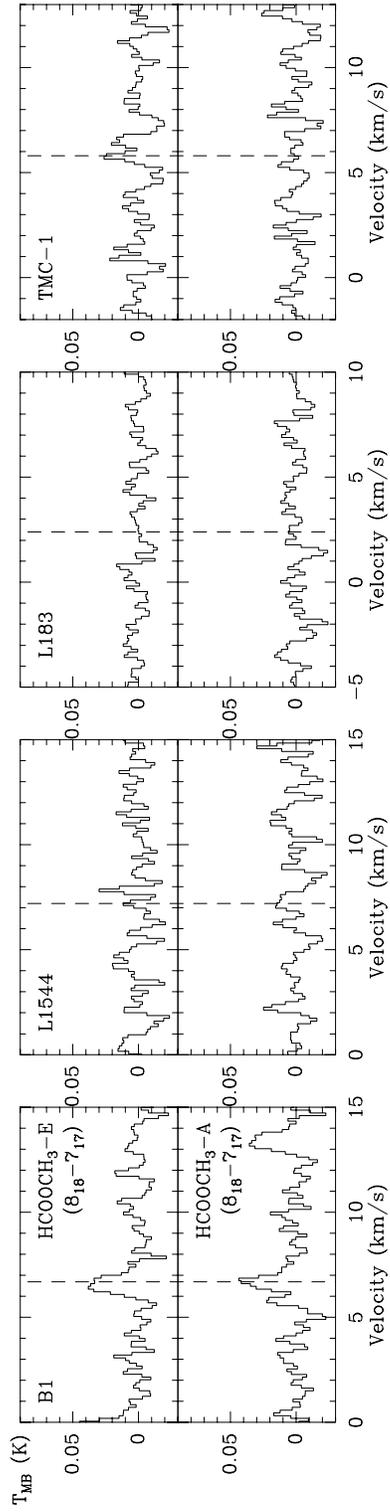


FIGURA 2.39: Perfiles de línea para ambas especies (*A* y *E*) de HCOOCH_3 ($8_{18} - 7_{17}$). Sólo fueron detectadas en B1, para el resto se muestran los límites superiores.

Blake et al. 1987), y en las nubes del CG (Snyder et al. 1994; Miao et al. 1995), donde gracias a las elevadas temperaturas de estas regiones y la alta densidad de líneas del espectro del HCOOCH_3 se han detectado gran cantidad de sus líneas.

Se piensa que se forma después de la evaporación del metanol y del formaldehído almacenado en los granos de polvo, a través de reacciones rápidas en fase gas. Sin embargo, Horn et al. (2004) encontraron que la producción en fase gas del metil formato a partir del metanol protonado y del formaldehído no es tan eficiente como se asumía en los modelos. Estos autores sugieren que el HCOOCH_3 también se forma en la superficie de los granos. Recientemente, Requena-Torres et al. (2007) presentaron observaciones de varias moléculas orgánicas complejas en la nube oscura L183, y en el flujo molecular L1448–mm (ver también Cap. 6). El hecho de que el metil formato no se detectara en el precursor del choque de L1448–mm sugiere sin embargo, que esta especie no es evaporada directamente de los granos.

Hasta la fecha el HCOOCH_3 no ha sido detectado en nubes oscuras, puesto que la temperatura cinética es muy baja (~ 10 K) para permitir su evaporación, o la de sus especies precursoras, de los granos de polvo. La única fuente en la que hemos detectado el metil formato es B1, donde se ha observado una transición para cada una de las especies *A* y *E* del nivel torsional fundamental (ver Figura 2.39). Aunque cerca de la posición observada existen indicios de formación estelar, ésta debe encontrarse en una fase muy temprana ya que no hay evidencias de núcleos calientes o flujos bipolares y por tanto, no es probable que exista inyección de moléculas a la fase gas desde los granos (ver también Sección 3.3.5).

2.5.24. Propileno: CH_2CHCH_3

El propileno es una molécula que contiene un doble enlace $\text{C}=\text{C}$, y presenta movimientos de rotación-torsión interna alrededor del grupo metilo. Las transiciones a 3 mm del propileno se han detectado únicamente en la fuente TMC-1, en lo que constituye la primera detección de esta especie en el medio interestelar (ver Marcelino et al. 2007, y Cap. 5). De este modo, el propileno es uno de los hidrocarburos más saturados (con una relación H/C muy alta) observados en el espacio.

Esta molécula presenta dos estados torsionales diferentes *A* y *E* que se comportan como especies distintas y que se presentan en forma de dobletes. Esto nos ayudó a identificar las dos líneas observadas a 86.650 y 86.651 GHz, que en un primer momento catalogamos como líneas no identificadas (líneas-U). Gracias a las frecuencias disponibles para la especie *A* (Cernicharo et al. 2000) y las obtenidas en el laboratorio por Pearson et al. (1994), pudimos detectar otros tres dobletes en el rango de nuestro barrido espectral. Poco después de estas primeras identificaciones, volvimos al 30-m para reobservar estas líneas y observamos 3 dobletes más del propileno para confirmar esta detección. La Figura 2.40 muestra las líneas observadas dentro del rango del barrido espectral y como se puede apreciar, las frecuencias se ajustan bien a las líneas observadas.

2.5.25. Líneas no identificadas

La identificación de nuevas especies es un subproducto muy interesante de los barridos espectrales. En nuestro caso hemos encontrado varias líneas no identifi-

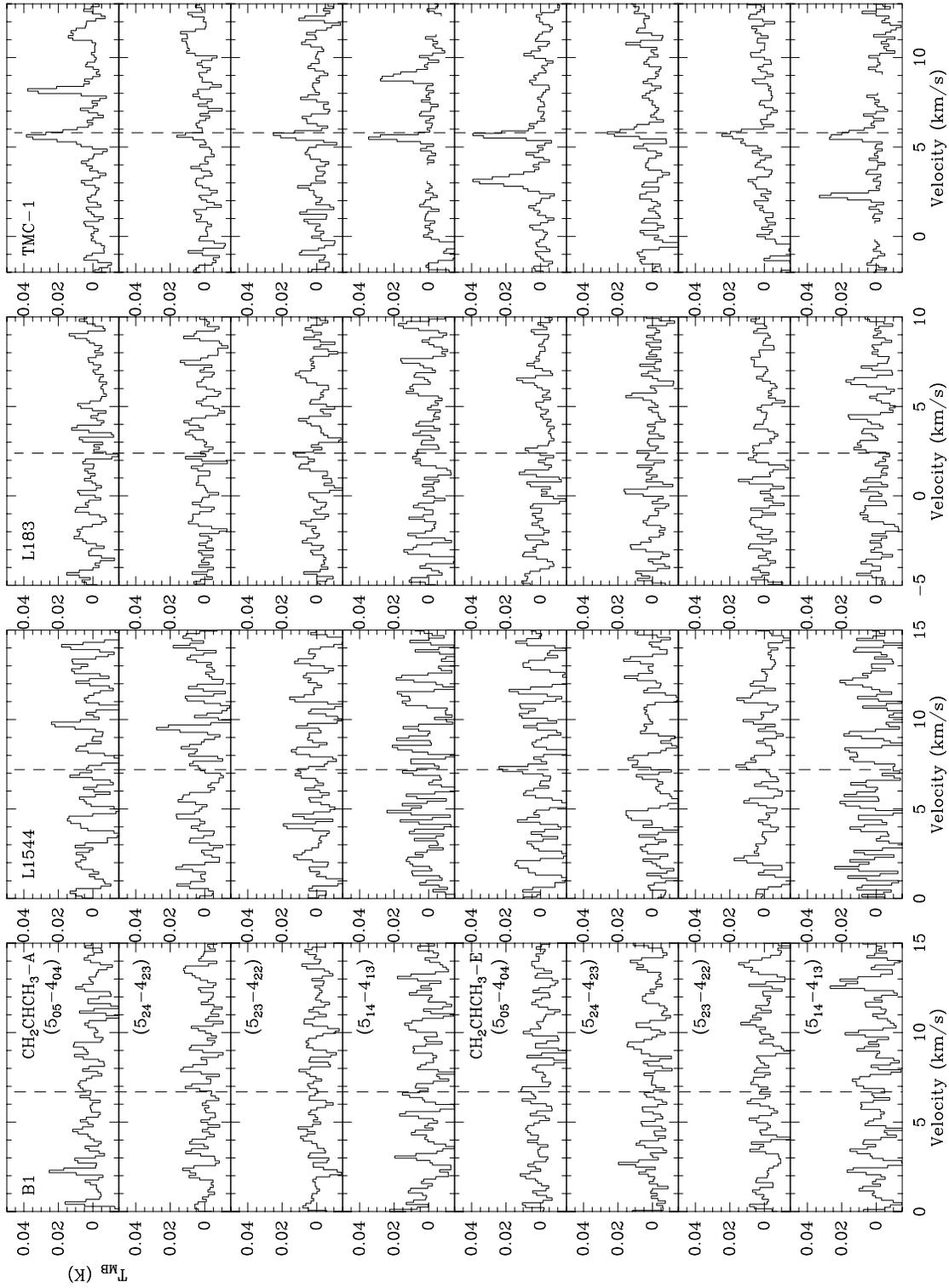


FIGURA 2.40: Perfiles de línea para las transiciones observadas del CH_2CHCH_3 . Esta especie se detectó únicamente en TMC-1.

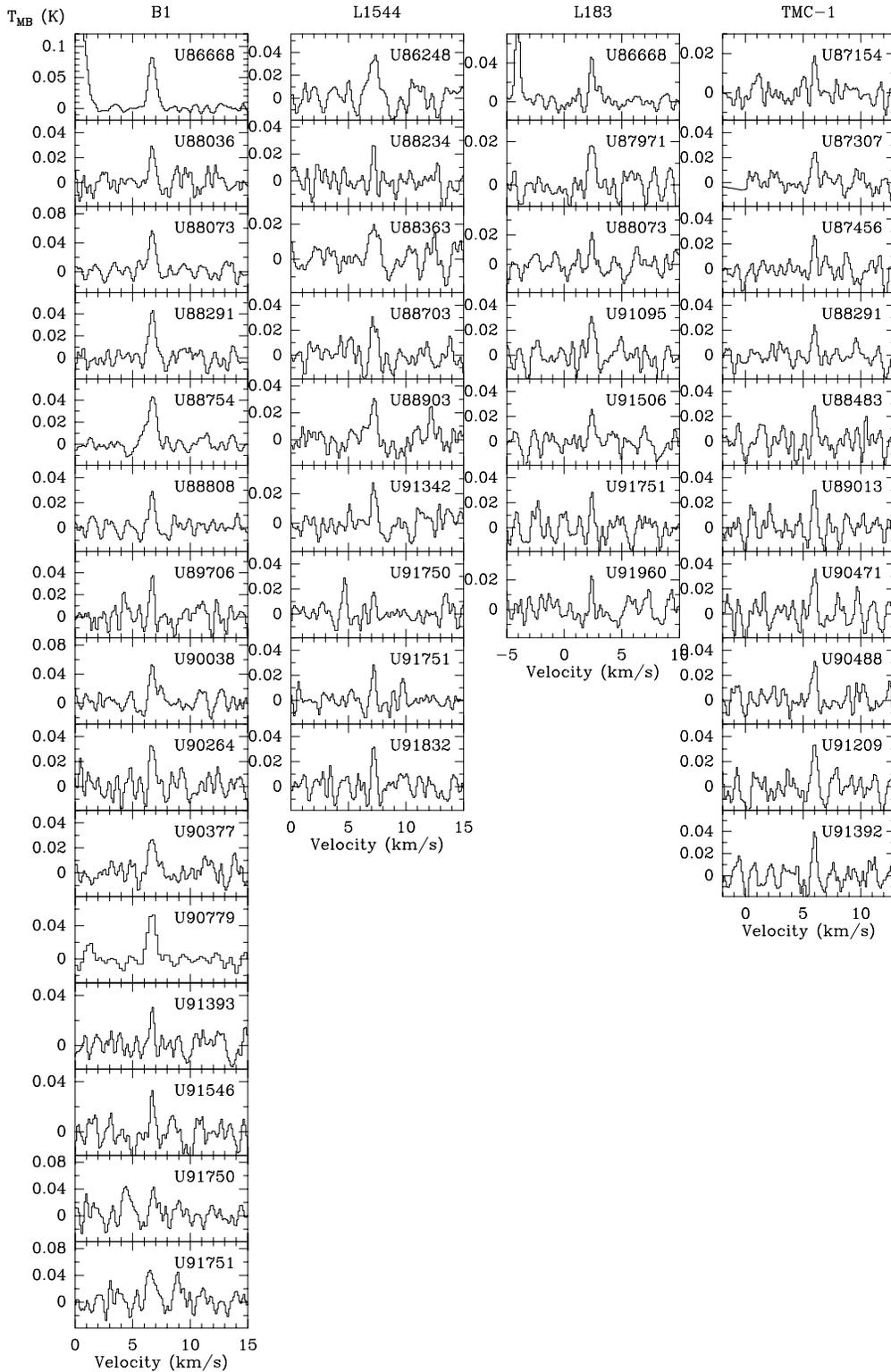


FIGURA 2.41: Perfiles de línea de las transiciones no identificadas en las cuatro fuentes. Nótese que en algún caso hay líneas que aparecen en varias fuentes.

cadras entre las que se encontraban en un principio especies como el D_2CS y el CH_2CHCH_3 , cuyas transiciones rotacionales se han detectado por primera vez durante este trabajo. Por esto es importante buscar y tratar de identificar estas líneas.

La Figura 2.41 presenta las líneas-U (del inglés *unidentified*) detectadas que aún permanecen sin identificar, siendo B1 la fuente con un mayor número de líneas desconocidas (2.1 líneas/GHz). Para el resto de fuentes, hemos encontrado una densidad de líneas-U ~ 1.5 líneas/GHz en L1544 y TMC-1, y de 1.1 líneas/GHz en L183. Para poder afirmar que éstas son líneas reales, en primer lugar se tuvo en cuenta que apareciera la “línea” negativa debida al modo de observación (ver Figura 2.6), con lo cual también se elimina la posibilidad de que se trate de canales imperfectos del espectro, que normalmente se presentan como un único canal o dos con una elevada temperatura de antena. Las posibles imperfecciones de la línea de base obtenida con este método tampoco pueden ser confundidas con posibles líneas, puesto que las primeras suelen ser mucho más anchas que las líneas observadas. Otra fuente de confusión a la hora de identificar líneas en este modo de observación son las líneas mesosféricas, las cuales no son eliminadas puesto que no se hace una medida del cielo. Sin embargo estas líneas suelen tener una anchura mucho mayor que las líneas procedentes de las nubes oscuras y una forma muy característica. El hecho de que algunas líneas aparezcan en más de una fuente nos asegura que efectivamente son nuevas líneas, y además nos puede dar pistas sobre su origen.

2.6. Resumen y conclusiones

En este capítulo se han presentado los resultados preliminares del primer barrido espectral a 3 mm realizado en varias condensaciones pre-estelares. El número de líneas y moléculas detectadas muestran, teniendo en cuenta el pequeño rango espectral cubierto, la riqueza química de estas fuentes, en las que se han detectado especies complejas de hasta 9 átomos. Las fuentes que presentan mayor densidad de líneas son TMC-1 y L1544 (unas 10 líneas/GHz), mientras que L183 es la fuente donde menos líneas hemos detectado (7.7 líneas/GHz). B1 muestra, en general, las mayores intensidades de línea, debido a la gran columna de densidad que contiene esta fuente, y también mayores anchuras que el resto de las fuentes observadas, lo que nos indica que en ella existe cierta actividad dinámica producto de las primeras fases de formación estelar.

La detección de dos especies nunca observadas antes en el espacio (D_2CS y propileno) demuestra la importancia de este tipo de estudios a la hora de conocer la riqueza molecular de estas fuentes, lugar del nacimiento de estrellas y sistemas planetarios como el nuestro. Además esto pone a prueba los modelos químicos al intentar explicar la formación de especies moleculares complejas en estas regiones frías y quiescentes. Esta realidad está fomentando la construcción de nuevos espectrómetros que proporcionen la alta resolución espectral necesaria en las nubes oscuras, junto con un mayor ancho de banda, y también receptores más sensibles y con un mayor número de canales espectroscópicos, para así realizar barridos espectrales de forma más rápida y efectiva.

Capítulo 3

Barrido espectral a 3 mm en nubes oscuras: Análisis

3.1. Densidades de columna

En este Capítulo se describe la obtención de parámetros físicos, tales como la densidad de columna y temperatura rotacional de cada una de las especies observadas, a partir de la intensidad de sus líneas. Para ello se han utilizado los llamados diagramas rotacionales (ver Apéndice A, para una descripción detallada). Este método consiste básicamente en la representación de la densidad de columna normalizada con el peso estadístico de cada nivel rotacional, en función de sus energías. En condiciones de equilibrio termodinámico (ET), la representación logarítmica de estas variables describe una recta cuya pendiente es proporcional a $1/T$, y a partir de su ordenada en el origen se obtiene la columna de densidad total N de la especie. Para poder aplicar este método hemos de asumir que existe equilibrio termodinámico local (ETL), y que las líneas observadas son ópticamente delgadas. También es importante observar varias transiciones de una molécula, de manera que con un mayor número de puntos obtendremos un mejor ajuste. Todos los parámetros espectroscópicos de cada transición necesarios para obtener los puntos del diagrama rotacional (A_{ul} , E_u , g_u , etc.), se han tomado de los catálogos JPL (Pickett et al. 1998), CDMS (Müller et al. 2001, 2005), y también de Cernicharo et al. (2000) para las nuevas especies detectadas durante este trabajo.

En general, dentro de los 7 GHz que abarca este barrido espectral, hemos detectado una transición rotacional de cada molécula observada y sólo en unas pocas especies hemos observado al menos dos líneas y construir así un diagrama rotacional con unos pocos puntos. Las Figuras 3.1–3.5 muestran los diagramas en esos casos, y la Tabla 3.1 recoge los resultados obtenidos. Los errores en la Tabla, vienen dados principalmente por el error en el ajuste del diagrama rotacional, más que por el error en la obtención de los parámetros de la línea observada y el error en la calibración (representados por las barras de error en las Figuras). Al realizar un ajuste con tan pocos datos los errores obtenidos son grandes, incluso en los casos en que tenemos más de dos líneas (ver Tabla 3.1). El error es aún mayor para los diagramas en los que únicamente disponíamos de dos puntos, dando lugar incluso a algún resultado poco probable (Figs. 3.1 y 3.3). En el caso del C_2S en B1, la pendiente obtenida

para la recta era prácticamente nula, lo que resultaba en un valor excesivamente elevado de la temperatura. Para el HCOOH en L183, la pendiente que se obtendría es negativa, y por tanto también lo sería la temperatura rotacional. Entonces, para obtener la columna de densidad de estas dos especies se consideró que el gas está termalizado, en cuyo caso $T_{\text{kin}} \sim T_{\text{ex}} \sim T_{\text{rot}}$, y se utilizó en la expresión A.8 una temperatura rotacional de 10 K, igual a la temperatura cinética típica en estas nubes.

Para las moléculas con estructura hiperfina HCN, HC^{17}O^+ , y NH_2D , sus componentes se ajustaron mediante el método HFS contenido en el programa de reducción de datos CLASS (ver Apéndice A). Este método proporciona como resultado al ajuste de las líneas la temperatura de excitación del multiplete, la opacidad de la componente principal y la densidad total de columna de la especie. La Tabla 3.2 muestra los resultados obtenidos. Los errores en esta tabla representan el error de dicho ajuste a las componentes hiperfinas de la transición, más el error debido a la calibración. El error en el cálculo de la densidad de columna para el HC^{17}O^+ es especialmente elevado ya que, excepto para B1 y TMC-1, la detección es poco clara (ver Fig. 2.25).

La aproximación a la temperatura mencionada anteriormente ($T_{\text{rot}} = 10$ K) se utilizó también para obtener la densidad de columna de la molécula en los casos en los que se ha observado una única transición. Entre estas especies con una sola transición observada, tres de ellas muestran una estructura fina e hiperfina compleja $-\text{C}_2\text{H}$, C_3N y $\text{HCO}-$, cuyas componentes no era posible ajustar con el método HFS, por lo que hemos utilizado expresiones ligeramente diferentes a la ecuación A.8 para obtener su densidad de columna. Estos casos especiales se describen también en el Apéndice A. Los resultados obtenidos para la densidad de columna de todos estos casos en los que hemos asumido una temperatura rotacional de 10 K se encuentran en la Tabla 3.3. El error considerado aquí tiene en cuenta, además de los procedentes de la calibración del espectro y del ajuste gaussiano, el hecho de que hemos supuesto un valor para la temperatura y que en la mayor parte de las especies hemos utilizado una sola transición. Se ha comprobado que los valores que se obtienen de la densidad de columna al variar la temperatura entre 8–12 K, se encuentran dentro de los márgenes de error.

Por último, los límites superiores a la densidad de columna en los casos de no detección se calcularon como 2σ , con $\sigma = \sqrt{\Delta v \cdot \delta v} \sigma_{rms}$, donde Δv es la anchura esperada de la línea, δv la resolución espectral, y σ_{rms} el ruido rms del espectro observado.

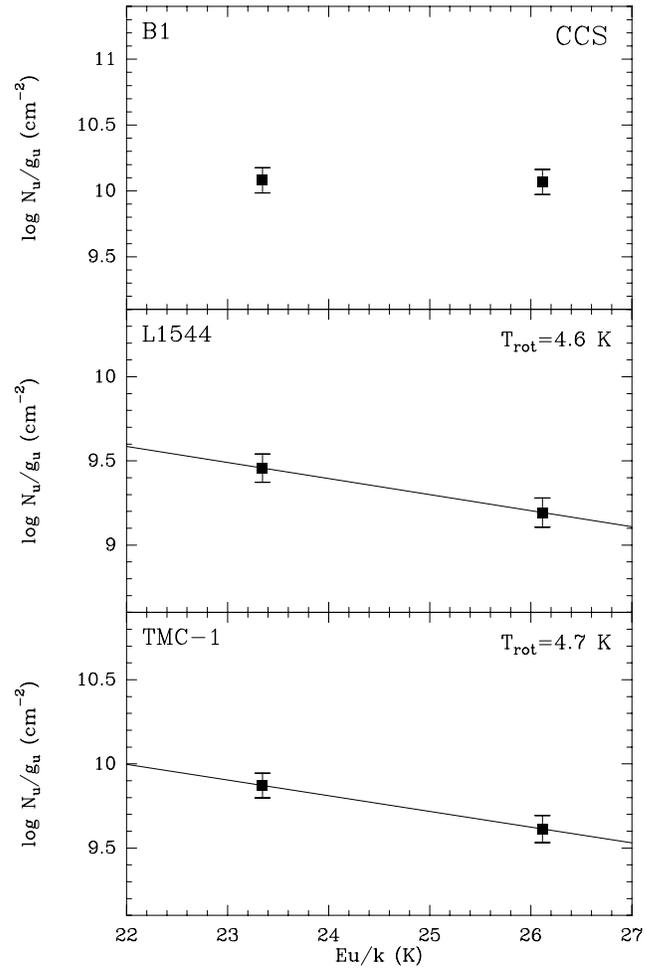


FIGURA 3.1: Diagramas rotacionales obtenidos para el CCS. En B1 no se realizó el ajuste, ya que el valor de la temperatura resultaba ser excesivamente elevado (ver texto).

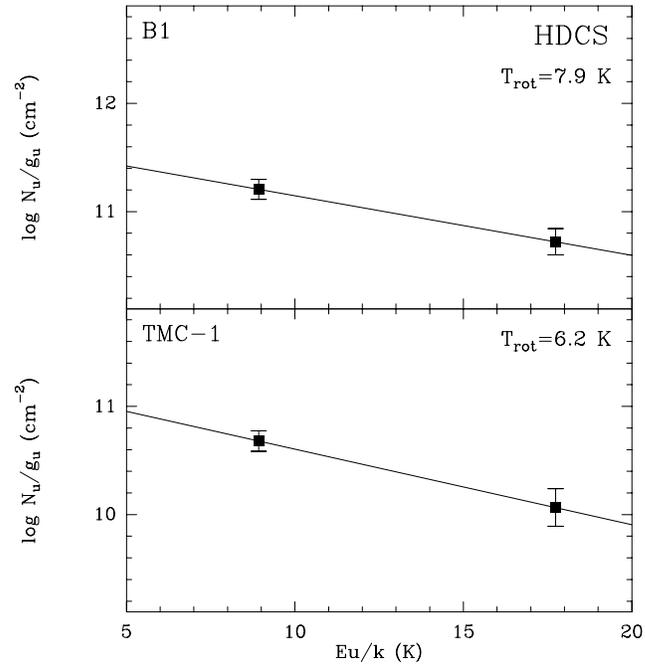


FIGURA 3.2: Diagramas rotacionales obtenidos para el HDCS.

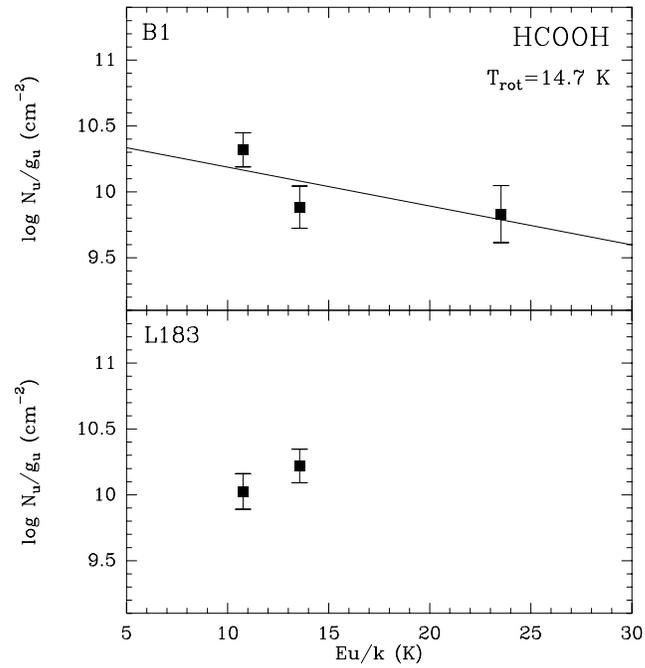


FIGURA 3.3: Diagramas rotacionales obtenidos para el HCOOH. En L183 la temperatura resultante del ajuste de los puntos resultaba ser negativa (ver texto).

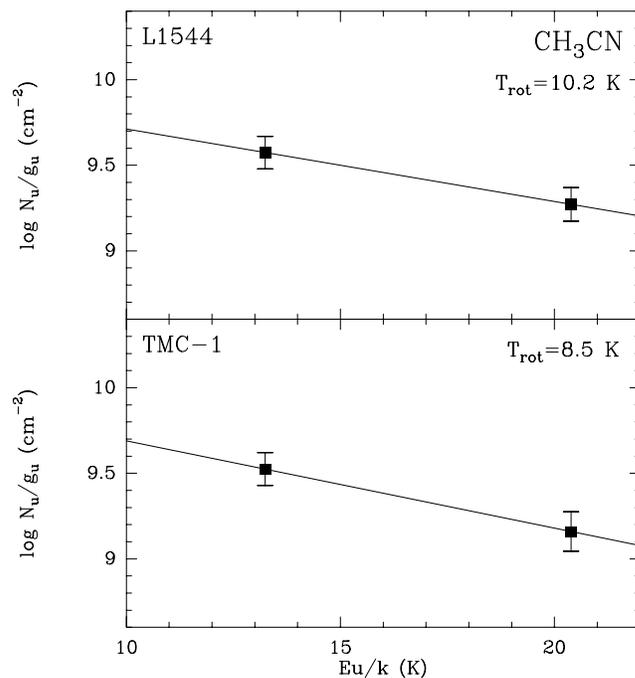
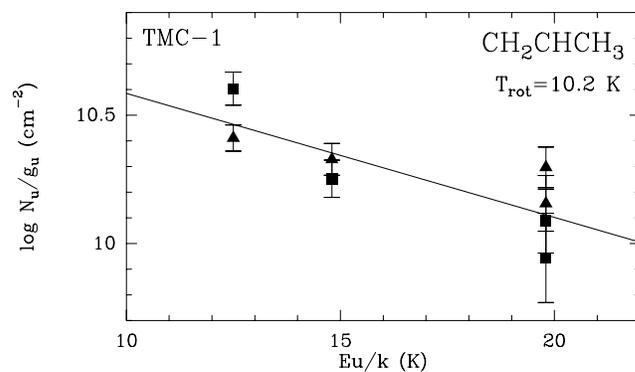
FIGURA 3.4: Diagramas rotacionales obtenidos para el CH_3CN .FIGURA 3.5: Diagrama rotacional obtenido para el CH_2CHCH_3 . Los cuadrados representan las transiciones de la especie A , mientras que los triángulos denotan las correspondientes a la especie E .

TABLA 3.1: Temperaturas y densidades de columna obtenidas de los diagramas rotacionales. En algunos casos la temperatura se ha fijado en 10 K (ver notas).

Especie	Fuente	T_{rot} (K)	N (10^{12} cm $^{-2}$)
CCS	B1	10^a	9.3 (1.7)
	L1544	5	~ 13
	L183	10^b	≤ 0.2
	TMC-1	5	~ 32
HDCS	B1	8	~ 9
	L1544	10^c	1.3 (0.5)
	L183	10^c	0.62 (0.3)
	TMC-1	6	~ 2
HCOOH	B1	15 (13)	~ 3 (3)
	L1544	10^b	≤ 0.5
	L183	10^a	2.3 (1.3)
	TMC-1	10^b	≤ 0.4
CH ₃ CN	B1	10^b	≤ 0.5
	L1544	10	~ 3
	L183	10^b	≤ 0.2
	TMC-1	8	~ 2
CH ₂ CHCH ₃ ^d	B1	10^b	≤ 6.3
	L1544	10^b	≤ 6.8
	L183	10^b	≤ 4.9
	TMC-1	9 (3)	18 (10)

^a Resultado obtenido en el diagrama rotacional poco plausible (ver texto)

^b Límite superior para la densidad de columna, se obtuvo para $T_{\text{rot}} = 10$ K

^c Sólo una línea observada

^d Suma de las especies *A* y *E*

TABLA 3.2: Resultados para las transiciones con estructura hiperfina obtenidos a partir del método HFS en CLASS.

Especie	Fuente	T_{ex} (K)	τ^a	N (10^{12} cm $^{-2}$)
H ¹³ CN	B1	3.72	0.67	2.4 (0.1)
	L1544	3.29	0.84	1.1 (0.1)
	L183	3.14	0.51	0.8 (0.2)
	TMC-1	3.30	1.16	1.71 (0.08)
HC ¹⁷ O ⁺	B1	2.74	2.24	2.1 (0.4)
	L1544	~ 3	0.04	0.03 (0.5)
	L183	~ 3	0.04	0.03 (1)
	TMC-1	2.74	1.33	0.6 (0.7)
NH ₂ D	B1	5.18	1.39	239.7 (0.2)
	L1544	4.65	1.41	165.9 (0.2)
	L183	5.70	0.92	99.9 (0.9)
	TMC-1 ^c			≤ 0.07

^a Opacidad de la componente principal del multiplete

^b Límite superior a la densidad de columna, se consideró $T_{\text{rot}} = 10$ K

TABLA 3.3: Densidades de columna obtenidas asumiendo una temperatura de 10 K. Los espacios en blanco indican transiciones que no fueron observadas.

Especie	N (10^{12} cm $^{-2}$)			
	B1	L1544	L183	TMC-1
^{13}CS	2.5 (0.3)			0.8 (0.1)
SO	146 (7)	13 (1)	28 (3)	1.5 (0.5)
SiO	0.05 (0.01)	≤ 0.009	≤ 0.008	≤ 0.006
CCH	1008 (26)	346 (24)	163 (2)	607 (70)
CC ^{34}S	≤ 0.07	≤ 0.08	≤ 0.07	0.3 (0.1)
HCN ^a	120 (5)	55 (5)	40 (10)	85 (4)
HC ^{15}N	0.43 (0.05)	0.21 (0.03)	0.07 (0.02)	0.21 (0.03)
HNC ^a	255 (15)	130 (5)	85 (5)	100 (5)
HN ^{13}C	5.1 (0.3)	2.6 (0.1)	1.7 (0.1)	2.0 (0.1)
H ^{15}NC	1.3 (0.1)	0.62 (0.07)	0.36 (0.04)	0.53 (0.06)
HCO	34 (10)	8 (1)	6 (1)	8 (3)
HCO $^+$ ^a	285 (15)	58 (3)	44 (2)	88 (4)
H $^{13}\text{CO}^+$	5.7 (0.3)	1.17 (0.06)	0.89 (0.05)	1.75 (0.09)
c-C $_3\text{H}$	5 (2)	3.4 (0.8)	0.74 (0.05)	6 (1)
C $_3\text{N}$	≤ 1.3	6.5 (0.2)	≤ 1.0	16 (4)
C $_3\text{O}$	0.4 (0.1)	≤ 0.10	≤ 0.08	0.22 (0.09)
D $_2\text{CS}$	6.0 (0.9)	≤ 0.34	≤ 0.26	≤ 0.30
HNCO	33 (2)	16.1 (0.9)	10.9 (0.6)	14.9 (0.9)
HCCCN	28 (2)	26 (1)	2.6 (0.3)	51 (3)
HCC ^{13}CN	≤ 0.14	0.5 (0.1)	≤ 0.15	0.9 (0.2)
HC ^{13}CCN	≤ 0.14	0.6 (0.2)	≤ 0.14	0.5 (0.2)
H $^{13}\text{CCCN}$	≤ 0.14	0.4 (0.1)	≤ 0.08	0.6 (0.2)
DCCCN	2.4 (0.6)			1.4 (0.3)
HCCNC	≤ 0.20	1.4 (0.3)	≤ 0.12	2.1 (0.3)
CH $_2\text{DOH}$	45 (6)	8 (2)	12 (2)	≤ 1.6
CH $_3\text{OD}$	3 (1)	≤ 0.4	≤ 0.5	≤ 0.4
HC $_3\text{NH}^+$	≤ 0.6	≤ 0.7	≤ 0.6	3 (1)
CH $_2\text{CHCN}$	≤ 0.2	0.6 (0.2)	≤ 0.12	0.9 (0.3)
HCOOCH $_3$ ^b	14 (5)	≤ 2.2	≤ 1.6	≤ 2.2

^a Líneas ópticamente espesas, la columna de densidad se ha obtenido a partir de la correspondiente a su sustitución isotópica ^{13}C asumiendo una razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 50$ en nubes oscuras (Cernicharo & Guélin 1987)

^b Suma de las especies A y E

3.2. Abundancias

Las abundancias relativas al H_2 de todas las especies observadas se muestran en la Tabla 3.4. Para obtener estas abundancias hemos tomado las densidades de columna de H_2 encontradas en la bibliografía de otros estudios realizados en nuestras fuentes. En el caso de B1 y L1544 los valores utilizados fueron derivados a partir de la emisión del polvo a $850 \mu\text{m}$ y 1.3 mm respectivamente (Hirano et al. 1999; Ward-Thompson et al. 1999). Para L183 y TMC-1 (Swade 1989; Cernicharo & Guélin 1987), la densidad de columna del hidrógeno molecular fue calculada a partir de la densidad de columna observada de $C^{18}O$ y la razón $C^{18}O/H_2 = 1.7 \cdot 10^{-7}$ (Frerking et al. 1982).

La Figura 3.6 muestra las abundancias de todas la especies observadas en las cuatro fuentes, incluyendo también los límites superiores en el caso de no detección. En general las mayores abundancias observadas corresponden a las moléculas SO , C_2H , HCN , HNC , HCO^+ , $HNCO$, NH_2D , y HC_3N , en su mayor parte típicas de nubes oscuras. En el caso del $HNCO$, a pesar de que no se ha observado comunmente en nubes oscuras, presenta abundancias $\sim 10^{-9}$, demostrando ser una molécula común y abundante en regiones con condiciones muy diferentes en el medio interestelar.

Para que la comparación entre las fuentes observadas resultara más sencilla, hemos calculado las razones entre las abundancias de todas las moléculas de cada fuente con respecto a las de TMC-1 (ver Figura 3.7). Hemos elegido esta fuente como referencia por ser TMC-1 una fuente bien estudiada y conocida y cuyas abundancias son las que intentan reproducirse típicamente en los modelos de química de nubes oscuras. En esta Figura vemos que, en general, las abundancias observadas en las otras tres fuentes son menores que en TMC-1, excepto para SO , $HCOOH$ y algunas especies deuteradas entre las que destaca claramente el amoniaco deuterado. A continuación se describen los resultados generales obtenidos en cada una de las fuentes individualmente, y en la sección 3.3 se estudia con más detalle las conclusiones derivadas de las abundancias medidas en algunas especies interesantes.

3.2.1. Barnard 1

Esta fuente muestra una alta abundancia en SO , y en especies deuteradas como NH_2D y CH_2DOH , en particular de D_2CS y CH_3OD , las cuales se detectaron únicamente en esta fuente. Es también importante destacar la detección de $HCOOH$, $HCOOCH_3$ y SiO (aunque sus abundancias sean similares a los límites superiores en TMC-1), ya que demuestra la existencia de una química y/o actividad en B1 diferente al resto de fuentes observadas. La Figura 3.7 evidencia también la deficiencia en especies carbonadas respecto a TMC-1, como se ve claramente de las abundancias observadas de C_2S , $c-C_3H$, y HC_3N . Además las especies no detectadas en B1 son todas cadenas carbonadas como C_3N , $CC^{34}S$, las sustituciones isotópicas ^{13}C de HC_3N , su isómero $HCCNC$ y el ión precursor de éstos (HC_3NH^+), CH_3CN , CH_2CHCN , y CH_2CHCH_3 . Esto demuestra otra vez la diferencia en la química de B1, y también de L183, con respecto a las fuentes L1544 y TMC-1, en las que encontramos mayores abundancias de estas especies ricas en carbono.

TABLA 3.4: Abundancias relativas al H₂ de las moléculas observadas para cada fuente.

Especie	[X]/[H ₂] (10 ⁻¹⁰) ^a			
	B1	L1544	L183	TMC-1
¹³ CS	0.2			0.8
SO	11	1.0	37	1.5
SiO	0.004	≤ 0.0007	≤ 0.01	≤ 0.006
CCH	78	27	215	604
CCS	0.7	1.0	≤ 0.2	32
CC ³⁴ S	≤ 0.005	≤ 0.006	≤ 0.09	0.3
HCN	9.2	4.3	53	85
H ¹³ CN	0.2	0.09	1.1	1.7
HC ¹⁵ N	0.03	0.02	0.09	0.2
HNC	20	9.9	114	102
HN ¹³ C	0.4	0.2	2.3	2.0
H ¹⁵ NC	0.1	0.05	0.5	0.5
HCO	2.7	0.6	8.2	8.1
HCO ⁺	22	4.5	58	88
H ¹³ CO ⁺	0.4	0.09	1.2	1.8
HC ¹⁷ O ⁺	0.2	0.003	0.05	0.7
c-C ₃ H	0.4	0.3	1.0	6.5
C ₃ N	≤ 0.1	0.5	≤ 1.3	16
C ₃ O	0.03	≤ 0.008	≤ 0.1	0.2
D ₂ CS	0.5	≤ 0.03	≤ 0.3	≤ 0.3
HDCS	0.7	0.1	0.8	2.4
HNCO	2.5	1.2	14	15
NH ₂ D	17	13	131	≤ 0.07
HCCCN	2.2	2.0	3.4	51
HCC ¹³ CN	≤ 0.01	0.04	≤ 0.2	0.9
HC ¹³ CCN	≤ 0.01	0.05	≤ 0.2	0.5
H ¹³ CCCN	≤ 0.01	0.03	≤ 0.1	0.6
DCCCN	0.2			1.4
HCCNC	≤ 0.02	0.1	≤ 0.2	2.1
HCOOH	0.2	≤ 0.04	3.0	≤ 0.4
CH ₃ CN	≤ 0.04	0.2	≤ 0.3	2.4
CH ₂ DOH	3.5	0.6	15	≤ 1.6
CH ₃ OD	0.3	≤ 0.04	≤ 0.7	≤ 0.5
HC ₃ NH ⁺	≤ 0.05	≤ 0.06	≤ 0.8	3.2
CH ₂ CHCN	≤ 0.02	0.04	≤ 0.2	0.9
HCOOCH ₃	1.1	≤ 0.2	≤ 2.1	≤ 2.2
CH ₂ CHCH ₃	≤ 0.5	≤ 0.5	≤ 6.4	18

Nota.— La densidad de columna del H₂ para cada fuente se ha tomado de la bibliografía: Barnard 1: $N(\text{H}_2) = 1.3 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (Hirano et al. 1999); L1544: $N(\text{H}_2) = 1.3 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (Ward-Thompson et al. 1999); L183: $N(\text{H}_2) = 7.6 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (Swade 1989); TMC-1(CP): $N(\text{H}_2) = 1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ (Cernicharo & Guélin 1987).

^a El error en las abundancias es $\sim 20 - 30\%$.

3.2.2. L1544

Es una fuente rica en especies carbonadas por lo que guarda similitud en la química con TMC-1, como se aprecia en la Figura 3.7. Sin embargo las abundancias obtenidas son menores que en el pico de los cianopoliinos de TMC-1. Entre estas cadenas de carbono, se han detectado todas las especies isotópicas del HC_3N (aunque no el ión precursor de éstas), CH_2CHCN y CH_3CN , y no se ha encontrado emisión de CC^{34}S , C_3O y CH_2CHCH_3 . Otras especies que no se han detectado en L1544 son D_2CS y CH_3OD , a pesar de ser una fuente rica en especies deuteradas, como muestran las abundancias de NH_2D y de CH_2DOH , que aún siendo menores que en B1 si destacan sobre las observadas en TMC-1, en especial la abundancia de NH_2D . Otra molécula que destaca por su alta abundancia es SO , detectada débilmente en TMC-1 pero observada en L1544 con una abundancia similar a la de otras moléculas presentes en ambas fuentes, como C_2S , HCO^+ HC_3N (ver Figura 3.6).

3.2.3. L183

Es la fuente donde hemos detectado el menor número de especies moleculares aunque para éstas muestra grandes abundancias, similares a TMC-1. Por ejemplo, la Fig. 3.7 muestra abundancias en L183 muy similares a TMC-1 de HCN , HNC , HCO^+ y sus sustituciones isotópicas ^{13}C , y también de HCO y HNCO . Sin embargo presenta claras diferencias en algunas especies que demuestran una química diferente a la de TMC-1, debido a la mayor presencia de especies que contienen oxígeno sobre las especies con carbono, lo cual la asemeja más a B1. Esto se puede ver en las bajas abundancias observadas en C_2S , $c\text{-C}_3\text{H}$, y HC_3N , y la no detección de otras cadenas de carbono como C_3N , los isotopólogos de HC_3N , CH_3CN , CH_2CHCN , y CH_2CHCH_3 . También coincide con B1 en la alta abundancia observada de SO y de especies deuteradas como CH_2DOH y en especial NH_2D , donde hemos observado la mayor abundancia de esta especie deuterada. También es importante destacar la detección del ácido fórmico (HCOOH), que junto con B1 son las dos únicas fuentes donde hemos encontrado emisión procedente de esta especie.

3.2.4. TMC-1 (CP)

Es una fuente que destaca por su riqueza en cadenas carbonadas y en particular en los cianopoliinos, por lo que esta posición de TMC-1 es especialmente conocida. Es la única fuente donde hemos detectado el ión HC_3NH^+ , precursor químico que los cianopoliinos, y el propileno (CH_2CHCH_3), que es la especie con mayor número de átomos y más saturada detectada en este barrido espectral. En cuanto a especies no detectadas destaca NH_2D y CH_2DOH , observadas con una abundancia importante en el resto de las fuentes. La primera es especialmente sorprendente ya que, como otras nubes oscuras, es rica en amoniaco. Además esta fuente no parece ser deficiente en deuterio, puesto que se han detectado HDCS y DC_3N . El problema del NH_2D ya ha sido tratado con anterioridad y se discute más adelante (ver Sección 3.3.4). También es importante señalar la pequeña abundancia de SO que presenta esta fuente, lo que nos indica diferencias con las otras fuentes, incluso con L1544 la cual es la más similar en cuanto a especies observadas con TMC-1.

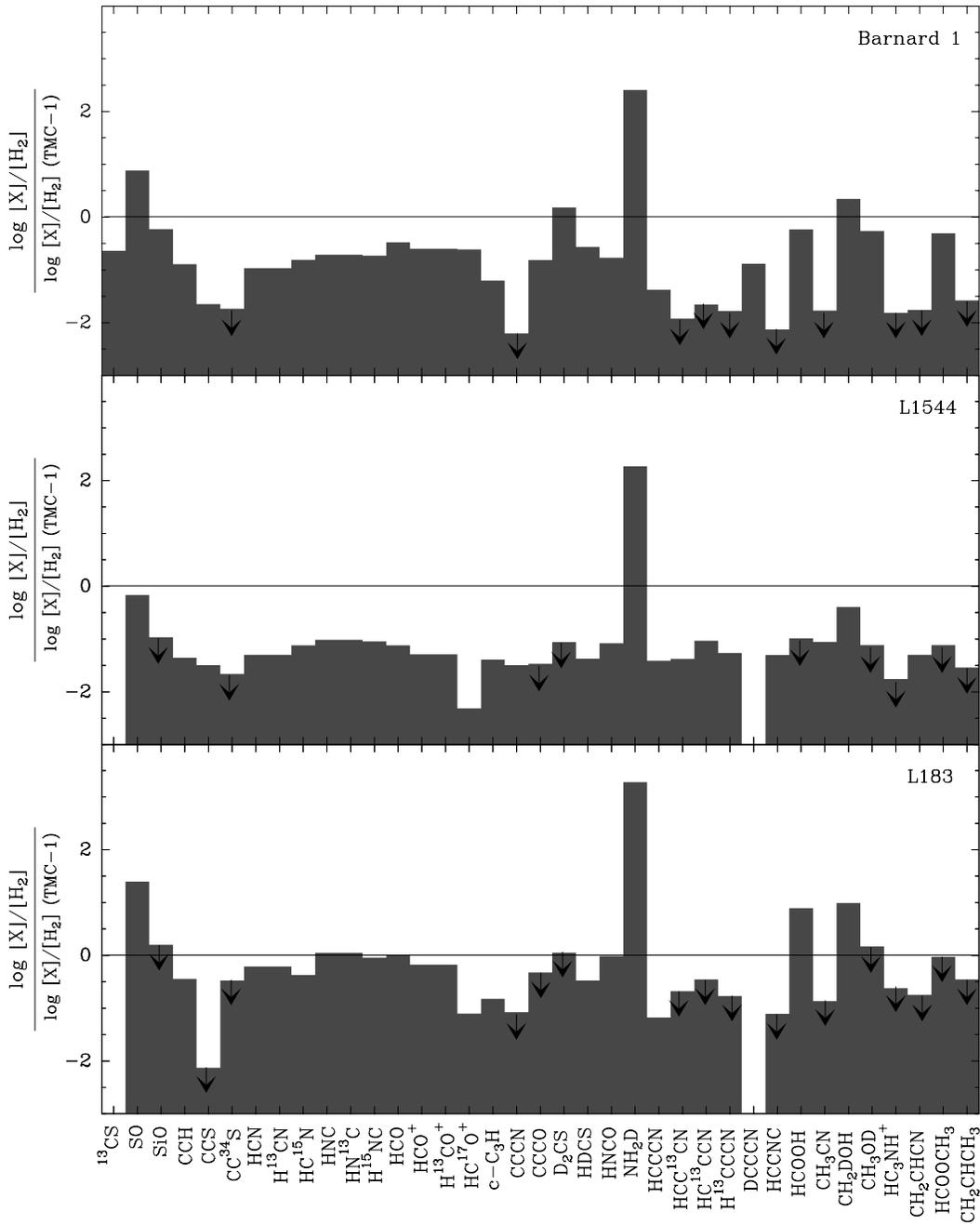


FIGURA 3.7: Abundancias de B1, L1544 y L183 respecto a las medidas en TMC-1.

3.3. Discusión

3.3.1. CS, SO y HCO⁺

Como ya se dijo en la sección 2.5, a estas tres moléculas se les atribuye cierta dependencia con la edad y el estado evolutivo de la nube. Esto lleva a la comparación entre ellas y a utilizar las relaciones de sus abundancias como relojes químicos que nos indican el estado evolutivo en el que se encuentra la nube (Ruffle et al. 1999; Morata et al. 2005). La Figura 3.8 muestra los diagramas de evolución en el tiempo de estas y otras especies (Bergin & Langer 1997).

El CS se considera una molécula de formación temprana, ya que su producción implica al ión S⁺ y ocurre en las primeras fases de evolución química. Más tarde, el CS se incorpora al ión tioformil HCS⁺ y su abundancia se considera bastante constante en el tiempo (Nejad & Wagenblast 1999). Además, cuando las condensaciones se encuentran más evolucionadas químicamente y la densidad es mayor, el CS empieza a congelarse en la superficie de los granos de polvo, desapareciendo de la fase gas (ver, p.ej., Bergin & Langer 1997). Por otro lado, el SO se forma principalmente a partir de la reacción neutro-neutro $S + O_2 \rightarrow SO + O$, y puesto que la formación de O₂ en nubes oscuras está también determinada por reacciones neutro-neutro, el tiempo para la formación de O₂ y SO es larga (Millar & Herbst 1990). Además el monóxido de azufre es destruido por el carbono atómico, por lo que su formación se beneficia de la desaparición del CO de la fase gas. Por tanto, su abundancia aumenta lentamente y probablemente será pequeña mientras el gas sea rico en carbono atómico. Después la abundancia de SO aumentará al consumirse el carbono en la formación de CO, es decir, en las últimas fases de la evolución química (Bergin & Langer 1997; Nejad & Wagenblast 1999). El pico tardío del SO y la estabilidad de la densidad de columna del CS (hasta que éste se congela en los granos), ha llevado a sugerir que la razón de abundancias CS/SO puede utilizarse como reloj químico (Ruffle et al. 1999). Nilsson et al. (2000) llegan a la misma conclusión a partir de modelos de química en fase gaseosa. Sin embargo, esto no es tan sencillo, puesto que el cociente CS/SO es sensible a varios factores como la razón C/O inicial en la nube, efectos en la densidad, influencia de rayos X, etc. (Bergin et al. 1997; Nilsson et al. 2000). A partir de modelos de química dependientes del tiempo, se ha encontrado que la razón CS/SO aumenta durante la evolución de una nube molecular estabilizándose más tarde en un valor dependiente de la razón C/O inicial. Así, cuando se observe la razón CS/SO en dos nubes individuales, no es sencillo distinguir entre los efectos debidos a la evolución en el tiempo de los que provienen de la razón C/O característica de la nube.

Del mismo modo, el HCO⁺ es una molécula tardía según los modelos de química, ya que se forma a partir del CO. Ha resultado ser un excelente trazador de las primeras fases de la formación estelar y de objetos estelares jóvenes (YSO), donde la emisión, extendida en el espacio, procedente de la transición rotacional $J = 1 - 0$ traza la envoltura mientras que la emisión de las líneas $J = 3 - 2$ y $J = 4 - 3$ se encuentra concentrada alrededor del objeto (ver, p.ej., Hogerheijde et al. 1997). En cuanto a su relación con CS, Morata et al. (2005) realizaron mapas de la nube molecular L673 en las líneas rotacionales $J = 2 - 1$ de CS y C³⁴S, y $J = 1 - 0$ de HCO⁺ y H¹³CO⁺. Estos autores encontraron que en las posiciones donde no existen

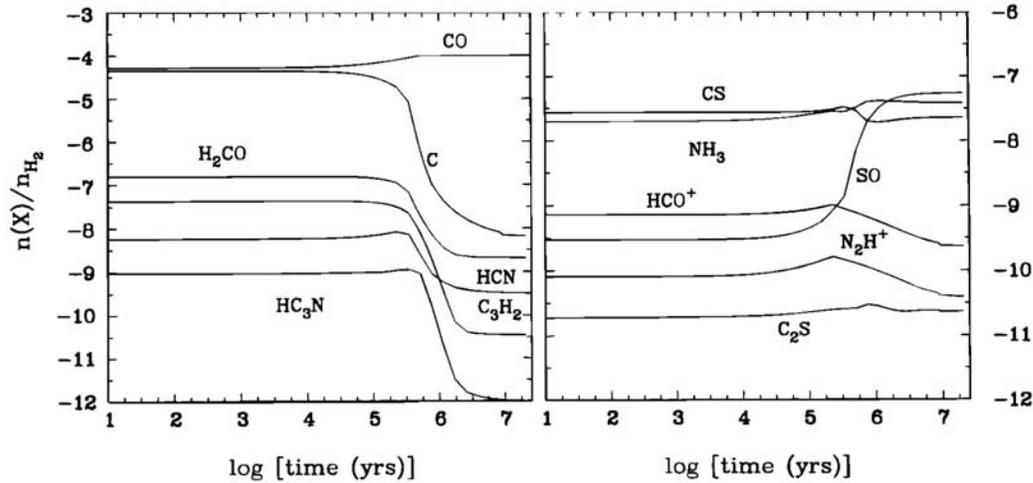


FIGURA 3.8: Diagramas de evolución en el tiempo de las abundancias relativas de varias moléculas (extraído de Bergin & Langer 1997). En este modelo se considera únicamente la química en fase gaseosa, sin interacción con los granos de polvo. La densidad de H_2 evoluciona desde un valor inicial $n(H_2) = 3.12 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$, hasta alcanzar un valor de equilibrio pero sin llegar al colapso gravitacional.

fuentes IRAS o de emisión en el submilimétrico, la columna de densidad del CS era mayor que la del HCO^+ , lo que indicaría que las condensaciones son químicamente más jóvenes. Por el contrario, en las posiciones que contenían una fuente IRAS o submilimétrica, la columna de densidad del HCO^+ resultó ser mayor que la del CS. Esto es lo que se espera en épocas tardías, cuando las condensaciones se encuentran químicamente más evolucionadas, el HCO^+ es más abundante y el CS comienza a desaparecer de la fase gas.

La Tabla 3.5 muestra las densidades de columna y abundancias de CS, SO y HCO^+ . La densidad de columna del CS se ha obtenido a partir de la especie isotópica ^{13}CS , que fue observada únicamente en B1 y TMC-1. Vemos que la abundancia de CS es algo menor en B1, de modo que es posible que esta especie haya comenzado a congelarse en los granos desapareciendo así de la fase gas, lo que indicaría que B1 se encuentra químicamente más evolucionada que TMC-1. Lo mismo parecen indicar las abundancias medidas de SO en ambas fuentes, de hecho la línea más intensa de SO se observa en B1, mientras que en TMC-1 se detecta débilmente. Las otras dos fuentes también muestran diferencias en cuanto a las abundancias de SO, L1544 presenta una abundancia similar a TMC-1 mientras que en L183 encontramos una abundancia similar a B1. Por tanto, estas dos últimas fuentes serían las condensaciones más evolucionadas químicamente, lo que concuerda con los modelos de estas dos nubes (ver Sección 2.2). A pesar de que L183 es un núcleo sin estrellas, esto no siempre implica que la fuente haya de ser químicamente joven (ver, p.ej., Kontinen et al. 2000). B1 sí muestra signos de actividad de formación estelar, como indican las dos fuentes de Clase 0 cercanas a la posición observada. Sin embargo, como se ha dicho anteriormente, la alta abundancia de SO en B1 y

TABLA 3.5: Abundancias relativas al H₂ de CS, SO y HCO⁺, y razones de abundancias entre ellas para B1 y TMC-1.

	B1	L1544	L183	TMC-1
CS/H ₂ ^a	9.7 10 ⁻¹⁰			4.2 10 ⁻⁰⁹
SO/H ₂	1.1 10 ⁻⁰⁹	1.0 10 ⁻¹⁰	3.7 10 ⁻⁰⁹	1.5 10 ⁻¹⁰
HCO ⁺ /H ₂	2.2 10 ⁻⁰⁹	4.5 10 ⁻¹⁰	5.8 10 ⁻⁰⁹	8.8 10 ⁻⁰⁹
CS/SO	0.86			28
CS/HCO ⁺	0.44			0.48

Nota.— Para el cálculo de abundancias se han tomado las densidades de columna de H₂ dadas en la Tabla 3.4.

^a La columna de densidad de CS se ha obtenido a partir del su sustitución isotópica ¹³CS, observado únicamente en B1 y TMC-1, y considerando una razón ¹²C/¹³C=50.

L183 podría deberse a la riqueza que presentan estas fuentes en especies oxigenadas, mientras que L1544 y TMC-1 son más ricas en moléculas con carbono y por tanto, las abundancias observadas de SO son menores. Para B1 y TMC-1 podemos calcular la razón de abundancias CS/SO (ver Tabla 3.5), que resultan ser muy diferentes en ambas fuentes, aunque aquí puede ser importante la diferencia de la razón C/O entre ambas fuentes. De hecho, también se han encontrado diferencias de las abundancias de CH₃OH y SO entre B1 y TMC-1, las cuales se explican en base a la mayor razón O/C en B1 (Bachiller et al. 1990b). En cuanto al HCO⁺, vemos que sus abundancias no siguen las conclusiones anteriores, puesto que la mayor abundancia es para TMC-1, seguida de L183 y B1. La única que coincide con el resultado de SO es L1544, que seguiría siendo la fuente químicamente más joven. De este modo, la razón CS/HCO⁺ resulta ser similar en B1 y TMC-1. Como se ha dicho antes, B1 contiene dos fuentes de Clase 0 muy cercanas a la posición observada, pero el pico de los cianopoliinos en TMC-1 no contiene ninguna fuente IR o submilimétrica, sin embargo según esto, parece estar químicamente evolucionada.

3.3.2. Cadenas de carbono

Típicamente se han relacionado las moléculas que contienen cadenas de carbono, como algunos radicales insaturados (C_nH y C_nS) y los cianopoliinos (HC_{2n+1}N), con los núcleos pre-estelares densos y jóvenes, ya que es en esa época cuando alcanzan su máximo de abundancia (ver p.ej., Herbst & Leung 1989). Esto se debe a que la producción de estas especies requiere una alta abundancia de carbono neutro (CI), condición que se satisface a edades tempranas en la evolución química, mientras que a edades tardías prácticamente todos los átomos de carbono libres se emplean en la producción de CO. Esto ha llevado a comparar sus abundancias con las de otras especies consideradas tardías, como el amoniaco (ver p.ej., Suzuki et al. 1992). Esto se debe a que la producción de NH₃ involucra al nitrógeno molecular, N₂, el cual se forma a partir de reacciones neutro-neutro y llega a ser abundante en las últimas fases de la evolución de la nube. De modo que razones de abundancias, como CCS/NH₃ o HC₃N/SO, han sido propuestas como indicadores del estado evolutivo de la nube.

Sin embargo, algunos modelos químicos predicen un segundo aumento en las abundancias de C_2S , C_2H y los cianopoliinos (ver Figura 3.9), relacionado con el aumento de la densidad del gas y la deposición de algunas especies en la superficie de los granos de polvo (Li et al. 2002; Ruffle et al. 1997, 1999). Este proceso elimina el oxígeno atómico de la fase gas, el cual destruye los iones necesarios para la formación de estas especies. Además, cuando el CO se encuentra congelado en los granos, el ión C^+ reacciona más fácilmente con moléculas que no contienen oxígeno. A continuación se describe en más detalle las relaciones entre estas especies.

C_2H y C_2S

La producción de las citadas especies carbonadas se encuentran ligadas entre sí, y por tanto debe reflejarse en sus abundancias. Por ejemplo, la producción química del C_2S está relacionada con la de otras cadenas de carbono en las nubes oscuras, en particular con la del C_2H . Esto se debe a que el ión S^+ no reacciona con el H_2 en nubes frías (Prasad & Huntress 1982), por tanto tendrá la oportunidad de reaccionar con hidrocarburos. Smith et al. (1988) consideraron la química en una nube fría y oscura sin radiación UV y propusieron la reacción entre S^+ y C_2H_2 como la principal vía para producir $HCCS^+$, el ión precursor del CCS. Otra posible vía de formación del C_2S es a partir de la reacción del ión S^+ con C_2H (Suzuki et al. 1988; Millar & Herbst 1990). En cuanto al radical etinilo, se forma a partir del ión $C_2H_2^+$, cuya recombinación disociativa con electrones da lugar al C_2H (Watson 1974). Este ión se piensa que está también involucrado en la producción de los cianopoliinos, en particular es uno de los precursores del HC_3N (ver más adelante).

Suzuki et al. (1992) realizaron un estudio en el que observaron CCS, HC_3N , HC_5N y NH_3 en varias nubes oscuras, y encontraron que la emisión de CCS era intensa en los núcleos quiescentes, sin signos de actividad de formación estelar, mientras que no se detectaban líneas de CCS, o eran marginales, en las regiones de formación de estrellas. Estos autores encontraron una correlación positiva entre las densidades de columna de CCS con las de HC_3N y HC_5N , lo que indica que su producción química se encuentra relacionada (ver también Ruffle et al. 1997). Por otro lado, no encontraron relación entre las densidades de columna de CCS con NH_3 , además de que ambas especies mostraban distribuciones espaciales diferentes. Los modelos de química predicen que la abundancia del C_2S disminuye rápidamente después de unos 10^5 años, ya que es una molécula polar y se congela fácilmente en la superficie de los granos al aumentar la densidad del núcleo. Además este radical es destruido por los iones HCO^+ y H_3O^+ , cuyas abundancias aumentan hasta los 10^6 años (Bergin & Langer 1997). Todo esto sugiere que el C_2S es una molécula temprana en evolución química, en concordancia con la baja abundancia encontrada en núcleos con formación estelar, que se espera que sean más viejos. Por tanto, la emisión de CCS traza núcleos pre-estelares en su fase más joven, pero también las envolturas de condensaciones muy densas en fases tardías (Lai et al. 2000).

HC_3N

La abundancia de HC_3N ha sido sugerida como indicador de la evolución temporal o del grado de empobrecimiento del gas, al depositarse algunas especies en

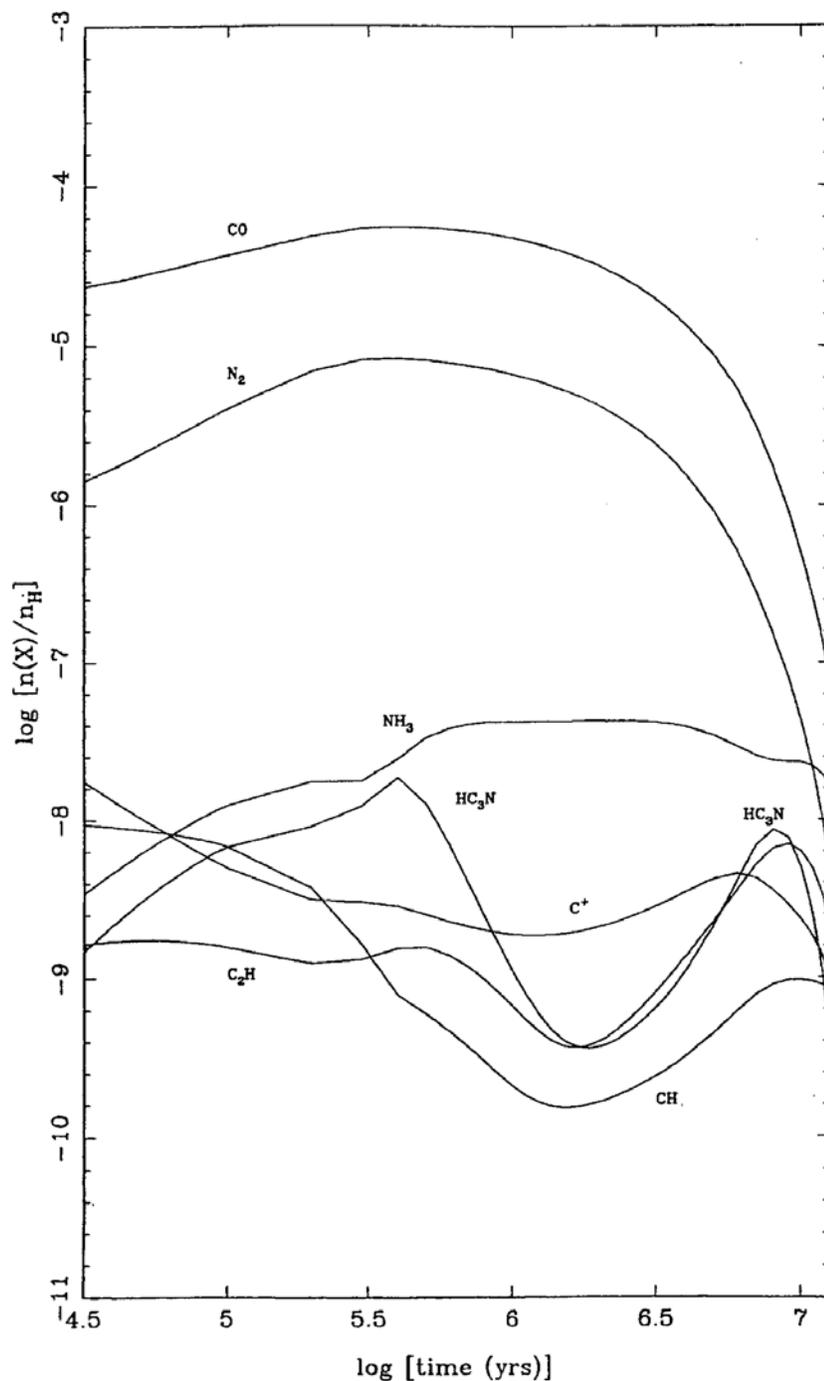


FIGURA 3.9: Variación con el tiempo de las abundancias relativas de C_2 y HC_3N , donde se muestra su segundo pico en abundancia (extraído de Ruffle et al. 1997). En este modelo se ha considerado una densidad de H_2 constante de $2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y una extinción visual $A_V = 10$. En este caso sí se tiene en cuenta cierta interacción con los granos de polvo, representado por el parámetro D , que está relacionado con el tamaño del grano y la eficiencia de atrapar ciertas moléculas de la fase gas. Para este modelo este parámetro toma un valor $D = 0.1$.

la superficie de los granos, en nubes oscuras y en núcleos pre-estelares (ver, p.ej., Hirahara et al. 1992; Ruffle et al. 1997; Caselli et al. 1998). La abundancia de HC_3N alcanza un máximo temprano en la evolución de las nubes oscuras, cuando una cantidad sustancial de carbono se encuentra en forma atómica en la fase gaseosa, pero esta abundancia también aumentará a edades tardías cuando algunas especies pesadas se ven atrapadas en los granos de polvo (Ruffle et al. 1997). Debido a su alto momento dipolar, y también a que es una especie temprana en evolución, el HC_3N debe ser útil a la hora de obtener las condiciones de los núcleos pre-estelares.

Las vías de formación que se han sugerido para el HC_3N involucran especies como el acetileno y el HCN protonado, o bien la reacción de HCN o HNC con el ión C_2H_2^+ , para producir el ión HC_3NH^+ , precursor del cianoacetileno (Mitchell et al. 1979; Schiff & Bohme 1979; Winnewisser & Walmsley 1979; Kawaguchi et al. 1994). Otras reacciones entre iones que contienen nitrógeno, como el HCNH^+ , con hidrocarburos neutros también contribuyen a la producción de los cianopoliinos (Herbst & Leung 1989). Puesto que el HCNH^+ es el ión precursor de HCN y HNC (Herbst 1978), debería existir también cierta correlación entre estas especies isoméricas y los cianopoliinos. Takagi et al. (1999) estudiaron las posibles vías de formación de HC_3NH^+ , y encontraron que la más probable es la que involucra al ión C_2H_2^+ y los isómeros HCN y HNC. Es más, entre estas dos posibles reacciones obtuvieron que la más probable es la que involucra al HNC, y que la reacción entre $\text{C}_2\text{H}_2^+ + \text{HCN}$ es ineficiente para producir HC_3NH^+ , ya que requiere muchos productos intermedios. Además de las reacciones ión-molécula mencionadas, se han incluido también en los modelos algunas reacciones entre neutros para intentar reproducir las abundancias encontradas para los cianopoliinos en nubes oscuras (p.ej., $\text{C}_n\text{H}_2 + \text{CN} \rightarrow \text{HC}_n\text{CCN} + \text{H}$; Herbst & Leung 1990). Las abundancias calculadas utilizando estas reacciones reproducen las observadas para los cianopoliinos HC_5N , HC_7N , y HC_9N , pero no para el HC_3N .

Como ya se dijo en la Sección 2.5, una de las ventajas del HC_3N es que sus líneas suelen ser ópticamente delgadas y, cuando sus sustituciones isotópicas ^{13}C son observables, proporcionan un buen método para el cálculo de la razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$. En nuestro caso, hemos detectado estas especies menos abundantes en L1544 y en TMC-1, y hemos obtenido una razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} \sim 50$ y 80, respectivamente, que se encuentran entre los valores típicamente asumidos en la vecindad solar (Langer & Penzias 1993).

La Tabla 3.6 recoge las densidades de columna y abundancias observadas de estas especies en las cuatro fuentes, y también los cocientes con otras especies consideradas tardías. Vemos que las mayores abundancias de C_2H , C_2S y HC_3N se encuentran en TMC-1. En B1 se encuentra la menor abundancia de C_2S , mientras que en L183 no se ha detectado, sin embargo las abundancias de C_2H y HC_3N no son pequeñas en estas fuentes. De hecho, excepto TMC-1, las otras fuentes muestran abundancias similares en HC_3N . L1544 presenta, después de TMC-1, la mayor abundancia de C_2S . Esta tabla muestra también los valores de los cocientes C_2/NH_3 y $\text{HC}_3\text{N}/\text{SO}$, que se han sugerido como indicadores de la evolución química en nubes moleculares. Vemos que en ambos casos las mayores razones de abundancias se obtienen en TMC-

TABLA 3.6: Abundancias relativas al H₂ de las cadenas de carbono observadas y algunas razones de abundancias relacionadas.

	B1	L1544	L183	TMC-1
C ₂ H/H ₂	7.8 10 ⁻⁹	2.7 10 ⁻⁹	2.2 10 ⁻⁸	6.0 10 ⁻⁸
C ₂ S/H ₂	7.1 10 ⁻¹¹	1.0 10 ⁻¹⁰	≤ 2.4 10 ⁻¹¹	3.2 10 ⁻⁹
HC ₃ N/H ₂	2.2 10 ⁻¹⁰	2.0 10 ⁻¹⁰	3.4 10 ⁻¹⁰	5.1 10 ⁻⁹
C ₂ S/NH ₃ ^a	0.004	0.02	≤ 0.0002	0.13
HC ₃ N/SO	0.2	2.0	0.09	35

^a Las columnas de densidad de amoníaco empleadas se tomaron de la bibliografía: $N(\text{B1}) = 2.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Bachiller et al. 1990b); $N(\text{L1544}) = 7.9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Benson & Myers 1983); $N(\text{L183}) = 1.1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Dickens et al. 2000); $N(\text{TMC} - 1) = 2.45 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Pratap et al. 1997).

1, seguida de L1544. Esto indicaría que estas dos fuentes son las más jóvenes en evolución química, mientras que L183 sería la más evolucionada.

Sin embargo, debido al segundo pico de abundancia que predicen los modelos para estas especies (Ruffle et al. 1997), es posible que TMC-1 y L1544 fueran las más evolucionadas. Por un lado, en L1544 se ha encontrado una significativa desaparición del CO de la fase gas (Caselli et al. 1999), lo que facilita otra vez la formación de estas cadenas de carbono. Además del empobrecimiento del gas en CO observado en esta fuente, la presencia de movimientos de caída del gas hacia el interior demuestran que L1544 se encuentra en el proceso hacia la formación de una o más proto-estrellas. Es posible también que la evolución química no esté tan relacionada con la evolución dinámica de la nube, y que estas diferencias químicas sean debidas a sus condiciones intrínsecas, como la densidad media de la nube o su capacidad para formar una estrella en su interior. Por ejemplo, Kontinen et al. (2000) estudiaron dos nubes oscuras, una pre-estelar y otra conteniendo un objeto de Clase 0 en su interior, y encontraron que la razón HC₃N/SO era 3 órdenes de magnitud mayor en la fuente dinámicamente más evolucionada, al contrario de lo esperado (p.ej. Suzuki et al. 1992), y por tanto esta fuente se encontraría en el segundo pico de abundancias de los cianopoliinos. En el caso del núcleo pre-estelar, químicamente evolucionado, estos autores concluyen que la evolución dinámica se ha ralentizado en esta nube, o bien que se ha alcanzado el equilibrio y no va a llegar al colapso gravitacional. Esto demuestra la dificultad de relacionar la composición química de una nube con su estado evolutivo hacia la formación estelar, lo cual depende de muchos otros factores.

3.3.3. HCN y HNC

Entre los problemas sin resolver que existen en astroquímica, uno de los más misteriosos es la variación de la razón entre las abundancias de estos dos isómeros en las nubes interestelares, tanto de una fuente a otra como dentro de la misma nube. Esto resulta extraño puesto que HCN y HNC se encuentran químicamente relacionados y se piensa que se forman de manera equivalente a partir del HNCH⁺, por lo que se esperan valores de la razón [HNC]/[HCN] (desde ahora HNC/HCN)

TABLA 3.7: Razones de abundancias HNC/HCN, obtenidas a partir de sus sustituciones isotópicas ^{13}C y ^{15}N , para las cuatro fuentes observadas.

	B1	L1544	L183	TMC-1
$\text{HN}^{13}\text{C}/\text{H}^{13}\text{CN}$	2.13	2.30	2.16	1.20
$\text{H}^{15}\text{NC}/\text{HC}^{15}\text{N}$	2.96	2.93	5.26	2.48

del orden de la unidad.

Sin embargo, las observaciones muestran que la razón de abundancias HNC/HCN excede la unidad en nubes frías y oscuras (ver, p.ej., Irvine & Schloerb 1984; Churchwell et al. 1984). En este trabajo hemos encontrado que las razones entre las abundancias de las especies isotópicas menos abundantes y por tanto ópticamente delgadas, exceden claramente la unidad en todas las fuentes (ver Tabla 3.7). Además de esto, se ha encontrado que en nubes moleculares calientes asociadas a formación estelar masiva esta razón puede ser mucho menor que 1, ya que, aunque la abundancia de HCN relativa al H_2 es similar a la observada en nubes frías, la abundancia de HNC es especialmente baja (Irvine et al. 1987; Schilke et al. 1992; Ungerechts et al. 1997). Todas estas observaciones indican una variación de esta razón de abundancias con la temperatura y reflejan los mecanismos de producción e isomerización de ambas especies. Por tanto, los resultados obtenidos para la relación HNC/HCN requieren un mecanismo de producción con la capacidad de producir más HNC que HCN y un mecanismo de destrucción el cual destruya preferentemente el HNC al aumentar la temperatura, o bien la existencia de caminos adicionales para la formación de HCN en regiones calientes, o que el proceso de isomeración sea más efectivo en las nubes con mayor temperatura (Watson & Walmsley 1982).

Como se ha dicho anteriormente, HCN y HNC se forman a partir de la recombinación disociativa del ión HCNH^+ ,



donde ambos isómeros se producen con igual probabilidad (Watson 1976; Talbi & Ellinger 1998; Hickman et al. 2005). Este ión puede formarse en nubes densas a partir de reacciones como (Marquette et al. 1985),



o también en procesos menores entre C y NH_3^+ , y entre N y CH_3^+ . Como este esquema de formación de HCN y HNC no se correspondía con las observaciones, se sugirió (Brown 1977; Allen et al. 1980) que la reacción 3.2 debía producir al mismo tiempo otra forma isomérica además de la lineal y de menor energía HCNH^+ , el ión metaestable H_2NC^+ ,



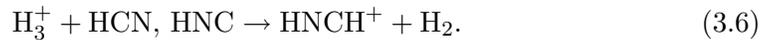
cuya recombinación disociativa da lugar únicamente al HNC:



En los modelos actuales de química, para reproducir la razón $\text{HNC}/\text{HCN} \geq 1$ observada en las nubes frías y oscuras, se ha asumido comunmente que la reacción 3.3

produce de forma significativa H_2NC^+ . Asumiendo que esta reacción produce únicamente dicho ión, Millar et al. (1997) obtienen una razón HNC/HCN mayor que la unidad. No ocurre así en los modelos de Lee et al. (1996), en los que se asume que ambos iones, H_2NC^+ y HCNH^+ , se forman con igual probabilidad. Estas reacciones son complicadas de reproducir en el laboratorio para poder confirmar estas hipótesis, pero se han realizado varios estudios teóricos. A partir de cálculos *ab initio*, los cuales utilizan métodos cuánticos para obtener las superficies de energía potencial de estas reacciones y así determinar su eficiencia, Talbi & Herbst (1998) han demostrado que el producto dominante es el HCNH^+ . Estos autores estudian la producción de H_2NC^+ en sus posibles estados electrónicos y concluyen que ésta parece improbable a partir de los canales $\text{C}^+ + \text{NH}_3$ y $\text{C} + \text{NH}_3^+$.

El ión lineal HCNH^+ puede también producirse de nuevo a partir de sus productos HCN y HNC en reacciones ión-molécula (Churchwell et al. 1984):



Esto da lugar a una mezcla entre HCN y HNC cuya consecuencia es que, cualquiera sea el mecanismo de producción primario de estos componentes es difícil obtener una razón de abundancia diferente de 1. Existe además otra reacción importante en nubes interestelares, $\text{N} + \text{CH}_3^+ \rightarrow \text{CH}_2\text{N}^+ + \text{H}$, que también da lugar a la forma lineal HCNH^+ . De manera que la razón de abundancias HNC/HCN mayor que la unidad en nubes interestelares frías no puede explicarse a partir de reacciones ión-molécula. Es también improbable, aunque no imposible, que algún canal de destrucción, ya sea ión-molécula o neutro-neutro, sea más lento para el isómero metaestable HNC que para el estable HCN.

Una segunda vía para explicar la abundancia HNC/HCN a baja temperatura, es considerar reacciones entre neutros. Los modelos químicos (Millar et al. 1997; Lee et al. 1996) incluyen reacciones neutro-neutro como



aunque las velocidades de reacción son muy inciertas. Si la primera de ellas fuera muy rápida a baja temperatura, al menos podría resolver el problema HNC/HCN en nubes frías. Sin embargo, algunos modelos en nubes oscuras (Turner et al. 1997; Terzieva & Herbst 1998) han encontrado que la reacción 3.8 parece dominar la producción de HCN a edades tempranas, mientras que la reacción 3.7 es de menor importancia. Herbst et al. (2000) estudiaron estos dos procesos utilizando cálculos cuánticos y obtuvieron que, aunque en un principio se forman los productos HNC y HCN, estas reacciones son tan exotérmicas que éstos tienen suficiente energía para que se produzca un proceso de isomerización ($\text{HCN} + \text{H}^+ \leftrightarrow \text{HNC} + \text{H}^+$), dando lugar finalmente a abundancias similares para ambos isómeros. De todas formas, aunque la química neutro-neutro pueda explicar el problema a baja temperatura, aún habría que explicar esta razón de abundancias en nubes calientes, o bien encontrando reacciones de destrucción para HNC o canales de formación adicionales para HCN.

TABLA 3.8: Abundancias observadas de HCN y HNC relativas a H₂ y a NH₃.

	B1	L1544	L183	TMC-1
HCN/H ₂	9.2 10 ⁻¹⁰	4.3 10 ⁻¹⁰	5.3 10 ⁻⁹	8.5 10 ⁻⁹
HNC/H ₂	2.0 10 ⁻⁹	9.9 10 ⁻¹⁰	1.1 10 ⁻⁸	1.0 10 ⁻⁸
HCN/NH ₃ ^a	0.05	0.07	0.04	0.3
HNC/NH ₃	0.1	0.2	0.08	0.4

^a Las columnas de densidad de amoniaco empleadas se tomaron de la bibliografía: $N(\text{B1}) = 2.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Bachiller et al. 1990b); $N(\text{L1544}) = 7.9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Benson & Myers 1983); $N(\text{L183}) = 1.1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Dickens et al. 2000); $N(\text{TMC} - 1) = 2.45 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Pratap et al. 1997).

De acuerdo a los modelos químicos dependientes del tiempo, tanto HCN como HNC son abundantes a edades tempranas, mientras que estas disminuyen hacia la fase de equilibrio (Lee et al. 1996). Además, si la reacción 3.2 es la vía principal para su formación, se espera que exista una correlación entre NH₃ y los isómeros HCN y HNC. Churchwell et al. (1984) observaron que las densidades de HNC, HCN y HC₃N relativas a NH₃ disminuyen sistemáticamente al aumentar la columna de densidad de NH₃. Esto indica que al aumentar la densidad de la nube y la deposición de algunas moléculas en los granos, es decir, al alcanzar un estado evolucionado en la nube, las abundancias de HCN y HNC disminuyen. Sin embargo, Hirota et al. (1998) no encontraron diferencias significativas en las abundancias de HCN entre condensaciones con formación estelar y condensaciones sin estrellas, por lo que no parece haber un cambio sistemático debido a la evolución dinámica de la nube. La densidad crítica¹ para las líneas milimétricas de HCN y de HNC es de 10⁶ cm⁻³, por lo que las líneas se originan en la parte más densa de la nube. Es posible que esto explique la relativa constancia de sus abundancias a pesar de la presencia de una protoestrella.

La Tabla 3.8 muestra las abundancias obtenidas de HCN y HNC relativas al H₂, y sus cocientes respecto a la abundancia de NH₃. Las mayores abundancias de HCN y HNC se encuentran en TMC-1 y L183, mientras que B1 y L1544 muestran abundancias algo menores y similares entre ellas. Esto nos indica que no existe gran dependencia de las abundancias de estos dos isómeros con el estado evolutivo. Al comparar con el amoniaco, vemos que los menores cocientes son para B1 y L183, donde la columna de densidad de NH₃ es mayor, mientras que los mayores cocientes son para TMC-1. Esto indicaría de nuevo, puesto que el amoniaco es una especie tardía en evolución química, que las nubes más jóvenes son TMC-1 y L1544, mientras que B1 y L183 son las más evolucionadas químicamente.

3.3.4. Especies deuteradas

A pesar de la pequeña abundancia cósmica del deuterio (D/H $\sim 1.5 \cdot 10^{-5}$, York & Rogerson 1976; Linsky 1998), existen muchas evidencias de un gran enriquecimiento en especies deuteradas en nubes oscuras y en proto-estrellas de baja masa.

¹La densidad crítica es aquella para la que el coeficiente de emisión radiativa de Einstein es similar a la probabilidad de desexcitación por colisión.

TABLA 3.9: Abundancias relativas XD/XH de las especies deuteradas observadas dentro del barrido espectral.

	B1	L1544	L183	TMC-1
HDCS/H ₂ CS ^a	0.5		0.08	0.04
D ₂ CS/H ₂ CS	0.4		≤ 0.03	≤ 0.005
NH ₂ D/NH ₃ ^b	0.09	0.2	0.09	≤ 0.0003
DC ₃ N/HC ₃ N	0.09			0.03
CH ₂ DOH/CH ₃ OH ^c	0.4		0.14	≤ 0.09
CH ₃ OD/CH ₃ OH	0.03		≤ 0.006	≤ 0.03

Nota.— Las abundancias del tioformaldehído, del amoniaco y el metanol se tomaron de la bibliografía:

^a H₂CS: $N(\text{B1}) = 1.7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Marcelino et al. 2005); $N(\text{L183}) = 8.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (Irvine et al. 1989); $N(\text{TMC} - 1) = 6.1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Minowa et al. 1997).

^b NH₃: $N(\text{B1}) = 2.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Bachiller et al. 1990b); $N(\text{L1544}) = 7.9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Benson & Myers 1983); $N(\text{L183}) = 1.1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (Dickens et al. 2000); $N(\text{TMC} - 1) = 2.45 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Pratap et al. 1997).

^c CH₃OH: $N(\text{B1}) = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Bachiller et al. 1990b); $N(\text{L183}) = 8.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Dickens et al. 2000); $N(\text{TMC} - 1) = 1.7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Pratap et al. 1997).

Este enriquecimiento se produce en la fase pre-estelar fría, en la que muchas especies pesadas se congelan en los granos de polvo y desaparecen de la fase gas. De hecho los dos procesos están muy relacionados ya que la condensación de CO y otras moléculas abundantes en la fase gas favorece la deuteración, al disminuir la destrucción por éstas de los iones moleculares deuterados. (Roberts & Millar 2000a; Bacmann et al. 2003). En los últimos años, la química de los núcleos densos ha sido revisada al mismo tiempo que se han descubierto la emisión de moléculas varias veces deuteradas (D₂CO: Turner 1990; Ceccarelli et al. 1998; ND₂H: Roueff et al. 2000; ND₃: Lis et al. 2002; van der Tak et al. 2002; CHD₂OH, CD₃OH: Parise et al. 2002, 2004). Puesto que estas especies varias veces deuteradas han sido encontradas en condensaciones previas a la formación estelar (B1, L1689N), o en proto-estrellas jóvenes (NGC 1333 IRAS 4A), pueden utilizarse para estudiar e identificar las fase más tempranas en la formación estelar.

La Tabla 3.9 muestra las abundancias de las especies deuteradas detectadas dentro del rango espectral observado. En general, el mayor enriquecimiento en deuterio lo encontramos en B1, que además es la única fuente donde se ha detectado D₂CS y CH₃OD. Las menores abundancias de moléculas deuteradas se obtiene en TMC-1, donde sólo se ha detectado la emisión de HDCS y DC₃N. Saito et al. (2002) relacionan el enriquecimiento en deuterio con el estado evolutivo de la nube, ya que el primero se encuentra ligado al factor de empobrecimiento del gas que es mayor cuando la nube se encuentra evolucionada químicamente. Si esto es cierto, B1 y L1544 serían las nubes más evolucionadas de nuestro estudio, mientras que TMC-1 sería la condensación más joven de las cuatro. A continuación se discute en más detalle cada una de las moléculas deuteradas observadas.

HDCS y D₂CS

Como ya se dijo en la Sección 2.5, el tioformaldehído una vez deuterado se detectó por primera vez en TMC-1 (Minowa et al. 1997), siendo la segunda molécula con deuterio detectada en el MI que contiene el átomo de azufre después de HDS (van Dishoeck et al. 1995). Nosotros hemos detectado HDCS en todas las fuentes, siendo B1 la fuente que muestra una mayor intensidad de líneas para esta especie (ver Fig. 2.30) y una mayor abundancia. Además en esta fuente hemos detectado por primera vez la especie doblemente deuterada. Llama la atención el gran enriquecimiento en deuterio encontrado en B1 para estas especies, siendo HDCS/H₂CS unas 12 y 6 veces mayor que en TMC-1 y en L183, respectivamente (ver Tabla 3.9), a pesar de ser también L183 una fuente particularmente intensa en moléculas deuteradas (ver, p.ej., Tiné et al. 2000; Roueff et al. 2000).

Para B1, en Marcelino et al. (2005) obtuvimos valores de la temperatura rotacional ~ 10 K, y columnas de densidad $N(\text{HDCS}) = (4.5 - 7.0) 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N(\text{D}_2\text{CS}) = (1.0 - 4.0) 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (ver también Cap. 4), que son similares a los obtenidos utilizando únicamente las transiciones observadas en el rango espectral de este barrido. El cálculo de estas densidades de columna en B1 se repite aquí por coherencia y mejor comparación con los valores obtenidos en las otras fuentes.

NH₂D

Hemos obtenido grandes abundancias de NH₂D para todas las fuentes donde se ha detectado, siendo L183 la de mayor abundancia relativa al H₂ (ver Tabla 3.4). Tiné et al. (2000) sugieren que la presencia de varias moléculas deuteradas en L183 con una alta abundancia, debe ser el reflejo de un aumento local en la abundancia del deuterio, puesto que con sus modelos no pudieron ajustar las abundancias observadas. Sin embargo el mayor enriquecimiento en deuterio en esta especie, esto es mayor razón NH₂D/NH₃, la encontramos en L1544 (ver Tabla 3.9), donde se han observado también grandes abundancias de moléculas deuteradas (ver, p.ej., Caselli et al. 2002; Crapsi et al. 2007), además de un gran empobrecimiento del gas debido a la deposición de especies en los granos, en concordancia con los modelos químicos de deuteración. Para B1 y L183, las razones obtenidas son similares.

Lo más destacado aquí es la falta de emisión de esta especie en el pico de los cianopoliinos de TMC-1, aún siendo ésta una fuente rica en amoníaco y se hayan observado aquí otras especies deuteradas. La única posición de esta nube donde se ha detectado esta especie es el pico del amoníaco (AP), aunque con líneas unas 10 veces menos intensas que en L183 (Tiné et al. 2000). Del mismo modo otros autores han encontrado diferencias en el grado de enriquecimiento en deuterio entre ambas posiciones de esta nube en varias especies (DCO⁺, Guélin et al. 1982a; c-C₃HD, Bell et al. 1988; NH₂D, Tiné et al. 2000; DNC, Hirota et al. 2001). En todos estos trabajos existe un gradiente positivo en las razones XD/XH al moverse desde el CP al AP.

Existen varias teorías acerca de los gradientes de abundancias, en varias especies y también en el enriquecimiento en deuterio, observado entre el CP y el AP en TMC-1. Una de ellas apela a la diferencia de edad en evolución química (Saito et al. 2002), donde la posición observada en este trabajo se encontraría en una fase

evolutiva más temprana que el pico del amoniaco. Estos autores relacionan la variación del cociente de abundancias $\text{DCO}^+/\text{HCO}^+$ con el factor de empobrecimiento del gas, el cual es un indicador del estado evolutivo de la nube (Roberts & Millar 2000a, 2000b). Markwick et al. (2000, 2001) proponen un modelo en el que el paso de ondas magnetohidrodinámicas de baja velocidad originadas en la fuente IRAS 04381+2540, serían responsables de estas diferencias de abundancias. Estas ondas producen la evaporación de especies congeladas en los mantos de los granos y esto modifica los procesos químicos en las condensaciones de TMC-1 (en concreto modifican las velocidades de reacción), primero en el AP, más cercano a la fuente IRAS, y más tarde en el pico de los cianopoliinos. En este modelo la difusión ambipolar, es decir la diferencia de velocidad entre los iones y los neutros inducida por la onda Alfvén, suprime la contribución del ión H_2D^+ a la deuteración en la fase gas, lo que disminuye el enriquecimiento en deuterio durante el paso de la onda (Markwick et al. 2001). Una vez la onda ha pasado, las velocidades de reacción vuelven a sus valores típicos a 10 K y la deuteración puede volver a restablecerse. Sin embargo este modelo predice un gradiente de enriquecimiento en deuterio entre ambas posiciones menor que el observado.

DC₃N

Aunque la abundancia relativa al H_2 obtenida para esta especie es mayor en TMC-1 que en B1, debido a su mayor abundancia en los cianopoliinos en general, el mayor enriquecimiento en deuterio sigue siendo para B1 (ver Tabla 3.9).

Langer et al. (1980b) detectaron por primera vez esta especie en TMC-1, y obtuvieron una razón de abundancias $\text{DC}_3\text{N}/\text{HC}_3\text{N} \sim 0.02 - 0.08$, mayor que la observada para DCO^+ en la misma posición (Guélin et al. 1982a). En este trabajo, Langer et al. estudian varios mecanismos de formación del HC_3N –en fase gas, en la superficie de los granos, y por disociación de moléculas mayores–, y llegan a la conclusión que el HC_3N , y por tanto el DC_3N , se producen por reacciones ión-molécula en fase gas ya que es la única vía que da lugar a un mayor enriquecimiento en deuterio para DC_3N que para el DCO^+ . Howe et al. (1994) realizaron un estudio de la razón de abundancias $\text{DC}_3\text{N}/\text{HC}_3\text{N}$ en varias nubes oscuras, y encontraron en todas las fuentes observadas una razón $\sim 0.05 - 0.10$. En TMC-1 la razón observada es superada únicamente por la observada para $c\text{-C}_3\text{HD}/c\text{-C}_3\text{H}_2$ (0.08–0.16, Bell et al. 1988), y también muestra un gradiente espacial positivo al moverse hacia el pico del amoniaco (ver Markwick et al. 2001). En su trabajo, Howe et al. (1994) también estudian los diferentes procesos que llevan a la formación de esta especie y del HC_3N , y concluyen que la deuteración del cianoacetileno debe estar ligada al C_3HD .

CH₂DOH y CH₃OD

En los últimos años se han detectado grandes abundancias de las especies deuteradas del metanol en varias proto-estrellas de Clase 0 (ver, Parise et al. 2006), y se han relacionado estas abundancias con la evaporación de los mantos de los granos y la química en núcleos calientes. En estas regiones dominadas por los procesos de formación estelar y las altas temperaturas que se alcanzan alrededor de las proto-estrellas, se considera que los hielos altamente deuterados, formados en la superficie

de los granos durante la fase fría y densa previa al colapso (Tielens 1983), son devueltos a la fase gas durante el colapso cuando el calentamiento producido por la estrella en formación calienta estos mantos helados de los granos de polvo (Ceccarelli et al. 2001). Es más, el metanol mismo se cree que es producto de la química de granos, ya que es una de las especies más abundantes observada en los granos y los procesos en fase gas no son capaces de reproducir su abundancia (Herbst 2005). Además un estudio realizado en una muestra de proto-estrellas poco masivas ha demostrado que la abundancia del metanol aumenta en la parte interior y caliente de la envoltura (Maret et al. 2005), lo que se atribuye a la evaporación de esta especie de los mantos de los granos en la región de temperatura mayor de 100 K. Parise et al. (2002, 2006) encontraron, como también en nuestro trabajo, una menor abundancia de CH_3OD respecto a las especies que contienen el deuterio en el grupo metilo, lo cual atribuyen a la destrucción de CH_3OD en la fase gas. Sin embargo, Nagaoka et al. (2005) proponen que el metanol deuterado en el grupo OH se produce de manera ineficiente en la superficie de los granos, mientras que las especies isotópicas con el enlace CD se ven favorecidas.

En este trabajo hemos observado en tres de las fuentes de nuestro estudio líneas intensas de la especie CH_2DOH , aunque el mayor enriquecimiento es de nuevo para B1 (Tabla 3.9). En esta fuente la razón de abundancias $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ es similar a la observada en los núcleos calientes alrededor de IRAS 16293 y algo menor que en las fuentes IRAS de la región NGC 1333, mientras que la razón $\text{CH}_3\text{OD}/\text{CH}_3\text{OH}$ es algo mayor que en IRAS 16293 y en NGC 1333-IRAS4B, pero menor que en NGC 1333-IRAS4A (ver Parise et al. 2006). Sin embargo no existen evidencias de la existencia en esta fuente de un “hot corino” o de flujos moleculares que pudieran producir la evaporación de especies congeladas en los granos y la química de altas temperaturas necesaria para explicar su producción. En el caso de L183, la razón de abundancias $\text{CH}_2\text{DOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ es mayor que la observada en Orión (~ 0.04 ; Charnley et al. 1997), pero menor que la encontrada en los núcleos calientes asociados a la formación de estrellas de baja masa. Ni en esta fuente, como tampoco en L1544, existen evidencias de formación estelar, de manera que deben existir otras vías para la deuteración del metanol que no implique su formación en los granos y posterior evaporación.

3.3.5. HCOOH y HCOOCH_3

Desde hace tiempo se conoce la existencia de moléculas orgánicas complejas en los núcleos densos y calientes asociados a la formación de estrellas masivas (Blake et al. 1987; Turner 1991; Nummelin et al. 2000). En estas regiones, especies como HCOOH , HCOOCH_3 , CH_3OCH_3 , CH_3CN , $\text{C}_2\text{H}_5\text{CN}$, CH_3CCH , etc., ven aumentada su abundancia debido al aumento de la temperatura del gas y el polvo alrededor de la nueva estrella, lo que permite la evaporación de moléculas formadas en la superficie de los granos, y también la producción de especies en fase gaseosa a través de rápidas reacciones químicas (Walmsley et al. 1992; Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993; Charnley 1995; Rodgers & Charnley 2001, 2003). En los últimos años se ha detectado la emisión de estas moléculas complejas en proto-estrellas de Clase 0 (Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004, 2007), donde también la producción de estas especies sería similar a la encontrada en los núcleos calientes masivos. Dos de

TABLA 3.10: Abundancias de HCOOH y HCOOCH₃ relativas al H₂ y al metanol.

	B1	L1544	L183	TMC-1
HCOOH/H ₂	$2.3 \cdot 10^{-11}$	$\leq 4.0 \cdot 10^{-12}$	$3.0 \cdot 10^{-10}$	$\leq 3.9 \cdot 10^{-11}$
HCOOCH ₃ /H ₂	$1.1 \cdot 10^{-10}$	$\leq 1.7 \cdot 10^{-11}$	$\leq 2.1 \cdot 10^{-10}$	$\leq 2.2 \cdot 10^{-10}$
HCOOH/CH ₃ OH	0.03		0.03	≤ 0.02
HCOOCH ₃ /CH ₃ OH	0.12		≤ 0.02	≤ 0.13

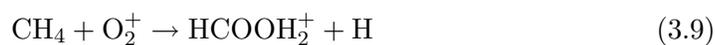
Nota.— Las abundancias del metanol se han tomado de la bibliografía:

$N(\text{B1}) = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (Bachiller et al. 1990b); $N(\text{L183}) = 8.5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Dickens et al. 2000); $N(\text{TMC} - 1) = 1.7 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Pratap et al. 1997).

estas especies, el ácido fórmico y el formato de metilo, han sido detectadas en dos de las fuentes de nuestro estudio. La Tabla 3.10 muestra las abundancias encontradas en B1 y L183, y los límites superiores en las otras dos fuentes observadas en este trabajo. En el Capítulo 6 se describe la búsqueda de éstas y otras especies complejas en dos nubes oscuras.

HCOOH

El ácido fórmico puede producirse tanto en la superficie de los granos, como en la fase gas (Liu et al. 2002). De hecho, Irvine et al. (1990) detectaron por primera vez el ácido fórmico en una nube oscura, en L183, aunque no fue detectada en la nube arquetípica TMC-1. Estos autores encontraron que la abundancia observada en L183 y el límite superior en TMC-1 eran 1–2 órdenes de magnitud menores que las abundancias calculadas en los modelos de nubes oscuras (Herbst & Leung 1989). En este modelo se considera que el HCOOH se forma a partir de una reacción entre HCO⁺ y H₂O para dar el ión precursor HCOOH₂⁺. Sin embargo, esta reacción no llega a producirse. En su lugar, Irvine et al. proponen como principal vía de formación del HCOOH, la reacción ión-molécula



seguida de la recombinación disociativa con electrones. Esta reacción fue medida en el laboratorio y se encontró que se producía de forma rápida a bajas temperaturas (Rowe et al. 1984). Las nuevas abundancias calculadas resultaron ser del orden de 10^{-10} , en concordancia con lo obtenido en L183 y TMC-1.

Dentro del rango espectral observado en el barrido a 3 mm, hemos detectado varias transiciones del HCOOH en dos de las fuentes, B1 y L183 (ver Sección 2.5.18). Las abundancias obtenidas aquí, como se muestra en la Tabla 3.4, también se encuentran entre los valores encontrados por Irvine et al. y los calculados en los modelos. La temperatura rotacional obtenida en los diagramas rotacionales para B1 (Tabla 3.1), es mayor que la obtenida para HDCS y que la temperatura cinética del gas obtenida en esta fuente (ver, p.ej., Bachiller & Cernicharo 1984). Por tanto la detección de esta especie en ambas fuentes con abundancias similares, y puesto que L183 no presenta ningún signo de formación estelar, confirma la producción del HCOOH en fase gaseosa. La no detección en L1544 y TMC-1 debe reflejar las

diferencias intrínsecas de los dos pares de nubes, donde estas últimas son deficientes en especies con oxígeno.

HCOOCH₃

En el caso del formato de metilo, los modelos químicos para núcleos calientes masivos predicen que se forma en el gas de alta temperatura a partir de los constituyentes de los granos, en particular a partir del metanol y el formaldehído, cuyas abundancias se ven aumentadas por la evaporación de los mantos de los granos de polvo al aumentar la temperatura (Brown et al. 1988; Millar et al. 1991; Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993; Rodgers & Charnley 2003). Una vez en la fase gas el metanol puede ser parcialmente protonado por iones H₃⁺ para formar CH₃OH₂⁺, el cual reacciona con el formaldehído para dar lugar al metil formato protonado



que tras la recombinación disociativa con electrones da lugar al HCOOCH₃ (Blake et al. 1987; Millar et al. 1991; Caselli et al. 1993). De este modo se pueden producir grandes cantidades de formato de metilo en una escala de tiempo de 10⁴ – 10⁵ años tras la evaporación de los mantos de los granos. Sin embargo, la formación de moléculas de segunda generación en la fase gas parece improbable en el caso de los hot corinos, ya que ese tiempo requerido para su formación es mayor que el tiempo de tránsito de granos y moléculas en el gas denso y caliente hacia el objeto central (unos pocos 10² años, Schöier et al. 2002). Así que se ha sugerido que el HCOOCH₃ y otras especies consideradas de segunda generación, se produzcan en la superficie de los granos en los hot corinos (Bottinelli et al. 2007). Si esto es así, estas especies deberían observarse en las primeras fases de la formación estelar, cuando se está produciendo la evaporación de los mantos de los granos. En Requena-Torres et al. (2007) estudiamos la emisión de moléculas complejas en una nube oscura quiescente (L183), y en una fuente que contiene un flujo molecular muy joven (L1448), por lo que se encuentra en las primeras fases de la formación de una proto-estrella de baja masa. No encontramos emisión procedente del HCOOCH₃ en ninguna de las componentes de L1448 (gas quiescente, gas chocado y precursor del choque), lo que indicaría que esta especie no es evaporada directamente de los granos (ver también Cap. 6).

Por otro lado, cálculos recientes de química cuántica han demostrado que la reacción 3.10 es altamente ineficiente para producir el ión precursor del HCOOCH₃ (Horn et al. 2004). Estos autores proponen otras vías en fase gaseosa para producir el formato de metilo protonado y otros iones precursores que puedan dar lugar al HCOOCH₃ tras sucesivas recombinaciones disociativas. Sus modelos químicos (para $T = 100$ K) muestran que incluso utilizando velocidades de reacción optimistas, estas reacciones no reproducían las abundancias observadas, y concluyen que al menos parte del metil formato debe producirse en la superficie de los granos. Sin embargo, es poco probable que tras el encendido de la nueva estrella, la temperatura del gas y el polvo aumente súbitamente de ~10 a ~100 K, sino que más bien debe haber un aumento gradual de la temperatura a través de la envoltura interior, dando lugar a un calentamiento gradual de los granos (Viti et al. 2004; Garrod &

Herbst 2006). En el modelo de Garrod & Herbst (2006), se investiga la química de moléculas complejas durante la fase de calentamiento del gas. Estos autores incluyen en su modelo tanto reacciones en fase gas como las que se producen en la superficie de los granos para formar HCOOCH_3 , y concluyen que ambos procesos requieren un aumento gradual de la temperatura, más que un salto inmediato entre 10 y 100 K como normalmente se asume en los modelos. De este modo, y puesto que la reacción 3.10 resulta ser más rápida a 10 K que a 100 K, su contribución será importante durante las primeras fases del calentamiento de la región cercana a la proto-estrella. Además en su modelo ambos procesos, en fase gaseosa y sólida, se encuentran fuertemente acoplados durante esta fase de calentamiento, de manera que las moléculas que se forman en los granos pueden ser evaporadas y afectar a la química en fase gas, cuyos productos pueden volver a los granos y modificar la química en la superficie de los granos. Por ejemplo, en el caso del HCOOCH_3 , éste se produce en primer lugar a partir de reacciones en fase gas una vez el formaldehído ha sido inyectado a la fase gas desde los granos. La mayor parte del formato de metilo que se produce aquí es rápidamente congelado en los granos para ser evaporado más tarde. Al mismo tiempo, el HCOOCH_3 también puede formarse en la superficie de los granos. Cuando la fase de calentamiento termina, una gran variedad de especies complejas se encuentran en la fase gas, como muestran las observaciones. Por tanto la química compleja presente en los núcleos densos y calientes asociados a formación estelar, sería el resultado de la reciente evaporación de dichas especies y no debida únicamente a la producción en fase gas posterior a la eyección de los mantos como predicen muchos modelos.

En este trabajo el metil formato se ha detectado solamente en B1, que es también la única fuente observada que presenta cierta actividad de formación estelar (ver Sección 2.2.1). La ausencia de flujos moleculares indica que se encuentra en una fase de evolución muy temprana hacia la formación estelar, aunque es posible que en la región más cercana alrededor de estos dos objetos haya comenzado la fase de calentamiento. Otra posibilidad sería que estemos observando únicamente las transiciones de menor energía y que no haya ninguna influencia procedente de la formación de una proto-estrella, de modo que estas especies pudieran formarse en la fase fría y congelarse en los granos más tarde. Pero en ese caso, deberíamos haber detectado también el formato de metilo al menos en L183, ya que al igual que B1 es una fuente rica en moléculas que contienen oxígeno, del mismo modo que el ácido fórmico se ha detectado en ambas fuentes. Un estudio en más profundidad sobre estas moléculas complejas debe ser realizado, no únicamente en proto-estrellas de Clase 0, sino a ser posible en un mayor número de núcleos pre-estelares en las últimas fases del colapso, o bien en sus primeros pasos hacia la formación de un objeto central, como en el caso de L1448 (ver Cap 6). De este modo podríamos llegar a entender los procesos que dan lugar a la producción de estas especies.

3.4. Resumen y conclusiones

En este Capítulo hemos analizado los resultados obtenidos en el survey a 3 mm presentado en el Capítulo 2. Las temperaturas de excitación y las densidades de columna se han calculado a partir de diagramas rotacionales. Sin embargo esto no ha sido posible para todas las especies moleculares, ya que en su mayoría sólo hemos detectado una transición rotacional dentro del rango espectral observado. Se han obtenido también las abundancias relativas al H_2 de todas las especies moleculares detectadas, para lo que se tomaron las columnas de densidad de H_2 obtenidas en otros estudios realizados en las fuentes observadas aquí. Los resultados generales obtenidos para las cuatro fuentes son los siguientes:

- Las moléculas detectadas que muestran las mayores abundancias son SO, C_2H , HCN, HNC, HCO^+ , HNCO, NH_2D , y HC_3N . Por el contrario, las especies detectadas con menores abundancias son SiO, C_3O , y CH_2CHCN .
- Entre las especies detectadas hemos encontrado algunas dignas de mención, como son moléculas deuteradas (NH_2D , CH_2DOH , D_2CS , etc.), el ácido fórmico, dos especies consideradas típicas de núcleos calientes (SiO y $HCOOCH_3$, detectadas ambas en B1), y el propileno (CH_2CHCH_3), detectado únicamente en TMC-1 y que es la cadena más larga observada en este barrido espectral.
- Considerando cada una de las fuentes observadas por separado, hemos encontrado que B1 y L183 son más ricas en especies que contienen oxígeno (p.ej. SO, $HCOOH$), mientras que L1544 y TMC-1 son especialmente abundantes en cadenas carbonadas (C_2S , $c-C_3H$, C_3N , HC_3N , CH_3CN , CH_2CHCN). Es importante remarcar las altas abundancias observadas para D_2CS en B1 y CH_2CHCH_3 en TMC-1, siendo las únicas fuentes donde se han observado estas especies en el medio interestelar.

Hemos tratado de relacionar las abundancias observadas con el estado evolutivo de la nube, aunque este es un trabajo complicado. Esto se debe a que existen muchos factores que afectan a la química (densidad, razón C/O, grado de empobrecimiento del gas, etc.), además los modelos existentes fallan a la hora de reproducir algunas abundancias y por tanto no se tiene una visión clara de qué especies pueden considerarse tempranas o tardías en la evolución de una nube interestelar. Además la evolución química no siempre está en concordancia con la evolución dinámica de la nube hacia la formación estelar, como intuitivamente podemos pensar. El camino hacia la formación de una estrella también depende de las condiciones intrínsecas de cada fuente (como su densidad, masa, grado de enfriamiento del gas, etc.), y no todas las condensaciones sin estrellas van a dar lugar a su formación. Un ejemplo es L183 la cual se encuentra químicamente evolucionada pero parece que se encuentra en un estado de equilibrio y probablemente no llegará a formar ninguna estrella. Sin embargo, la gran cantidad de estudios que se están realizando en estas nubes nos van proporcionando cada vez mayor información para comprender estas importantes regiones de nuestra vecindad solar, futuros lugares de formación de estrellas como nuestro Sol y de sistemas planetarios.

Capítulo 4

Primera detección de D₂CS en el espacio

4.1. Introducción

Hace ya tiempo que se conoce la existencia, con gran abundancia, de moléculas una vez deuteradas en las nubes moleculares frías (van Dishoeck et al. 1995; Minowa et al. 1997; Saito et al. 2000; Tiné et al. 2000; Turner 2001). La formación de moléculas deuteradas ocurre preferentemente a bajas temperaturas (≤ 80 K), y da lugar a una elevada razón $[XD]/[XH]$ en nubes densas y frías que no contienen fuentes luminosas en su interior. Estos núcleos pre-estelares ofrecen la oportunidad de estudiar la fase evolutiva densa y fría en la cual se supone que ocurre la deuteración. Aunque éste es un proceso químico relativamente bien conocido, la detección en los últimos años de moléculas varias veces deuteradas ha renovado el interés en la formación de moléculas con deuterio en nubes densas: ND₂H (Roueff et al. 2000); ND₂H y D₂CO (Loinard et al. 2001); ND₃ (Lis et al. 2002); D₂S (Vastel et al. 2003); D₂CO (Ceccarelli et al. 2002; Bacmann et al. 2003); CHD₂OH y CD₃OH (Parise et al. 2002, 2004). Entre estas especies isotópicas, únicamente se han detectado tres que contengan azufre, HDS y D₂S, observadas en varias protoestrellas y núcleos densos (Vastel et al. 2003; van Dishoeck et al. 1995); y HDCS, que fue detectada por primera vez en TMC-1 (Minowa et al. 1997).

El gran enriquecimiento en deuterio encontrado en estas regiones, ha dado lugar a la revisión de los modelos de química para explicar la formación de estas moléculas varias veces deuteradas. La presencia de especies moleculares deuteradas en regiones de formación estelar, como Orion-KL y en la protoestrella de Clase 0 IRAS 16293-2422 (Turner 1990; van Dishoeck et al. 1995; Ceccarelli et al. 1998; Loinard et al. 2000), se ha considerado como resultado de las reacciones químicas que ocurren en la superficie de los granos de polvo, y de la posterior evaporación de estas especies una vez formadas o de sus precursores, cuando los procesos físicos asociados a la formación estelar aumentan la temperatura del gas y de los granos de polvo. Sin embargo, éste no es el caso de las nubes oscuras, donde la temperatura cinética del gas no es suficiente para evaporar de forma eficiente los mantos de hielo de los granos. Roberts & Millar (2000a,b) encontraron que la química de la fase gas puede reproducir las grandes abundancias encontradas, tanto para las moléculas una

como dos veces deuteradas, cuando en el gas hay un empobrecimiento de algunas moléculas y átomos (ya que se han adherido, por congelación, a los granos de polvo). La razón es que tanto el CO como el oxígeno atómico destruyen de manera eficiente el ión H₃⁺. Entonces, cuando éstos no se encuentran en la fase gas, el H₃⁺ reacciona con el HD produciendo H₂D⁺. Reacciones consecutivas del H₂D⁺ con el HD llevan a la formación de D₂H⁺ y finalmente de D₃⁺. Estos iones se van a encargar de propagar la deuteración a otras moléculas (Lis et al. 2002; Roberts et al. 2003). En su modelo químico, Roberts et al. (2003), concluyen que en regiones donde el CO se encuentra en su mayor parte congelado en los granos, la abundancia de D₂H⁺ va a ser similar a la de H₂D⁺ y que el ión D₃⁺ puede ser la forma más abundante del H₃⁺ deuterado. La primera de estas afirmaciones ha sido confirmada con la primera detección de D₂H⁺ en el núcleo pre-estelar 16293E (Vastel et al. 2004). En el caso de B1, Lis et al. (2002), basándose en sus observaciones de C¹⁸O y C¹⁷O, encontraron una razón C¹⁸O/H₂=5.4×10⁻⁸, que resulta ser ~3 veces menor que el valor canónico, C¹⁸O/H₂=1.7×10⁻⁷ (Frerking et al. 1982; Cernicharo & Guélin 1987), indicando que una parte apreciable del CO se encuentra congelado en los granos. Los modelos que utilizan condiciones de baja temperatura y altos factores de empobrecimiento permiten una comparación satisfactoria con las observaciones del amoniaco dos y tres veces deuterado –ver, por ejemplo el caso de NHD₂ en L134N (Roueff et al. 2000)– y también ayudan a los modelos de química de granos para explicar las grandes abundancias observadas en regiones de formación estelar.

Durante el barrido espectral a 3 mm descrito en los Capítulos 2 y 3, pudimos identificar una de las líneas-U en B1 como una transición perteneciente al D₂CS, además de dos transiciones del HDCS. Mientras que el tioformaldehído una vez deuterado ya había sido detectado a frecuencias más bajas en TMC-1 en el barrido espectral de Nobeyama (Ohishi & Kaifu 1998; Kaifu et al. 2004), esta es la primera detección de D₂CS en el espacio. Esto nos animó a buscar más transiciones de ambas especies en B1, y realizar así un estudio en profundidad de la deuteración del H₂CS. En la Sección 4.2 se describen las observaciones y en la Sección 4.3 los principales resultados, que incluyen el cálculo de densidades de columna, condiciones físicas de la nube y el cálculo de nuevas constantes rotacionales y frecuencias para las transiciones observadas de las especies isotópicas del tioformaldehído, ya que las que se encuentran disponibles en los catálogos resultaron no ser suficientemente precisas para las líneas tan estrechas que emergen de las nubes oscuras. En la Sección 4.4 se discuten los procesos químicos que llevan a la formación de estas moléculas, y por último la Sección 4.5 recoge las principales conclusiones de este trabajo.

4.2. Observaciones

Las observaciones fueron realizadas con el radio telescopio de 30-m de IRAM entre Octubre de 2003 y Febrero de 2004. Durante el mes de Octubre se observaron las transiciones correspondientes al tioformaldehído una y dos veces deuterado y en Enero las de la especie principal y del H₂C³⁴S. Para poder comparar el grado de enriquecimiento en deuterio, en Febrero observamos varias transiciones rotacionales de diferentes isótopos del formaldehído (H₂CO, HDCO, D₂CO y H₂¹³CO).

Se utilizaron hasta 4 receptores SIS simultáneamente, gracias a las configuracio-

nes posibles entre ellos que permite observar al mismo tiempo a 1.3 y 3 mm, o a 1 y 2 mm. Cada receptor fue sintonizado en LSB con un rechazo de la banda imagen de 20–27 dB (para los receptores a 3 mm), 12–16 dB (para los 2 mm), y de 13 dB para los receptores de 1 mm. Como espectrómetro se utilizó el autocorrelador VESPA con resoluciones de 40 kHz y 80 kHz, por lo que la resolución en velocidades se encuentra entre 0.08–0.23 km s⁻¹, dependiendo de la frecuencia. La mayor parte de las observaciones se realizaron utilizando conmutación del secundario y conmutación en frecuencia. El primero de estos modos de observación aprovecha el movimiento del subreflector del telescopio para observar la fuente y una posición de referencia (posición libre de emisión), sin necesidad de mover el telescopio entre una y otra. Se utilizó una distancia entre la fuente y la referencia de 4' en azimuth, en la que comprobamos que no había emisión, y una frecuencia de movimiento para el subreflector de 0.5 Hz. El modo de observación simétrico utilizado mejora notablemente la línea de base del espectro obtenido. Para el modo de conmutación en frecuencia, se utilizó una diferencia en frecuencia entre las fases de 7.2 MHz, el cual proporciona una buena calidad para la línea de base (ver Thum et al. 1995). El apuntado, estado del foco y la calibración de los espectros obtenidos se realizaron del mismo modo que se describe en la Sección 2.3 para el barrido espectral a 3 mm. Los tiempos de integración sobre la fuente fueron típicamente ~1–2 horas, obteniendo así un rms entre 15–50 mK en temperatura de brillo del haz principal (T_{MB}).

Como ya hemos dicho anteriormente, el tamaño del haz del telescopio y la eficiencia del haz principal dependen de la frecuencia (Sec. 2.3). A 3 mm el haz abarcado para las frecuencias observadas varía entre 30''–21'', y la eficiencia toma los valores 0.78–0.75. A 2 mm el tamaño del haz es de 19''–15'' y la eficiencia de 0.69, y a 1 mm estos valores son de 12'' y 0.57, respectivamente. Como se puede apreciar, el tamaño de la región que observamos disminuye al aumentar la frecuencia, por tanto, a una mayor frecuencia tendremos mejor resolución espacial.

En este caso las condiciones meteorológicas en las que observamos son algo más críticas que para el barrido a 3 mm, puesto que también se realizaron observaciones de mayor frecuencia, para las que se requieren valores menores de vapor de agua y opacidad atmosférica. La temperatura de sistema fue de 100–225 K en Octubre de 2003 para los receptores de 2 y 3 mm, con una opacidad atmosférica muy baja, de entre 0.05–0.1. En Enero de 2004 las condiciones meteorológicas fueron incluso mejores, permitiendo excelentes observaciones a 1 mm ($T_{\text{sys}} \leq 100$ y 200 K, para 3 mm y 1 mm; y la opacidad atmosférica a 225 GHz se encontraba por debajo de 0.1).

4.3. Resultados

4.3.1. Descripción

Los perfiles de las líneas observadas se encuentran en las Figuras 4.1–4.4, y las Tablas 4.1 y 4.2 muestran los parámetros de línea (intensidad y anchura), obtenidos a partir de ajustes gaussianos, de las diferentes especies isotópicas del tioformaldehído y del formaldehído, respectivamente. En ambos casos la intensidad de las líneas viene dada en temperatura de brillo del haz principal (T_{MB}).

TABLA 4.1: Parámetros de línea para las transiciones observadas de las especies isotópicas del tioformaldehído.

Especie	Transición	Frecuencia	Frecuencia	T_{MB} (K)	Δv (km s ⁻¹)	
		Observada ^a (MHz)	Calculada (MHz)			
HDCS	3 ₁₃ -2 ₁₂	91171.086(20) ^b	91171.057	0.172(10)	0.760	
	3 ₀₃ -2 ₀₂	92981.658(30)	92981.607	0.467(24)	0.900	
	3 ₁₂ -2 ₁₁	94828.592(41)	94828.507	0.168(19)	0.884	
	5 ₀₅ -4 ₀₄	154885.070(40)	154885.053	0.278(32)	1.100	
D ₂ CS	3 ₁₃ -2 ₁₂	83077.759(24)	83077.758	0.110(14)	0.754	
	3 ₀₃ -2 ₀₂	85153.920(12)	85153.932	0.339(15)	0.707	
	3 ₁₂ -2 ₁₁	87302.662(24)	87302.659	0.084(12)	0.638	
	4 ₁₄ -3 ₁₃	110756.126(60)	110756.110	0.094(19)	1.222	
	4 ₀₄ -3 ₀₃	113484.714(12)	113484.711	0.446(35)	0.682	
	5 ₀₅ -4 ₀₄	141769.445(60)	141769.435	0.234(23)	0.874	
	5 ₁₄ -4 ₁₃	145461.965(20)	145461.965	0.115(29)	0.402	
	H ₂ CS	3 ₁₃ -2 ₁₂	101477.879(6)	101477.878	1.054(9)	0.876
		3 ₀₃ -2 ₀₂	103040.539(12)	103040.539	0.766(8)	0.891
3 ₁₂ -2 ₁₁		104617.114(15)	104617.101	0.856(29)	0.998	
4 ₁₄ -3 ₁₃		135298.407(15)	135298.373	0.884(13)	0.870	
4 ₀₄ -3 ₀₃		137371.268(12)	137371.304	0.586(16)	0.874	
4 ₁₃ -3 ₁₂		139483.741(24)	139483.706	0.716(34)	0.855	
5 ₁₅ -4 ₁₄		169114.198(30)	169114.166	0.541(44)	0.641	
6 ₀₆ -5 ₀₅		205987.954(60)	205987.908	0.151(24)	0.832	
H ₂ C ³⁴ S		3 ₀₃ -2 ₀₂	101284.331(80)	101284.357	0.018(5)	1.170
	3 ₁₂ -2 ₁₁	102807.426(40)	102807.380	0.042(8)	0.497	
	4 ₁₄ -3 ₁₃	133027.035(40)	133027.017	0.078(22)	0.622	
	4 ₁₃ -3 ₁₂	137071.099(30)	137071.093	0.105(16)	0.758	

^a Las frecuencias observadas se estimaron a partir del ajuste gaussiano a las líneas y corresponden a la componente de velocidad de 6.7 km s⁻¹.

^b Entre paréntesis se muestran los errores de las frecuencias observadas.

La Figura 4.1 muestra las líneas observadas para las especies una y dos veces deuteradas del tioformaldehído. La diferencia entre las velocidades observadas para una misma transición de ambas moléculas (panel A de la Figura) indica que las frecuencias disponibles en los catálogos, en concreto para el D₂CS, no eran muy precisas (Cernicharo et al. 2000). A partir de las frecuencias observadas en B1 realizamos un ajuste a las constantes moleculares para obtener una mejor predicción de las frecuencias (ver Sección 4.3.2). En el panel B de la Figura 4.1 se puede ver que, al utilizar las nuevas frecuencias predichas para ambas especies, los perfiles de las líneas se ajustan perfectamente. En esta figura también se aprecia que las líneas procedentes del HDCS son algo más intensas que las que provienen del D₂CS, lo que, además de indicar una alta columna de densidad para la especie una vez deuterada, implica un gran enriquecimiento en deuterio para el D₂CS (ver Sección 4.3.3). Las líneas resultan ser bastante estrechas, como se aprecia en la Figura 4.1 y en la Tabla 4.1. La gran similitud entre los perfiles de las líneas de ambas especies indica que éstas coexisten espacialmente.

TABLA 4.2: Parámetros de línea para las transiciones observadas de las especies isotópicas del formaldehído.

Especie	Transición	Frecuencia ^a (MHz)	V_{LSR} (km s ⁻¹) ^b	T_{MB} (K)	Δv (km s ⁻¹)
HDCO	2 ₀₂ -1 ₀₁	128812.865	6.326	1.788(17)	0.689
			7.029	1.132	1.069
	2 ₁₁ -1 ₁₀	134284.909	6.389	0.781(19)	0.681
D ₂ CO	3 ₁₂ -2 ₁₁	201341.377	6.962	0.374	1.017
			6.459	0.516(20)	0.694
	2 ₁₂ -1 ₁₁	110837.821	7.454	0.080	0.613
H ₂ CO	2 ₀₂ -1 ₀₁	116688.442	6.272	0.164(20)	0.345
			6.698	0.354	0.567
	2 ₀₂ -1 ₀₁ ^c	145602.949	7.265	0.107	0.731
			6.658	0.817(121)	0.839
			6.244	2.217(42)	0.590
	3 ₁₃ -2 ₁₂ ^c	211211.448	6.860	1.340	0.563
			7.513	0.722	0.795
8.483			0.264	2.264	
6.095			1.348(48)	0.294	
H ₂ ¹³ CO	2 ₁₂ -1 ₁₁	137449.957	6.404	1.425	0.684
			7.592	0.769	3.215
			7.595	0.590	0.501
	2 ₀₂ -1 ₀₁	141983.748	6.431	0.325(24)	0.480
			6.802	0.128	0.423
			7.156	0.100	0.420
2 ₁₁ -1 ₁₀	146635.672	6.454	0.195(20)	0.733	
		6.527	0.249(22)	0.681	
		7.315	0.040	0.206	

^a Frecuencias tomadas del catálogo Lovas (ver texto).

^b Diferentes componentes de velocidad identificadas en la línea.

^c Perfiles de línea complejos con alas y autoabsorción.

Las alas y el perfil de doble pico que muestran las líneas de H₂CO (ver Figura 4.4), podrían ser producidas por el gas de alta velocidad asociado a la fuente IRAS 03301+3057, situada cerca de la condensación B1-a –pudimos comprobar de las observaciones en conmutación en frecuencia, que el perfil de absorción observado no se debía a emisión procedente de la posición de referencia. Sin embargo, nótese que nuestra posición (B1-b) se encuentra alrededor de 1' Este de dicha fuente y del pico de SiO que marca el lugar donde el flujo interactúa con el material de la nube.

Las líneas pertenecientes a las especies deuteradas del H₂CO y de H₂¹³CO son más anchas que las del tioformaldehído y sus sustituciones isotópicas, aunque menos que las de H₂CO, y tampoco muestran las alas observadas en las líneas de formaldehído. Las líneas de H₂CO son más intensas que las de H₂CS, y las procedentes del HDCO y D₂CO son unas 2 veces más intensas que las del tioformaldehído deuterado, indicando una mayor densidad de columna para las diferentes especies isotópicas del H₂CO.

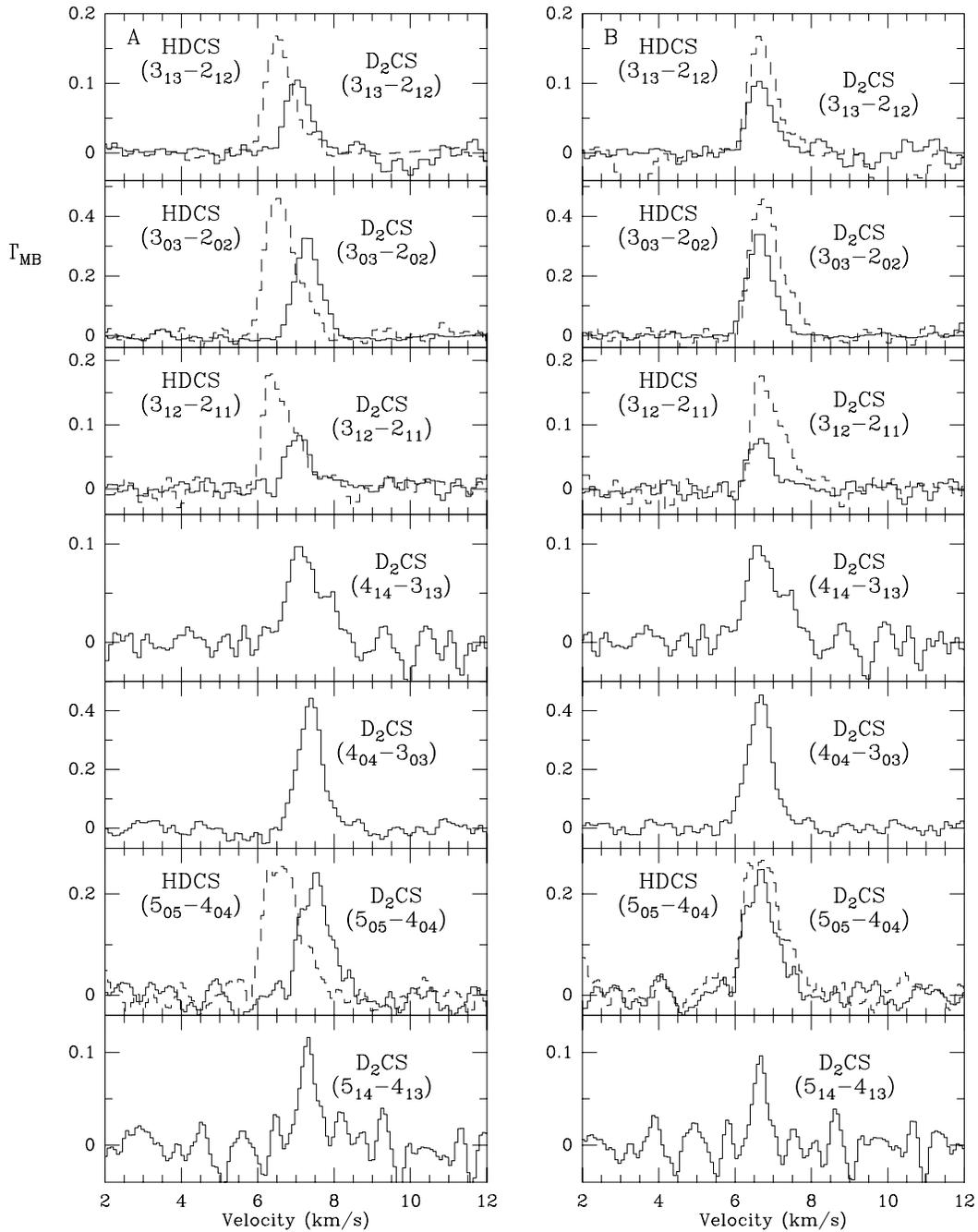


FIGURA 4.1: Transiciones observadas para el HDCS (línea discontinua) y para el D₂CS con las frecuencias tomadas de los catálogos (a), y las corregidas (b) a partir de las observadas en el cielo.

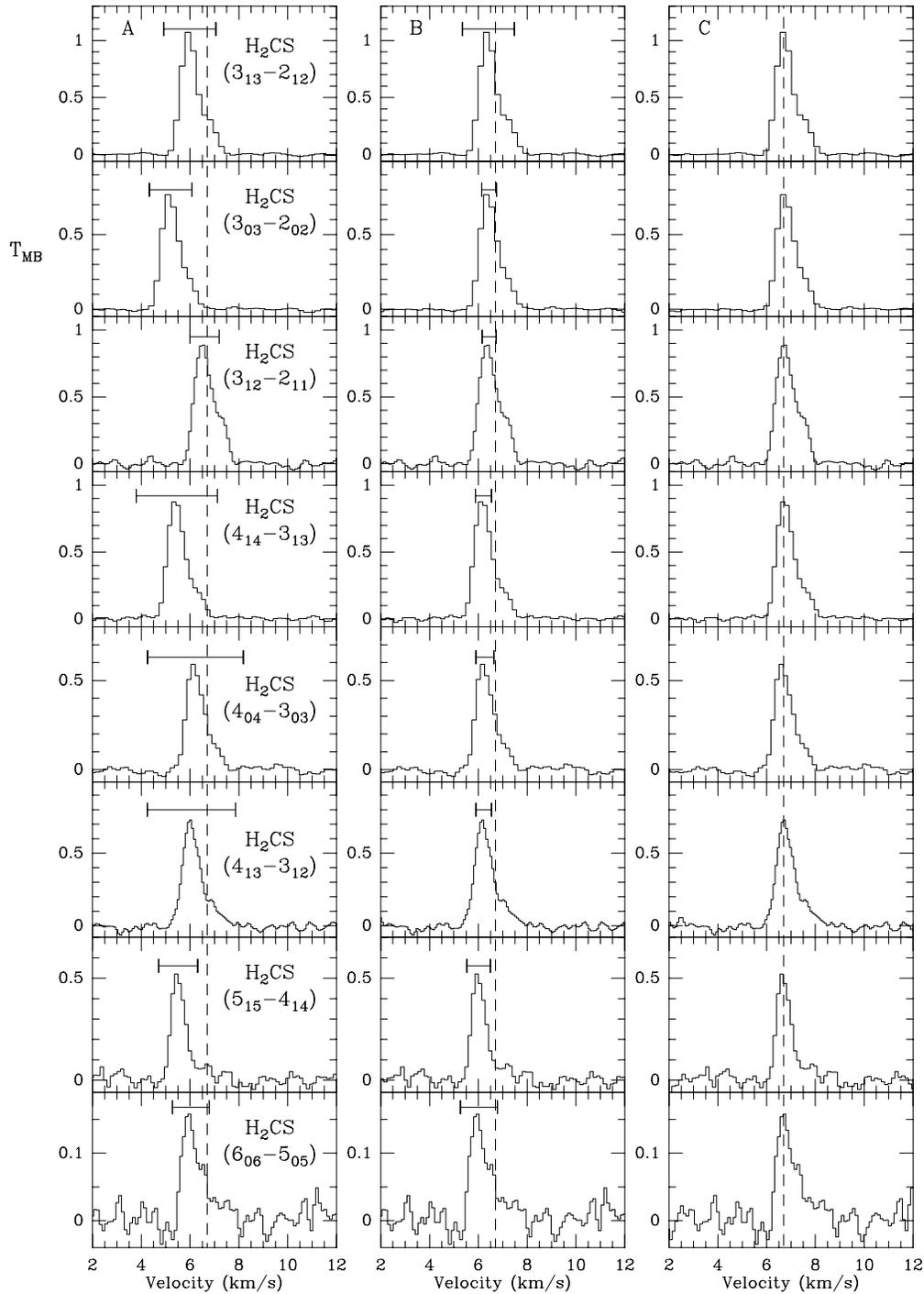


FIGURA 4.2: Transiciones observadas para el H_2CS . La escala de velocidades del panel izquierdo (A) se obtuvo a partir de las frecuencias de laboratorio, mientras que para el panel central (B) se utilizaron las frecuencias obtenidas a partir de un ajuste a los datos de laboratorio (ver texto). En dichas columnas, las líneas horizontales representan una incertidumbre de 3σ en las frecuencias (medidas o calculadas). Finalmente el panel derecho (C) muestra las líneas de H_2CS cuando asumimos una velocidad de 6.7 km s^{-1} .

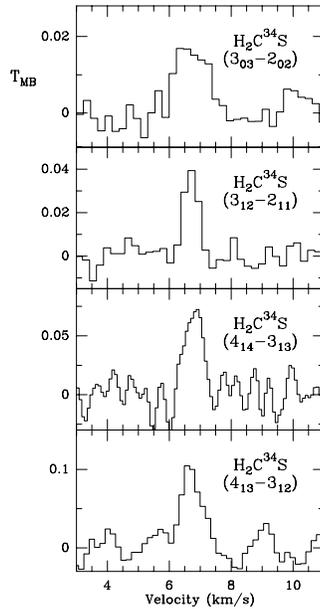


FIGURA 4.3: Transiciones observadas del H₂C³⁴S en la dirección de B1.

4.3.2. Cálculo de frecuencias

Para poder obtener las frecuencias, en primer lugar, determinamos una velocidad radial para la fuente de manera que el perfil de las líneas de las diferentes transiciones del tioformaldehído y sus sustituciones isotópicas fuera “coherente”. Para ello utilizamos 19 líneas moleculares que fueron observadas en B1 durante este trabajo y también en el barrido espectral a 3 mm, y cuyas frecuencias son bien conocidas. Las líneas que mostraban algún efecto de opacidad fueron descartadas. Así que únicamente se utilizaron las líneas procedentes del CCH (algunas componentes hiperfinas), metanol, formaldehído deuterado, CCS, y una de las componentes hiperfinas de la transición $N = 1 - 0$ del CN. La velocidad media obtenida a partir de estas líneas fue de $6.70 \pm 0.05 \text{ km s}^{-1}$, donde el error representa la indeterminación en las medidas de laboratorio y también la presencia de una segunda componente de velocidad en la nube a 7.5 km s^{-1} , que reduce la precisión de los ajustes gaussianos. Este valor estimado para la velocidad se utilizó para obtener las frecuencias observadas de todas las líneas que aparecen en la Tabla 4.1.

Durante este trabajo se observaron cuatro transiciones de HDCS, cuyas frecuencias fueron calculadas a partir de las constantes rotacionales obtenidas por Minowa et al. (1997), y siete transiciones del D₂CS en base a las frecuencias obtenidas a partir de las constantes de Cox et al. (1982). Las constantes rotacionales para estas especies fueron obtenidas a partir de transiciones de alto J . Sin embargo, la frecuencia más alta cubierta por los datos de laboratorio es de 35 GHz, así que uno puede esperar errores significativos a la hora de determinar transiciones a mayores frecuencias. La Figura 4.1 sugiere errores en las frecuencias calculadas para las transiciones de HDCS y D₂CS del orden de 0.1-0.2 MHz. Incluso para el tioformaldehído una vez deuterado, en el que las constantes rotacionales se obtuvieron a partir de una cantidad importante de datos (Minowa et al. 1997), las frecuencias observadas en nubes oscuras suelen ser diferentes a las obtenidas en el laboratorio, principalmente

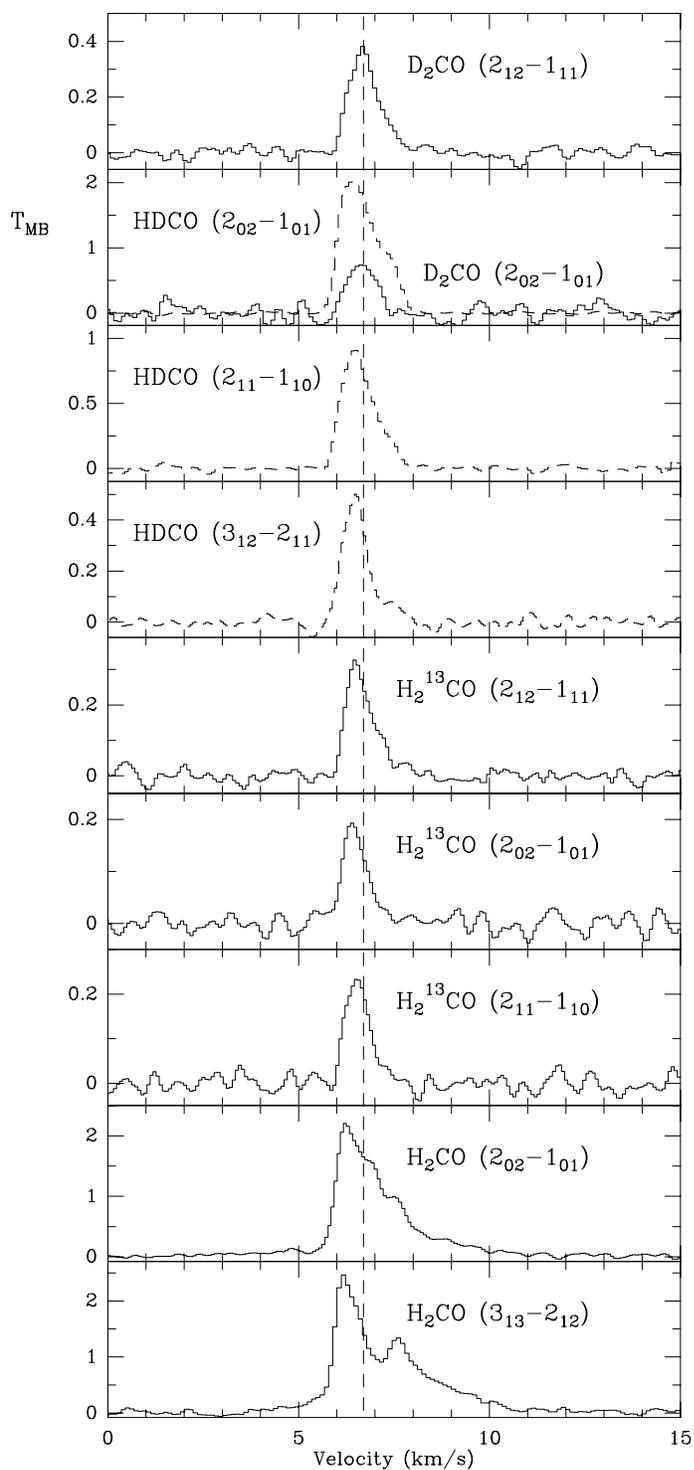


FIGURA 4.4: Transiciones correspondientes a las diferentes especies isotópicas del formaldehído. La escala de velocidades para el isótopo principal se obtuvo a partir de las frecuencias calculadas de esta especie, mientras que para el resto de especies se adoptaron las frecuencias del espacio, asumiendo una velocidad de 6.7 km^{-1} (ver texto).

debido a la pequeña anchura de línea que muestran estas regiones. Por ejemplo, la transición $3_{03}-2_{02}$ del HDCS fue observada por Minowa et al. (1997) con una frecuencia de laboratorio de 92981.601 ± 0.018 MHz, mientras que los mismos autores obtuvieron a partir de observaciones en TMC-1 una frecuencia para esa misma línea de 92981.680 MHz. Nosotros hemos observado la misma transición en B1 con una mejor relación señal/ruido y obtuvimos una frecuencia de 92981.658 ± 0.030 MHz (ver Tabla 4.1). De manera que, el uso de las frecuencias de laboratorio provoca un desplazamiento en la velocidad de la línea de 0.17 km s^{-1} (ver Figura 4.1). Parece evidente que las frecuencias predichas en los catálogos disponibles tienen errores significativos para algunas moléculas. Este es un punto crítico, porque muchas veces los astrónomos comparan los perfiles de las líneas de diferentes especies isotópicas de una determinada molécula para trazar el colapso de la nube o la opacidad de la línea. Errores mayores de 20 kHz en la frecuencia calculada pueden producir un desplazamiento en velocidad significativo cuando se comparan diferentes líneas de la misma especie o de diferentes moléculas.

La situación es incluso peor para sustituciones isotópicas como en el caso del deuterio, ^{34}S o ^{13}C . La especie isotópica $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$ es un mejor trazador de la densidad de columna del tioformaldehído que las líneas de la especie principal. En nuestro caso, observamos varias líneas de estas especies (ver Tabla 4.1) usando frecuencias del catálogo JPL (Pickett et al. 1998). El número de frecuencias medidas en el laboratorio para el $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$ es pequeño, por lo que las frecuencias calculadas pueden tener errores considerables. Por ejemplo, la transición $3_{03}-2_{02}$ predicha a 101283.899 MHz se observó a 101284.331 , la transición $3_{12}-2_{11}$ predicha a 102810.609 MHz fue observada a 102807.426 MHz, la línea $4_{14}-3_{13}$ cuya predicción es de 133031.473 MHz se observó a 133027.035 MHz, y la $4_{13}-3_{12}$ predicha a 137077.543 MHz fue observada a 137071.093 MHz. Se comprobó que dichas frecuencias observadas pertenecían a las líneas buscadas de $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$ con un ajuste simultáneo (ver más adelante) a las frecuencias de laboratorio y del espacio de varias constantes rotacionales, algunas de ellas fijadas a los valores del isótopo principal ya que el H_2CS y el $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$ tienen el mismo momento de inercia alrededor del eje de la molécula. Las grandes diferencias encontradas entre las frecuencias observadas en el espacio y las predichas pueden dar lugar a no detecciones y/o llevar a confusión, ya que normalmente se utilizan estos catálogos como un producto final para ser utilizado. Se ha de tomar un especial cuidado cuando se utilizan frecuencias obtenidas a partir de un número reducido de líneas observadas, o de predicciones fuera del dominio de frecuencias observadas en el laboratorio.

Usando las frecuencias medidas astronómicamente (Tabla 4.1) y las observadas en el laboratorio, realizamos un ajuste por mínimos cuadrados al Hamiltoniano para obtener unas nuevas constantes moleculares para H_2CS , $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$, D_2CS y HDCS. Los resultados se encuentran en las Tablas 4.3–4.6, donde también aparecen los resultados de los ajustes considerando únicamente los datos de laboratorio. Los Hamiltonianos utilizados en dicho ajuste tienen en cuenta la distorsión centrífuga que sufre la molécula debido a la rotación. Este efecto es más importante en el caso de las moléculas asimétricas, y produce un desplazamiento de las frecuencias observadas respecto a las calculadas considerando la molécula rígida. Para este análisis, se selecciona un grupo de transiciones con bajo J y pequeñas correcciones por distorsión,

para obtener aproximadamente los tres parámetros del rotor rígido. La diferencia entre la frecuencia observada y la calculada para el rotor rígido se toma como el efecto de la distorsión, y las constantes de distorsión se ajustan por mínimos cuadrados a ese desplazamiento. Según la precisión deseada se pueden incluir más o menos términos de distorsión. En nuestro caso llegamos a considerar términos de hasta sexto orden (constantes H_{JK} y H_{KJ}). La determinación de constantes de distorsión precisas requiere la utilización de varias transiciones rotacionales con efectos de distorsión de magnitud considerable. También es importante utilizar transiciones de tantas subramas como sea posible (una subrama se define por los cambios en J , K_{-1} y K_1). La utilización de transiciones con efectos de distorsión suficientes proporciona normalmente buenas predicciones para las frecuencias de nuevas transiciones, aunque hay que ser cauteloso a la hora de utilizar predicciones para alto J cuando los efectos de distorsión de alto orden no se han considerado. En general utilizamos el Hamiltoniano para un rotor asimétrico. Aunque el HDCS es un casi un trompo simétrico achatado y sería preferible utilizar un Hamiltoniano S-reducido (Gordy & Cook 1984; Watson 1977; Minowa et al. 1997), nosotros utilizamos la forma reducida asimétrica (A) del Hamiltoniano de Watson en una representación I^r (Watson 1967, 1977). Las frecuencias de laboratorio de las diferentes especies isotópicas utilizadas se tomaron de Clouthier & Ramsay (1983), Dangoise et al. (1978), Chu et al. (1973), Cox et al. (1982) y McNaughton & Bruget (1993). Aunque parece que las constantes rotacionales de las tablas muestran sólo pequeñas variaciones entre las obtenidas a partir de los datos de laboratorio y las procedentes del laboratorio más el espacio, estas variaciones producen cambios en las frecuencias calculadas de 0.1–0.2 MHz entre los dos grupos de datos. La especie menos afectada al introducir las frecuencias del espacio es el HDCS y la más afectada el $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$.

Se podría pensar que la situación debería ser mejor para el H_2CS , ya que para esta especie se han medido en el laboratorio 60 de sus transiciones rotacionales. Sin embargo, la Figura 4.2 muestra que las frecuencias medidas en el laboratorio y las calculadas dan como resultado diferentes velocidades para las líneas. Aunque los errores de las medidas de laboratorio son grandes, podríamos esperar que un ajuste global a todos los datos de laboratorio nos daría unas constantes rotacionales suficientemente precisas para permitir una buena estimación del espectro de H_2CS . Esto es cierto, como puede apreciarse en el panel central de la Figura 4.2, pero no lo suficiente para las líneas tan estrechas procedentes de las nubes oscuras. Así que, las frecuencias de las ocho líneas observadas de H_2CS se obtuvieron siguiendo un proceso similar al utilizado para sus sustituciones isotópicas, y obtuvimos un nuevo grupo de constantes rotacionales (Tabla 4.3). Con estas nuevas constantes rotacionales, pudimos calcular las frecuencias de varias transiciones para todas las especies isotópicas del tioformaldehído con mejor precisión (ver Tabla 4.1).

Las líneas de H_2CO muestran un perfil asimétrico con un ala hacia el rojo que podría deberse a la existencia de flujos moleculares. Las líneas observadas de H_2CO , HDCO y también de HDCS, presentan un segundo pico a $\sim 7.5 \text{ km s}^{-1}$. Esta segunda componente de velocidad también se observa en líneas procedentes de otras moléculas como HC^{17}O^+ , CCH, *c*- C_3H y HC_3N (ver Capítulo 2). Bachiller & Cernicharo (1984) ya detectaron, en base a los perfiles anchos y asimétricos de las líneas de ^{13}CO , dos componentes de velocidad en la nube (a 6.5 y 7.2 km s^{-1}).

TABLA 4.3: Constantes rotacionales para H₂CS.

Parámetro	Laboratorio	Lab+espacio
A	291718.6 (133)	291708.3 (169)
B	17699.6447 (146)	17699.6529 (168)
C	16651.8711 (146)	16651.8587 (165)
D_J	$2.0638 (391) \times 10^{-2}$	$1.8916 (178) \times 10^{-2}$
D_{JK}	$5.20998 (739) \times 10^{-1}$	$5.22872 (573) \times 10^{-1}$
D_K	22.8519 ^a	22.8519 ^a
δ_j	$1.21460 (129) \times 10^{-3}$	$1.21438 (163) \times 10^{-3}$
δ_k	$3.1922 (658) \times 10^{-1}$	$3.2438 (836) \times 10^{-1}$
H_J	$1.056 (492) \times 10^{-5}$	$-8.41 (313) \times 10^{-6}$

^a Valor adoptado de Clouthier & Ramsay (1983)

TABLA 4.4: Constantes rotacionales para D₂CS.

Parámetro	Laboratorio	Lab+espacio
A	146400.549 (284)	146397.685 (725)
B	14904.7104 (116)	14904.70899 (556)
C	13495.4298 (116)	13495.38776 (506)
D_J	$1.2579^a \times 10^{-2}$	$1.29708 (846) \times 10^{-2}$
D_{JK}	$2.8869 (166) \times 10^{-1}$	$2.7972 (178) \times 10^{-1}$
D_K	5.2084 ^b	6.588 (294)
δ_j	$1.40587 (269) \times 10^{-3}$	$1.38673 (369) \times 10^{-3}$
δ_k	$2.14468 (275) \times 10^{-1}$	$2.2554 (245) \times 10^{-1}$
H_{JK}	$1.198 (106) \times 10^{-6}$	$7.25 (125) \times 10^{-7}$
H_{KJ}	$-3.6562 (919) \times 10^{-4}$	$-3.075 (151) \times 10^{-4}$

^a Valor adoptado de Cox et al. (1982)

^b Valor del campo de fuerza (Turner et al. 1981)

TABLA 4.5: Constantes rotacionales del HDCS.

Parámetro	Laboratorio	Lab+espacio
A	202716.66 (217)	202716.54 (319)
B	16111.38339 (610)	16111.38820 (887)
C	14890.97584 (603)	14890.97943 (867)
D_J	$1.587381 (547) \times 10^{-2}$	$1.588513 (787) \times 10^{-2}$
D_{JK}	$3.180421 (533) \times 10^{-1}$	$3.181521 (768) \times 10^{-1}$
D_K	14.72 ^a	14.72 ^a
δ_j	$1.38002 (484) \times 10^{-3}$	$1.37782 (621) \times 10^{-3}$
δ_k	$2.8831 (281) \times 10^{-1}$	$2.8839 (414) \times 10^{-1}$
H_{JK}	$2.028 (217) \times 10^{-6}$	$2.476 (312) \times 10^{-6}$
H_{KJ}	$-4.188 (109) \times 10^{-5}$	$-4.193 (160) \times 10^{-5}$

^a Valor interpolado entre H₂CS y D₂CS

TABLA 4.6: Constantes rotacionales del H₂C³⁴S.

Parámetro	Laboratorio	Lab+espacio
A	291708.3 ^a	291708.3 ^a
B	17389.1451 (120)	17389.1477 (108)
C	16376.6721 (120)	16376.6745 (108)
D_J	$1.8417 (486) \times 10^{-2}$	$1.8283 (399) \times 10^{-2}$
D_{JK}	$5.0236 (169) \times 10^{-1}$	$5.0328 (138) \times 10^{-1}$
D_K	22.8519 ^a	22.8519 ^a
δ_j	$1.1662 (158) \times 10^{-3}$	$1.1673 (151) \times 10^{-3}$
δ_k	$3.2438^a \times 10^{-1}$	$3.2438^a \times 10^{-1}$

^a Valor fijado al de H₂CS

Las líneas de D₂CO alcanzan su máxima emisión a 6.7 km s⁻¹ (ver Figura 4.4), mientras que las de HDCO y H₂¹³CO la alcanzan a frecuencias ligeramente menores. Si asumimos para estas líneas una velocidad radial para la nube de 6.70 kms⁻¹, entonces las frecuencias para las líneas de estas dos especies isotópicas del H₂CO estarán 0.1 MHz por encima de las predichas, que son mucho más precisas (existe un mayor número de transiciones medidas en el laboratorio) que las frecuencias de las sustituciones isotópicas del H₂CS. Así que las velocidades observadas para el HDCO y el H₂¹³CO pueden ser debidas a efectos de profundidad óptica o a la estructura química de la nube. De hecho, la gran intensidad de las líneas de HDCO y los perfiles asimétricos en las del H₂CO indican altas profundidades ópticas en el núcleo de B1, o grandes columnas de densidad en las capas más exteriores para las líneas rotacionales de estas especies, incluso en las de HDCO.

4.3.3. Densidades de columna

Tanto el formaldehído como el tioformaldehído presentan una estadística de espín nuclear que separa los niveles rotacionales en dos grupos diferentes. Los niveles rotacionales con valores K_{-1} y K_{+1} par/impar y par/par pertenecen a la especie *para*, mientras que aquellos con valores impar/par e impar/impar pertenecen a la especie *orto*. Para el H₂CO, H₂CS, y las sustituciones isotópicas ¹³C, la estadística de espín nuclear da lugar a una razón orto/para de 3:1. Las especies una vez deuteradas HDCO y HDCS no presentan esta separación de los niveles rotacionales debido a que la simetría de la molécula se ha roto por la deuteración. Sin embargo, estas especies presentan transiciones rotacionales de tipo-*b* ya que la deuteración introduce un pequeño momento dipolar permanente a lo largo del eje *b* de la molécula (típicamente de 0.2-0.3 D). Por otro lado, las especies dos veces deuteradas también tienen eje de simetría, y la estadística de espín nuclear separa los niveles rotacionales. Sin embargo, puesto que el espín nuclear es diferente, los niveles rotacionales de las especies dos veces deuteradas con valores de K_{-1} y K_{+1} impar/par o impar/impar pertenecen a la especie *para*, y aquellos con valores par/impar y par/par a la especie *orto*, es decir, justo al contrario que los isótopos principales. Además, la razón orto/para en las especies dos veces deuteradas del formaldehído y del tioformaldehído es de 2.

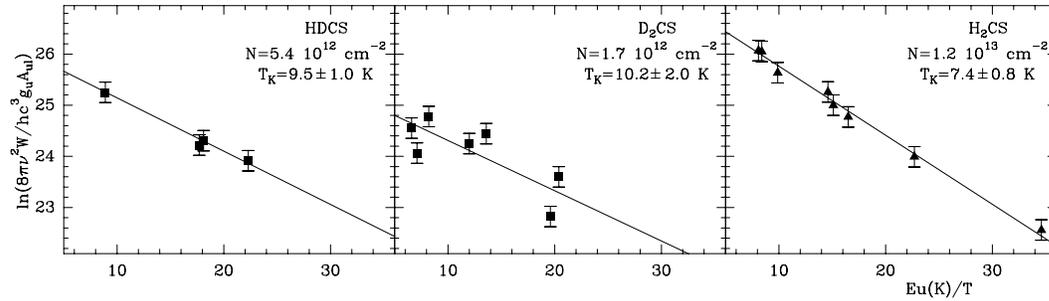


FIGURA 4.5: Diagramas de rotación para HDCS, D₂CS y H₂CS. Los valores de densidades de columna son los valores medios.

Tioformaldehído

Las densidades de columna del tioformaldehído fueron obtenidas por dos métodos diferentes. El primero consiste en el análisis de diagramas rotacionales o de población para las especies observadas del tioformaldehído (ver Apéndice A). Las temperaturas rotacionales obtenidas son ~ 10 K (ver Figura 4.5), $T_{\text{rot}} = 9.5 \pm 1.0$, 10.2 ± 2.0 , y 7.4 ± 0.8 K para el HDCS, D₂CS y el H₂CS respectivamente, lo que sugiere que la densidad de volumen de hidrógeno molecular es suficientemente grande como para termalizar los niveles rotacionales de estas moléculas (en caso de termalización, T_{rot} debe ser parecida a T_{kin}).

Las densidades de columna obtenidas para estas especies, suponiendo que la fuente llena todo el haz principal del telescopio, son $N(\text{H}_2\text{CS}) = 1.2 - 2.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, $N(\text{HDCS}) = 4.5 - 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y $N(\text{D}_2\text{CS}) = 1.0 - 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. De manera que las correspondientes razones de abundancia resultan ser $\text{H}_2\text{CS}/\text{HDCS} \simeq 3 \pm 1$, $\text{HDCS}/\text{D}_2\text{CS} \simeq 3 \pm 2$, y $\text{H}_2\text{CS}/\text{D}_2\text{CS} \simeq 9 \pm 3$. Finalmente, para el H₂C³⁴S tomamos la temperatura rotacional del H₂CS y obtuvimos $N(\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}) = 6.0 \pm 3.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Las columnas de densidad de H₂CS y H₂C³⁴S son compatibles con una razón galáctica ³²S/³⁴S de 24.4 ± 5.0 (Chin et al. 1996). Este análisis no proporciona información sobre la densidad de volumen del gas y supone que las líneas son ópticamente delgadas (lo que parece ser cierto en vista de la baja columna de densidad obtenida para el H₂C³⁴S).

La densidad de volumen del gas y otros parámetros físicos se pueden obtener a partir de las intensidades observadas y un código de “Grandes Gradientes de Velocidad” (LVG, del inglés *Large Velocity Gradient*, ver Apéndice B), para resolver las ecuaciones acopladas de transferencia radiativa y de equilibrio estadístico. Este método se basa en la aproximación de Sobolev (ver Goldreich & Kwan 1974), en la que se considera que la anchura de las líneas se debe a la existencia de grandes gradientes de velocidad a lo largo de la nube, de manera que regiones con diferentes velocidades no se encuentran conectadas radiativamente. Entonces, un fotón emitido por una molécula que no es re-absorbido localmente por otra molécula en la misma región de velocidades podrá escapar de la nube. Este código necesita, entre otros parámetros, la sección eficaz de colisión de la molécula que, en el caso del tioformaldehído y sus isótopos no son conocidas. Para el H₂CS utilizamos las tasas colisionales del formaldehído obtenidas por Green et al. (1978), multiplicando

por un factor 2 que tiene en cuenta la diferencia en superficie efectiva y energía de los niveles de H_2CS (un factor similar al que existe entre las de CO y CS). Puesto que el número de líneas observadas de H_2CS es suficientemente grande, pudimos comprobar que las tasas colisionales adoptadas reproducen las intensidades observadas utilizando valores razonables de densidad del gas y temperatura. Desde luego, el resultado final debe estar en concordancia con las columnas de densidad y temperaturas rotacionales obtenidas de los diagramas de rotación. Asumiendo una temperatura cinética del gas de 10 K (ver Sección 2.2.1) obtuvimos temperaturas rotacionales para las transiciones observadas del tioformaldehído entre 6.5 y 9.1 K, para una densidad de volumen del gas de $2 - 4 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ y unas columnas de densidad de 1.2×10^{13} y $0.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ para las especies orto y para respectivamente. Estos valores son compatibles con los obtenidos a partir de los diagramas de rotación.

Para el D_2CS utilizamos la misma tasa colisional que para el H_2CS . Asumiendo otra vez un valor de 10 K para la temperatura cinética, obtuvimos $n(\text{H}_2) = 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $T_{\text{rot}} \simeq 10 \text{ K}$, y $N(\text{D}_2\text{CS}) \simeq 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y una razón orto/para de 1.7, muy cercana al valor esperado de 2.

En el caso del HDCS, las tasas colisionales pueden diferir bastante de las del H_2CS . Intentamos ajustar los datos utilizando las pertenecientes al HNC0, pero era difícil obtener una buena reproducción de los datos con unos valores razonables para los parámetros físicos (algo esperable debido a esta cruda aproximación a las tasas colisionales del HDCS). Así que para esta especie adoptamos los valores obtenidos anteriormente de los diagramas de rotación, ya que los resultados obtenidos a partir del código LVG para las otras especies son comparables a los obtenidos de los diagramas rotacionales.

Formaldehído

Las densidades de columna para el formaldehído y sus sustituciones isotópicas se obtuvieron a partir de un análisis LVG y de las intensidades observadas, adoptando las tasas colisionales de Green et al. (1978). El perfil de línea del H_2CO indica opacidades mayores de la unidad, de modo que la columna de densidad de esta especie se calculó a partir del H_2^{13}CO asumiendo una razón isotópica $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 50 para nubes oscuras (Cernicharo & Guélin 1987; Langer et al. 1980a). Tomando de nuevo un valor de 10 K para la temperatura cinética del gas, obtuvimos $N(\text{H}_2^{13}\text{CO}) = 1.2 \pm 0.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $n(\text{H}_2) = 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. No existe en los datos observados ninguna evidencia de una razón orto/para distinta a 3. La columna de densidad para la especie doblemente deuterada es de $N(\text{D}_2\text{CO}) = 3.0 \pm 1.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Para el HDCO asumimos la misma temperatura de rotación que para el resto de especies isotópicas del formaldehído y obtuvimos $N(\text{HDCO}) = 7 \pm 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. De modo que las razones isotópicas son $\text{H}_2\text{CO}/\text{HDCO} \simeq 7$, $\text{H}_2\text{CO}/\text{D}_2\text{CO} \simeq 13$, y $\text{HDCO}/\text{D}_2\text{CO} \simeq 2.5$. Mientras que las razones de abundancia entre las especies una vez sobre la dos veces deuterada para el formaldehído y el tioformaldehído son similares (~ 3), la razón entre la especie principal y la una vez deuterada es dos veces mayor en el formaldehído comparado con el tioformaldehído.

TABLA 4.7: Abundancias relativas XD/XH observadas en diferentes fuentes.

	B1	TMC-1(CP)	L134N	IRAS16293	Orion-KL
DCO ⁺ /HCO ⁺		0.012 ¹	0.180 ²	0.009 ³	<0.01 ⁴
N ₂ D ⁺ /N ₂ H ⁺	0.150 ⁵	0.0064 ¹	0.300 ⁵		<0.30 ⁴
NH ₂ D/NH ₃	0.128 ⁶	<0.001 ¹	0.10 ^{2,7}	0.100 ³	0.062 ⁸
ND ₂ H/NH ₃			0.050 ⁷		
ND ₃ /NH ₃	0.0008 ⁹				
HDCO/H ₂ CO	0.143		0.068 ¹	0.140 ³	0.140 ⁸
D ₂ CO/H ₂ CO	0.080			0.05 ¹⁰	0.003 ⁸
D ₂ CO/HDCO	0.400			<0.50 ⁷	0.021 ⁸
HDS/H ₂ S				0.100 ³	<0.02 ¹¹
D ₂ S/HDS	0.108 ¹²			<0.264 ¹²	
HDCS/H ₂ CS	0.300	0.020 ¹³			
D ₂ CS/H ₂ CS	0.110				
D ₂ CS/HDCS	0.333				
CH ₃ OD/CH ₃ OH		0.026 ¹	<0.032 ¹	0.015 ¹⁴	0.01-0.06 ¹⁵
CH ₂ DOH/CH ₃ OH				0.306 ¹⁴	
CHD ₂ OH/CH ₃ OH				0.060 ¹⁴	
CD ₃ OH/CH ₃ OH				~0.010 ¹⁴	

Referencias. — 1. Turner (2001); 2. Tiné et al. (2000); 3. van Dishoeck et al. (1995); 4. Turner & Zuckerman (1978); 5. Gerin et al. (2001); 6. Saito et al. (2000); 7. Roueff et al. (2000); 8. Turner (1990); 9. Lis et al. (2002); 10. Loinard et al. (2000); 11. Minh et al. (1990); 12. Vastel et al. (2003); 13. Minowa et al. (1997); 14. Parise et al (2004); 15. Mauersberger et al. (1988).

4.4. La química del deuterio

La Tabla 4.7 recoge las abundancias relativas de varias especies deuteradas observadas en nubes oscuras y regiones de formación estelar. También se han incluido las razones obtenidas en este trabajo para B1. Todas ellas muestran abundancias muy superiores al valor cósmico D/H $\sim 1.5 \cdot 10^{-5}$ (York & Rogerson 1976; Linsky 1998). Comparando entre las especies de la Tabla podemos ver que el mayor enriquecimiento en deuterio es para el tioformaldehído en B1. En general, las razones de abundancia en B1 son sólo comparables con las observadas en la protoestrella binaria de Clase 0 IRAS 16293-2422. Esto indica que los procesos de deuteración deben ser similares en las dos fuentes y diferentes de los que ocurren en las nubes oscuras y quiescentes.

Para reproducir los resultados descritos anteriormente, se utilizó un modelo de química para moléculas con deuterio (Lis et al. 2002; Roueff et al. 2005), en el cual se incluyeron moléculas que contienen azufre. Se añadieron a este modelo SD, HDS, D₂S, HDCS, y D₂CS, y los iones SD⁺, HDS⁺, D₂S⁺, H₂DS⁺, HD₂S⁺, D₃S⁺, HDCS⁺, D₂CS⁺, H₂DCS⁺, HD₂CS⁺, y D₃CS⁺. Se ha asumido, como suele hacerse en estudios similares, que las especies deuteradas se comportan como la especie principal y hemos calculado las diferentes velocidades de reacción a partir de argumentos estadísticos, excepto cuando se consideraron reacciones de recombinación disociativas. En este último caso, hemos asumido que eliminar un átomo de hidrógeno era 2 veces más eficaz que la liberación de un deuterio. Esto ha sido demostrado en varios estudios experimentales de iones varias veces deuterados (Le Petit & Roueff 2003).

Las velocidades de reacción se han tomado del anterior modelo químico (Pineau des Forêts et al. 1993), actualizado con los recientes cálculos de Anicich (2003), y del trabajo disponible de la Universidad de Ohio (Herbst y colaboradores). Como se recuerda en Millar (2003), el enriquecimiento en deuterio se inicia con las reacciones de H_3^+ , CH_3^+ y C_2H_2^+ con D y HD. Hemos extendido las reacciones de las especies parcialmente deuteradas hasta llegar a formar los iones totalmente deuterados D_3^+ , CD_3^+ , y C_2D_2^+ , como ha sido estudiado en el laboratorio por Gerlich & Schlemmer (2002). Otra importante novedad ha sido el considerar las reacciones con D_2 , lo que permite un mayor enriquecimiento en deuterio. Estudios recientes de laboratorio han demostrado que las reacciones son menos efectivas de lo que se supone normalmente (Millar 2003), y que la reacción endotérmica inversa puede ser más rápida de lo esperado a partir de la termodinámica. De modo que hemos tomado los coeficientes de velocidades de reacción obtenidos de los experimentos (Gerlich et al. 2002), pero hemos determinado las reacciones inversas a partir de la termodinámica. También se han introducido posibles reacciones de H_2CS^+ , H_3CS^+ y H_3S^+ con HD, lo que no se había considerado hasta este momento, ya que no existe información disponible teórica o experimental. Las correspondientes reacciones y coeficientes de velocidad se muestran en la Tabla 4.8, donde los valores endotérmicos de las reacciones inversas se han supuesto. Puesto que se han asumido las velocidades de colisión de Langevin, los resultados obtenidos al incluir estas reacciones nos dan un límite superior para el enriquecimiento del deuterio. Su influencia se discute a continuación.

El modelo resultante consiste en 210 especies ligadas por más de 3000 reacciones químicas. Los detalles pueden encontrarse en Roueff et al. (2005). Aquí nos centraremos en la deuteración de las moléculas con azufre. Observaciones recientes han demostrado que el enriquecimiento en deuterio se encuentra ligado a un gran empobrecimiento de moléculas en la fase gas (ver, p.ej., Bacmann et al. 2003). De manera que hemos considerado tres modelos diferentes con densidades de H_2 de 10^4 , 10^5 y 10^6 y diferente grado de empobrecimiento, como puede verse en la Tabla 4.9. Estos tres modelos se corresponden aproximadamente con las condiciones encontradas en TMC-1, B1 y L134N (L183). La velocidad de ionización cósmica y la temperatura se han considerado constantes e iguales respectivamente a $2 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ y 10 K. La abundancia en azufre también se ha tomado como constante e igual al del caso de baja metalicidad, i.e $\text{S}/\text{H}_2 = 3.70 \times 10^{-7}$. La Tabla muestra que, como esperábamos, el enriquecimiento en deuterio aumenta de los modelos 1 a 3. Las reacciones en las que intervienen H_2CO^+ , H_3CO^+ , H_3S^+ y H_3CS^+ , parecen ser de considerable importancia para el enriquecimiento del H_2S . Sin embargo, su papel es mucho menor en el caso del formaldehído y el tioformaldehído. Esto se debe a que el H_2S se obtiene directamente de la recombinación disociativa del H_3S^+ y necesita una sucesión de reacciones ión-molécula. En el caso del formaldehído y el tioformaldehído, se producen reacciones neutras entre CH_3 y oxígeno, y CH_3 y azufre atómico a una velocidad de $1.4 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. De modo que el enriquecimiento en deuterio de H_2CO y H_2CS reflejan directamente el de CH_3 . La reacción de CH_3 y O sólo ha sido estudiada en el laboratorio por debajo de 300 K y el coeficiente de velocidad de reacción con el azufre se ha tomado del modelo químico del grupo de E. Herbst de la Universidad de Ohio.

TABLA 4.8: Reacciones para el enriquecimiento en deuterio introducidas en el modelo (ver texto).

Reacción	k_f^a (cm ³ s ⁻¹)	β (K)
H ₃ CO ⁺ + HD ⇌ H ₂ DCO ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₃ S ⁺ + HD ⇌ H ₂ DS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ DS ⁺ + HD ⇌ HD ₂ S ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HD ₂ S ⁺ + HD ⇌ D ₃ S ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	300
H ₃ S ⁺ + D ₂ ⇌ HD ₂ S ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ DS ⁺ + D ₂ ⇌ D ₃ S ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
H ₂ DS ⁺ + D ₂ → HD ₂ S ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HD ₂ S ⁺ + D ₂ ⇌ D ₃ S ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	300
H ₂ CS ⁺ + HD ⇌ HDCS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
HDCS ⁺ + HD ⇌ D ₂ CS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
H ₂ CS ⁺ + D ₂ ⇌ D ₂ CS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ CS ⁺ + D ₂ ⇌ HDCS ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HDCS ⁺ + D ₂ ⇌ D ₂ CS ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	300
H ₃ CS ⁺ + HD ⇌ H ₂ DCS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ DCS ⁺ + HD ⇌ HD ₂ CS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HD ₂ CS ⁺ + HD ⇌ D ₃ CS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
H ₃ CS ⁺ + D ₂ ⇌ HD ₂ CS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₃ CS ⁺ + D ₂ ⇌ H ₂ DCS ⁺ + H ₂	2.0 × 10 ⁻⁹	400
H ₂ DCS ⁺ + D ₂ ⇌ HD ₂ CS ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	500
HD ₂ CS ⁺ + D ₂ ⇌ D ₃ CS ⁺ + HD	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₃ S ⁺ + D ⇌ H ₂ DS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ DS ⁺ + D ⇌ HD ₂ S ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HD ₂ S ⁺ + D ⇌ D ₃ S ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	300
H ₂ CS ⁺ + D ⇌ HDCS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	500
HDCS ⁺ + D ⇌ D ₂ CS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	400
H ₃ CS ⁺ + D ⇌ H ₂ DCS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	500
H ₂ DCS ⁺ + D ⇌ HD ₂ CS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	400
HD ₂ CS ⁺ + D ⇌ D ₃ CS ⁺ + H	2.0 × 10 ⁻⁹	300

^a La velocidad de reacción es k_f ; la correspondiente a la reacción inversa, k_r , viene dada por $k_f e^{-\beta/T}$.

TABLA 4.9: Predicciones de enriquecimiento en deuterio para moléculas con azufre, considerando diferentes modelos de nube.

	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3
H ₂ (cm ⁻³)	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶
C/H ₂	7.5 × 10 ⁻⁵	3.0 × 10 ⁻⁵	1.5 × 10 ⁻⁵
O/H ₂	2 × 10 ⁻⁴	8 × 10 ⁻⁵	4 × 10 ⁻⁵
N/H ₂	2 × 10 ⁻⁵	2 × 10 ⁻⁵	2 × 10 ⁻⁵
x(e ⁻)	6.03 × 10 ⁻⁸	3.52 × 10 ⁻⁸	2.60 × 10 ⁻⁸
nube molecular representativa	TMC-1	Barnard 1	L134N
H (cm ⁻³)	2.24	2.22	2.25
HD (cm ⁻³)	2.76 × 10 ⁻¹	2.76	26.8
D/H	0.0053	0.012	0.021
D ₂ /HD	0.021	0.036	0.059
H ₂ D ⁺ /H ₃ ⁺	0.029	0.10	0.16
D ₂ H ⁺ /H ₂ D ⁺	0.054	0.10	0.16
D ₃ ⁺ /D ₂ H ⁺	0.041	0.086	0.15
HDCO/H ₂ CO ^a	0.091	0.12	0.14
	0.048	0.07	0.089
D ₂ CO/HDCO ^a	0.34	0.57	0.80
	0.60	0.95	1.20
HDS/H ₂ S ^a	0.26	0.37	0.43
	0.017	0.032	0.050
D ₂ S/HDS ^a	0.53	1.0	1.32
	0.0049	0.007	0.0086
HDCS/H ₂ CS ^a	0.16	0.18	0.18
	0.041	0.065	0.086
D ₂ CS/HDCS ^a	0.48	0.85	1.17
	0.37	0.67	0.92
DCO ⁺ /HCO ⁺	0.028	0.043	0.066
NH ₂ D/NH ₃	0.040	0.077	0.20
ND ₂ H/NH ₂ D	0.027	0.041	0.051
ND ₃ /ND ₂ H	0.035	0.05	0.056
N ₂ D ⁺ /N ₂ H ⁺	0.032	0.047	0.068

^a La primera y segunda líneas corresponden respectivamente, a los modelos con y sin las reacciones de enriquecimiento de H₂CO⁺, H₃CO⁺, H₃S⁺, H₃CS⁺.

Como se puede deducir de la Tabla 4.9, el modelo en fase gas nos da los ordenes de magnitud correctos en el enriquecimiento por deuterio en amoníaco, HCO⁺, y N₂H⁺ para las altas densidades y grandes factores de empobrecimiento considerados cuando se comparan con los valores observados. En este modelo los granos de polvo realizan un papel pasivo, ya que éstos se encargan de atrapar una importante fracción del carbono y oxígeno atómicos, permitiendo que ocurran los procesos químicos de fase gas. No se ha pretendido en este estudio obtener un perfecto ajuste a los valores observados, ya que existen muchos parámetros físicos y químicos que aún no se conocen bien.

4.5. Resumen y conclusiones

En este capítulo se ha presentado un exhaustivo estudio en la fuente B1 de las especies deuteradas del tioformaldehído. Para poder comparar el alto grado de enriquecimiento en deuterio observado en esta especie, también se observaron varias transiciones procedentes del formaldehído y sus formas deuteradas. A continuación se resumen los principales resultados obtenidos.

- La velocidad sistemática del gas denso en B1 fue determinada a partir de cerca de 20 líneas moleculares ópticamente delgadas cuyas frecuencias son bien conocidas. Se obtuvo un valor para la velocidad de $6.70 \pm 0.05 \text{ km s}^{-1}$.
- Las frecuencias observadas para las transiciones de HDCS, D₂CS y H₂C³⁴S, al igual que los datos de laboratorio disponibles, se ajustaron conjuntamente para obtener nuevas constantes rotacionales para estas especies, con las que se calcularon frecuencias más precisas en el dominio de las ondas milimétricas.
- Las temperaturas rotacionales y las densidades de columna para H₂CS, H₂CO y sus especies deuteradas se obtuvieron a partir de diagramas rotacionales y/o utilizando la aproximación LVG. Las razones de abundancias H₂CS/HDCS y H₂CS/D₂CS obtenidas son de ~ 3 y 9 respectivamente, mientras que las correspondientes al formaldehído son ~ 7 y 13 .
- Los modelos de química en fase gas son capaces de reproducir el enriquecimiento en deuterio observado de forma aproximada, si se consideran los factores de empobrecimiento adecuados, como los encontrados en diferentes condensaciones frías. De este modo, los procesos químicos que tienen lugar en la superficie de los granos no se han incluido de forma específica, puesto que se conocen poco, quedando así relegado el papel de los granos a un plano pasivo, considerando únicamente el empobrecimiento del gas en especies como el oxígeno, CO, H₂O, etc., de forma que éstos no se encuentran disponibles para que se produzcan ciertas reacciones químicas en fase gas. Nuestros resultados también incluyen algunas nuevas consideraciones químicas específicas, que no han sido estudiadas en el laboratorio o teóricamente, que contribuyen a aumentar el fraccionamiento en deuterio. Sin embargo, su influencia en nuestros resultados no es determinante excepto en el caso de la deuteración de H₂S.

Capítulo 5

Descubrimiento del Propileno Interestelar

5.1. Introducción

En este Capítulo se describe la primera detección del propileno (también llamado propeno, CH_2CHCH_3), durante el barrido espectral a 3 mm en la dirección de la nube oscura TMC-1. El propileno es el hidrocarburo más saturado (con una relación H/C muy alta) detectado hasta el momento en el espacio a través de técnicas radio astronómicas. Aunque este isómero del C_3H_6 puede jugar un papel importante en la química interestelar, ha sido ignorado en los modelos de la química de nubes oscuras puesto que no parece haber un canal de formación evidente en fase gas.

El propileno, cuya estructura se muestra en la Figura 5.1, es un rotor interno con una barrera de potencial relativamente alta contra el movimiento de torsión del grupo metilo (CH_3). Esta rotación interna produce un desdoblamiento de cada línea rotacional en dobletes, donde cada una de las líneas del doblete pertenece a las especies *A* y *E*. Debido a la alta barrera torsional, estos desdoblamientos son pequeños, del orden de 0.3–4 MHz en el rango milimétrico del espectro. El primer estudio del espectro rotacional del propileno, en su estado torsional fundamental, fue realizado a bajas frecuencias, entre 17–36 GHz (Lide & Mann 1957). Estos autores también midieron las componentes del momento dipolar en la dirección de los ejes principales, resultando ser $\mu_a = 0.36$ D, $\mu_b = 0.05$ D. Se han realizado también estudios del espectro rotacional en los estados torsionales excitados $\nu_t = 1, 2$ por Hirota et al. (1966, 1968, 1970). Más recientemente, el espectro rotacional del propileno en su estado fundamental ha sido medido en el laboratorio en un rango de frecuencias desde microondas hasta las ondas milimétricas (8–245 GHz, Wlodarczak et al. 1994; 8–412 GHz, Pearson et al. 1994). Estos estudios de laboratorio permiten predicciones a las frecuencias bastante precisas dentro del dominio de nuestra búsqueda.

Pearson et al. (1994) ya sugirieron que esta molécula podría ser detectada en el espacio a pesar de su pequeño momento dipolar. Varios hidrocarburos con tres átomos de carbono han sido ya detectados en nubes interestelares, o en la atmósfera de la estrella evolucionada IRC+10216. Entre ellos, los isómeros cíclico y lineal del C_3H y del C_3H_2 y el metil acetileno (CH_3CCH), se han encontrado también

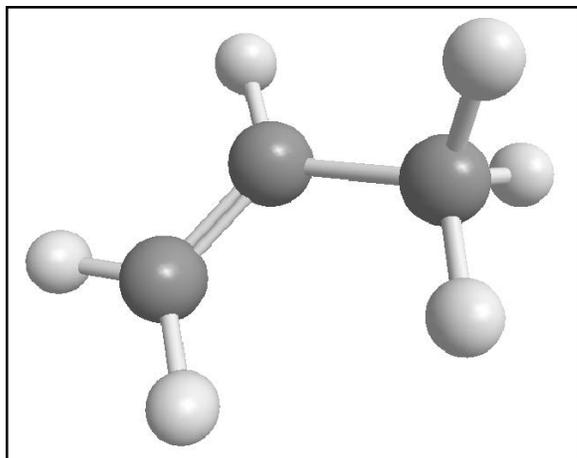


FIGURA 5.1: Estructura molecular del propileno. Las esferas representan los átomos de carbono (gris oscuro), y de hidrógeno (gris claro).

en nubes oscuras con una abundancia importante (ver Tabla 5.1). Sin embargo, puesto que el propileno es una especie mucho más hidrogenada que las anteriores, Pearson et al. (1994) consideran que el lugar idóneo para su búsqueda serían los núcleos calientes asociados a formación estelar masiva, donde se han encontrado las especies más saturadas. Los modelos de química actuales explican la producción de estas moléculas saturadas de manera eficiente en la superficie de los granos, vía reacciones de adición de átomos de hidrógeno durante la fase pre-estelar y fría ($T \sim 10$ K). Más tarde, tras la formación de una o varias estrellas, estas especies son eyectadas a la fase gas al aumentar la temperatura del gas y de los granos ($T \sim 100 - 200$ K). Sin embargo, este mecanismo no es aplicable en nubes frías y quiescentes.

Como se ha visto anteriormente, las nubes frías y oscuras poseen una química compleja de fase gas, que lleva a la formación de gran variedad de moléculas. La ausencia de fuentes de calor en su interior y de procesos físicos violentos, como los choques, hace de estas nubes densas y quiescentes los mejores lugares para explorar y modelizar la química interestelar en fase gas y la deposición de especies en la superficie de los granos de polvo. Entre ellas, el filamento denso TMC-1 (ver Sección 2.2.4) es una de las fuentes moleculares conocidas con mayor riqueza molecular, en concreto posee una gran abundancia de cadenas de carbono tales como radicales insaturados (C_nH) y cianopoliinos ($HC_{2n+1}N$). Aunque la visión típicamente adoptada en la bibliografía de esta región es la de una condensación fría y quiescente (como indica la pequeña anchura de las líneas observadas), algunos autores sugieren que la presencia de choques, procedentes de la fuente infrarroja cercana IRAS 04381+2540, podrían producir la inyección explosiva de los componentes de los granos y contribuir así a la formación de largas cadenas de carbono como el metilcianoacetileno (Markwick et al. 2000; Snyder et al. 2006).

El descubrimiento en una nube oscura de una especie tan saturada, que parece más propia de nubes calientes y regiones de formación estelar, sugiere una revisión exhaustiva de la completitud de los modelos actuales de la química de fase gas.

TABLA 5.1: Densidades de columna para varios hidrocarburos en TMC-1.

Especie	μ^a (D)	N (10^{12} cm $^{-2}$)	Especie	μ^a (D)	N (10^{12} cm $^{-2}$)
C ₂ H ⁽¹⁾	0.77	70	c-C ₃ H ₂ ⁽²⁾	3.43	60
l-C ₃ H ⁽²⁾	3.55	0.8	H ₂ C ₄ ⁽⁴⁾	4.10	8
c-C ₃ H ⁽²⁾	2.40	10	H ₂ C ₆ ⁽⁵⁾	6.20	0.5
C ₄ H ⁽³⁾	0.87	300	CH ₃ CCH ⁽¹⁾	0.78	80
C ₅ H ⁽⁴⁾	4.88	9	CH ₃ C ₄ H ⁽⁴⁾	1.21	10
C ₆ H ⁽²⁾	5.54	8	CH ₃ C ₆ H ⁽⁶⁾	1.50	3
l-C ₃ H ₂ ⁽²⁾	4.10	2	CH ₂ CHCH ₃ ⁽⁷⁾	0.36	40

^a Los momentos dipolares se han tomado de los catálogos JPL y CDMS.

Referencias. — 1. Pratap et al. (1997); 2. Fossé et al. (2001); 3. Guélin et al. (1982b); 4. Ohishi & Kaifu (1998); 5. Langer et al. (1997); 6. Remijan et al. (2006); 7. este trabajo.

En la Sección 5.2 se describen las observaciones y en la Sección 5.3 los resultados obtenidos, incluyendo el cálculo de la columna de densidad para esta especie. En la Sección 5.4 se discuten algunas consideraciones químicas para intentar explicar la formación de esta molécula compleja y altamente saturada en TMC-1. Finalmente se presentan las principales conclusiones de este trabajo (Sección 5.5).

5.2. Observaciones

Las observaciones se realizaron con el telescopio de IRAM de 30 m en varias sesiones (ver más adelante), algunas de las cuales forman parte del barrido espectral descrito en los Capítulos 2 y 3.

Se utilizaron simultáneamente dos receptores SIS sensibles en la banda de 3 mm. Ambos fueron sintonizados a la misma frecuencia y en modo de banda simple, con un rechazo de la banda imagen de ~ 20 dB. Las temperaturas de sistema fueron de 110–150 K en todos los periodos observacionales. Se utilizó también en este caso el modo de observación de conmutación en frecuencia, con una diferencia entre las fases de 1.8 MHz (observaciones del barrido a 3 mm), y de 7.2 MHz para las nuevas líneas fuera del rango espectral del barrido, ya que este valor evita la formación de ondas estacionarias instrumentales y mejora la línea de base del espectro (ver Thum et al. 1995). Se utilizó nuevamente el autocorrelador VESPA, con una resolución espectral de 40 kHz (~ 0.13 km s $^{-1}$) y un ancho de banda máximo de 315 MHz. La calibración en intensidades y la obtención de parámetros atmosféricos se hizo del mismo modo que en las observaciones descritas en los capítulos anteriores. Los tiempos de integración sobre la fuente fueron típicamente ~ 3 horas. El apuntado y el foco del telescopio se comprobaron cada 1.5 y 3 horas respectivamente, en fuentes de continuo intensas y cercanas.

La escala de intensidades viene dada en temperatura de brillo de haz principal (T_{MB}). A las frecuencias observadas, la anchura del haz del 30 m es de 24–29", y la eficiencia del haz principal de 0.78–0.75. Las líneas observadas se muestran en la Figura 5.2 y los parámetros de línea, obtenidos a partir de ajustes gaussianos, se encuentran en la Tabla 5.2.

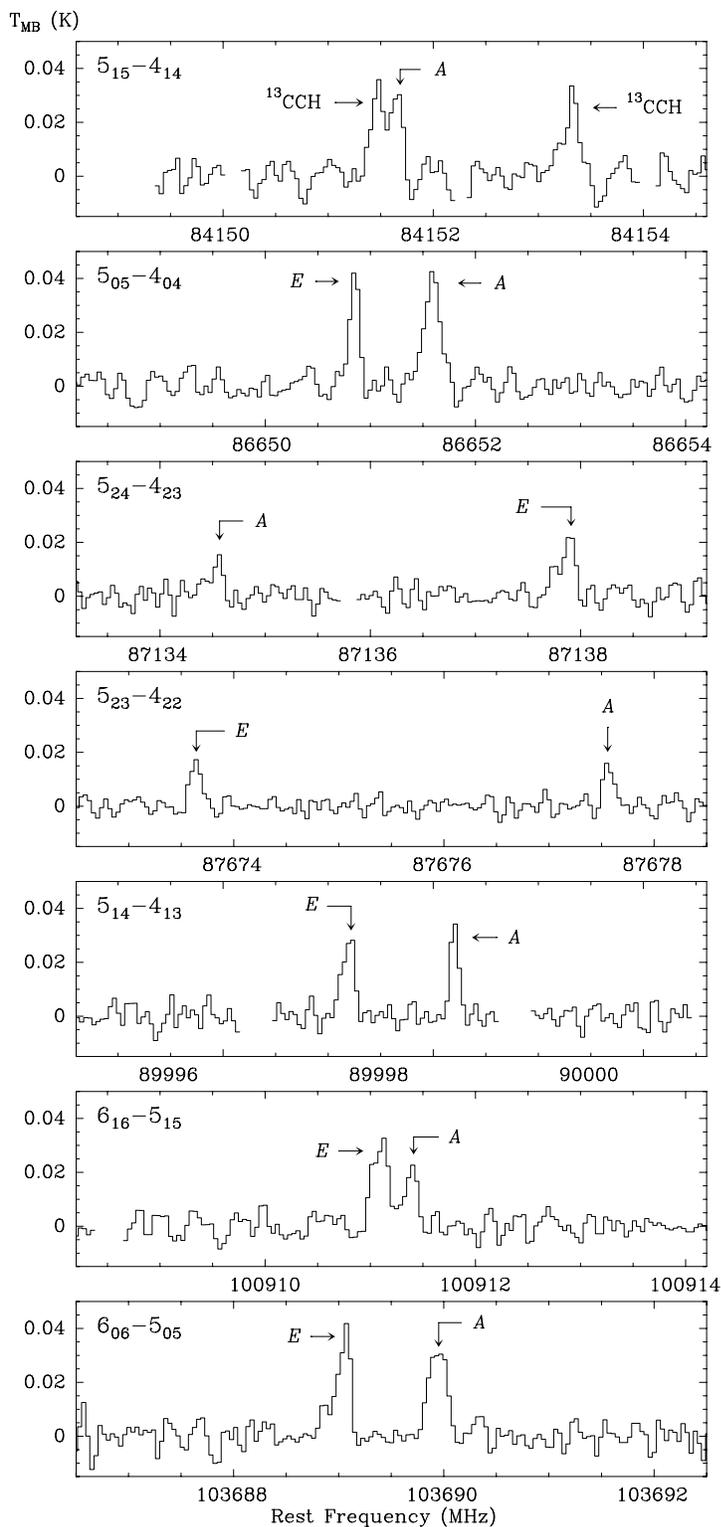


FIGURA 5.2: Transiciones observadas de las dos especies, A y E , del CH_2CHCH_3 . La frecuencia en reposo se ha obtenido para una velocidad $v_{\text{LSR}} = 5.6 \text{ km s}^{-1}$. Nótese en el panel superior, que para la transición $5_{15} - 4_{14}$ sólo se detectó la especie A (ver texto).

TABLA 5.2: Parámetros de línea para las transiciones observadas de CH₂CHCH₃, obtenidos a partir de ajustes gaussianos.

Frecuencia ^a (MHz)	Transición	E_{sup} (K)	$\mu^2 S$ (D ²)	$\int T_{MB} dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_{MB} (K)
Especie <i>A</i>							
84151.670	5 ₁₅ – 4 ₁₄	13.9	0.610	0.014 (4)	5.72	0.46	0.028 (4)
86651.566	5 ₀₅ – 4 ₀₄	12.5	0.635	0.027 (4)	5.52	0.62	0.041 (4)
87134.576	5 ₂₄ – 4 ₂₃	19.8	0.534	0.005 (2)	5.68	0.32	0.016 (3)
87677.584	5 ₂₃ – 4 ₂₂	19.8	0.534	0.007 (2)	5.65	0.41	0.017 (3)
89998.180	5 ₁₄ – 4 ₁₃	14.8	0.610	0.012 (2)	5.53	0.31	0.036 (3)
100911.394	6 ₁₆ – 5 ₁₅	18.8	0.741	0.010 (2)	5.62	0.43	0.022 (4)
103689.979	6 ₀₆ – 5 ₀₅	17.5	0.761	0.020 (2)	5.71	0.55	0.033 (4)
Especie <i>E</i>							
86650.873	5 ₀₅ – 4 ₀₄	12.5	0.635	0.017 (2)	5.68	0.35	0.044 (4)
87137.941	5 ₂₄ – 4 ₂₃	19.8	0.531	0.011 (2)	5.76	0.42	0.024 (3)
87673.663	5 ₂₃ – 4 ₂₂	19.8	0.531	0.008 (2)	5.68	0.42	0.018 (2)
89997.200	5 ₁₄ – 4 ₁₃	14.8	0.610	0.014 (2)	5.63	0.46	0.029 (3)
100911.141	6 ₁₆ – 5 ₁₅	18.8	0.741	0.018 (2)	5.72	0.56	0.031 (4)
103689.117	6 ₀₆ – 5 ₀₅	17.5	0.761	0.017 (2)	5.79	0.41	0.040 (4)

Nota. — Los números entre paréntesis muestran la incertidumbre a 1σ para la última cifra.

^a Las frecuencias de la especie *A* se han tomado del catálogo de Cernicharo et al. (2000), y las correspondientes a la especie *E* son las medidas en el laboratorio por Pearson et al. (1994).

5.3. Resultados

5.3.1. Identificación de las líneas

Durante el barrido espectral a 3 mm en TMC-1 (ver Capítulos 2 y 3), detectamos un par de líneas a 86.650 GHz con intensidades similares y separadas 3 km s⁻¹, en la dirección del pico de los cianopoliinos (CP) de esta nube. Al recurrir a los catálogos típicos para la identificación de líneas moleculares, no encontramos las frecuencias observadas de estas dos líneas ni en el catálogo de JPL (Pickett et al. 1998), ni en el CDMS (Müller et al. 2001, 2005). Utilizando el catálogo de líneas desarrollado y mantenido en el Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR-IEM-CSIC, Cernicharo et al. 2000), pudimos identificar de forma tentativa dichas líneas como un doblete (especies *A* y *E*) procedente de la transición (5₀₅ – 4₀₄) del propileno.

Animados por esta posible nueva detección, buscamos otras transiciones de esta molécula dentro del rango de frecuencias observado en el barrido espectral a 3 mm (85.9–93.1 GHz). El hecho de que las líneas deben aparecer como un doblete separado por unos 0.3–4 MHz, y con intensidades similares nos ayudó en dicha búsqueda. Utilizando el catálogo mencionado anteriormente, el cual sólo contiene predicciones completas para la especie *A*, junto con las frecuencias medidas en el laboratorio para la especie *E* (Pearson et al. 1994), identificamos otros tres dobletes a 87.1, 87.7, y 90.0 GHz a un nivel de 3–4 σ (ver Sección 2.5.24). Para poder confirmar de manera más fiable la detección del propileno, volvimos al telescopio de 30-m de IRAM en

Abril y Mayo de 2007 para reobservar estas líneas y para buscar otros tres dobletes adicionales fuera del rango de frecuencias observado en el barrido espectral, a 84.1, 100.9, y 103.7 GHz. Todas las líneas fueron detectadas, excepto la componente E de la transición a $5_{15} - 4_{14}$ a 84.1 GHz, para la cual la frecuencia no es conocida ya que no fue medida en el laboratorio por Pearson et al. (1994). Sin embargo, puesto que la separación en frecuencia de las dos componentes del doblete es pequeña, la línea correspondiente a la especie E podría encontrarse solapada con una de las componentes hiperfinas de la transición $N = 1 - 0$ del ^{13}CCH a 84151.5 MHz (ver panel superior de la Fig. 5.2). De hecho, esta componente hiperfina del ^{13}CCH tiene una fuerza de línea dos veces menor que la que se encuentra a 84153.4 MHz (que también se muestra en el panel superior de la Fig. 5.2). Por tanto, con un total de 13 líneas observadas, la primera detección del propileno en el medio interestelar está definitivamente confirmada en TMC-1.

Los parámetros de línea se obtuvieron a partir del ajuste a una gaussiana, utilizando el paquete GILDAS¹, y se muestran en la Tabla 5.2. Todas las líneas observadas se encuentran centradas alrededor de una velocidad sistemática de 5.6 km s^{-1} , la cual se encuentra en concordancia con la velocidad obtenida para otras especies en TMC-1 (ver Tabla ??, y Kaifu et al. 2004). Sin embargo, varias líneas muestran un segundo pico más débil a mayores velocidades, que puede ser el resultado de la emisión procedente de una componente diferente de la nube a 5.9 o 6.1 km s^{-1} (Peng et al. 1998; Dickens et al. 2001). La anchura de las líneas es de $0.3\text{--}0.6 \text{ km s}^{-1}$, siendo en algunos casos mayor que el valor esperado de $\sim 0.4 \text{ km s}^{-1}$ (Kaifu et al. 2004). Estas mayores anchuras también puede ser resultado de la emisión de otra componente de la nube.

5.3.2. Densidad de columna

Para obtener la densidad de columna de esta molécula y la temperatura rotacional de los niveles de energía, T_{rot} , construimos un diagrama rotacional (ver Apéndice A) en el que incluimos ambas especies (ver Figura 5.3). De este modo obtuvimos $T_{\text{rot}} = 9.5 \pm 2.0 \text{ K}$ y $N(A\text{-CH}_2\text{CHCH}_3) = N(E\text{-CH}_2\text{CHCH}_3) = (2.0 \pm 0.8) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, de manera que la densidad de columna total para el propileno es de $(4.0 \pm 1.5) \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. La temperatura rotacional obtenida es similar, dentro de los márgenes de error, a la encontrada para otras especies en TMC-1 (ver Tabla 3.1; Ohishi & Kaifu 1998; Fossé et al. 2001; Kalenskii et al. 2004). Sin embargo, la densidad de columna para el propileno es particularmente alta para una especie tan saturada y que contiene 9 átomos. Es similar a las observadas para el $c\text{-C}_3\text{H}_2$, y para el CH_3CCH , que también contiene el grupo metilo y posee un momento dipolar bastante pequeño (ver Tabla 5.1). Es importante destacar que algunas transiciones procentes de la especie E muestran una intensidad algo mayor que la especie A (ver Fig. 5.2 y Tabla 5.2), por tanto la densidad de columna para la especie E podría ser algo mayor. De hecho, realizando los diagramas rotacionales para cada especie por separado, la temperatura rotacional obtenida para la especie E , $T_{\text{rot}} = 12 \text{ K}$, es algo mayor que para la A , $T_{\text{rot}} = 8 \text{ K}$. Sin embargo, la densidad de columna obtenida de este modo no difiere mucho de la calculada con un solo diagrama rota-

¹<http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS>

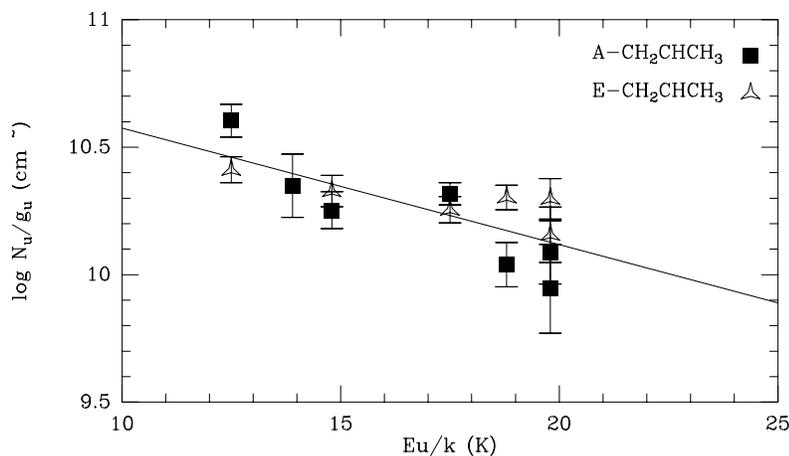


FIGURA 5.3: Diagrama rotacional incluyendo ambas especies, *A* y *E*, del propileno.

cional. De forma que, dentro de los errores experimentales, ambas especies tienen una abundancia similar.

5.4. Producción química del propileno

El propileno, un hidrocarburo relativamente simple, no había sido detectado hasta ahora porque aparentemente nadie lo ha considerado merecedor de una búsqueda directa, y también debido a su pequeño momento dipolar, 10 veces menor que el de otras moléculas con tres carbonos (ver Tabla 5.1). Previamente a esta detección, hemos buscado transiciones del propileno en el barrido espectral realizado en Orión a 1, 2, y 3 mm por Tercero & Cernicharo (en preparación). Con un límite de ruido de 50 mK, no se ha detectado ninguna de las líneas más intensas. Hemos comprobado las líneas no identificadas de otros barridos espectrales realizados en Orión y en el centro galáctico a diferentes frecuencias (Sutton et al. 1985; Cummins et al. 1986; Turner 1989; Schilke et al. 1997; Nummelin et al. 1998; Friedel et al. 2004), y también las líneas no identificadas encontradas en el barrido espectral de Kaifu et al. (2004) en TMC-1. Ninguna de estas líneas coincide con transiciones del propileno.

La abundancia del propileno relativa al H₂ en TMC-1 es 4×10^{-9} , asumiendo que $N(\text{H}_2) = 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ (Cernicharo & Guélin 1987). A pesar de ser un hidrocarburo bastante abundante, no ha sido considerado en los modelos de química para nubes oscuras. Las cadenas de reacciones utilizadas para modelizar la química interestelar son testeadas habitualmente comparando con las abundancias moleculares observadas en TMC-1 (Smith et al. 2004; Woodall et al. 2007). De modo que, se ha empleado un gran esfuerzo en explorar e incluir las reacciones que dan lugar a la formación de las moléculas observadas, cuyas abundancias son en general explicadas de forma satisfactoria, sin embargo la química de moléculas no observadas no está suficientemente explorada.

Hemos buscado en la bibliografía reacciones relevantes para la química del propileno y hemos realizado modelos químicos para investigar las vías de formación más probables. La síntesis de muchos hidrocarburos en las nubes oscuras implican

una serie de reacciones ión-molécula junto con la recombinación disociativa (RD) de un catión molecular y un electrón como último paso (Herbst & Leung 1989). Así, la RD del ión $C_3H_7^+$, el cual se sabe que se produce en la reacción $C_3H_6 + H$ con una fracción de producción de 0.42 (Ehlerding et al. 2003), puede ser un paso clave en la síntesis del propileno. Entonces, el problema para producir el propileno se traslada en cómo formar el ión $C_3H_7^+$. Las reacciones entre un ión y un hidrocarburo neutro, ya sean de condensación como $C_2H_4^+ + CH_4 \rightarrow C_3H_7^+ + H$, o asociaciones radiativas como $C_2H_3^+ + CH_4 \rightarrow C_3H_7^+ + h\nu$ y otras similares, o bien son endotérmicas, muy lentas, o tienden a producir otros productos diferentes al $C_3H_7^+$ (Anicich 2003). Una vía plausible podría ser la asociación radiativa de un ión hidrocarburo y el H_2 , que en general son procesos exotérmicos y, si son suficientemente rápidos, podrían producir hidrocarburos altamente saturados. Hemos comprobado que esto ocurre para $C_2H_2^+$ y otros iones hidrocarburo con dos, tres, cuatro y cinco átomos de carbono. Sin embargo, las velocidades de reacción correspondientes no se encuentran en la bibliografía y es posible que estas reacciones den lugar a otros productos. Introduciendo estas reacciones con unos valores realistas para la velocidad de reacción seguidas de recombinaciones disociativas, nos permite producir el propileno a niveles razonables.

El propileno también podría ser producido por RD de iones mayores que el $C_3H_7^+$. Experimentos recientes han demostrado que puede haber una fragmentación sustancial, con rotura de enlaces C-C, en la RD de iones hidrocarburo (Viggiano et al. 2005). Por ejemplo, los modelos químicos predicen una síntesis eficiente del ión $C_6H_7^+$ en nubes oscuras, el cual por RD se asume que produce benceno y C_6H_2 (ambos con una abundancia de $\sim 10^{-9}$; McEwan et al. 1999), aunque también puede producir fragmentos neutros más pequeños como el propileno. La síntesis del propileno a través de reacciones neutro-neutro como por ejemplo, $CH_3 + C_2H_4$ o $C_2H_3 + CH_4$ no es efectiva, puesto que estas reacciones son endotérmicas.

Por último, los hidrocarburos altamente saturados se producen de manera sencilla en la superficie de los granos por hidrogenación directa, aunque no está tan claro como estas especies producidas en los granos pueden llegar a la fase gaseosa bajo las condiciones de temperatura tan baja que existe en estas nubes frías. Una posibilidad sería recurrir a los choques para la eyección/evaporación de especies saturadas congeladas en la superficie de los granos (Markwick et al. 2000), o apelar a un aumento local de la velocidad de ionización cósmica, la cual tendría un efecto importante en el estado químico y evolutivo de TMC-1 (Hartquist et al. 2001). Sin embargo, la densidad de columna observada para el metanol no se ajusta a este escenario. Además, si este mecanismo se está produciendo en TMC-1, otras moléculas típicas de las regiones de formación estelar (como el CH_3OCH_3 , CH_3COOH , etc.) deberían detectarse también en TMC-1. Estudios recientes de mecanismos no térmicos de evaporación de los granos de polvo (Garrod et al. 2007), muestran que algunas moléculas formadas en la superficie de los granos podrían llegar a la fase gas. La presencia de hidrocarburos altamente saturados como el propileno en la fase gaseosa es una información importante para mejorar estos modelos.

5.5. Resumen y conclusiones

En este Capítulo se ha presentado la primera detección en el espacio de una especie altamente saturada como es el propileno (CH_2CHCH_3). Esta identificación y la gran abundancia observada en una nube oscura como TMC-1 es sorprendente debido a la baja temperatura que presentan estas regiones.

Se han discutido diferentes vías de formación posibles para el propileno, aunque ninguna de ellas lo produce de forma satisfactoria en fase gas. Algunas cadenas de carbono con un gran nivel de saturación pueden producirse de forma eficiente en la superficie de los granos de polvo, pero no está claro como estas especies pueden evaporarse/eyectarse a la fase gas en una nube fría y quiescente sin la presencia de choques, aunque existen otros posibles modelos no térmicos que no requieren procesos energéticos. Esta detección proporciona una información importante para mejorar estos modelos y para avanzar un poco más en la comprensión de la química y los procesos de formación de muchas especies en el medio interestelar. En cualquier caso, parece que la química de la fase gas no está considerando algunas reacciones importantes que impliquen pequeños hidrocarburos, los cuales podrían producir moléculas como el propileno con grandes abundancias. La detección del propileno sugiere que otros pequeños hidrocarburos, como el propano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$), podrían encontrarse en nubes oscuras.

Capítulo 6

Moléculas orgánicas complejas en nubes oscuras: L1448 y L183

6.1. Introducción

La interacción entre el gas y los granos de polvo existentes en el medio interestelar puede tener un gran impacto en su composición química, debido a los procesos de evaporación y/o la deposición de moléculas en los mantos de los granos. La abundancia en fase gas de aquellas moléculas que se considera que se forman de manera eficiente en los granos de polvo, como son el metanol (CH_3OH), el etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$), y el formaldehído (H_2CO), puede verse aumentada en varios órdenes de magnitud debido a la eyección/evaporación de estas moléculas desde los mantos de los granos.

Un aspecto interesante de la química en fase gas después de la expulsión de estas moléculas desde los granos, es la rápida conversión de estas moléculas de primera generación o “parentales” en especies de segunda generación o “moléculas hija”, a través de rápidas reacciones químicas producidas en el gas caliente. Por ejemplo, los modelos predicen que la abundancia relativa del dimetil éter ($(\text{CH}_3)_2\text{O}$) cambia en tres órdenes de magnitud en un corto periodo de tiempo después de la eyección de CH_3OH en la fase gas (Millar et al. 1991; Caselli et al. 1993; Charnley et al. 1995; Horn et al. 2004). Básicamente todos los modelos de química para los alcoholes indican que el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y el formato de metilo (HCOOCH_3) alcanzarán sus mayores abundancias en 10^4 – 10^5 años tras la aparición de CH_3OH en la fase gas. Sin embargo, Horn et al. (2004) han demostrado que la formación de HCOOCH_3 en fase gas a partir del CH_3OH es menos eficiente de lo que se consideraba en los modelos. Esto planteó algunas dudas sobre la producción del HCOOCH_3 , y se propuso que esta molécula se formaba en la superficie de los granos. La producción en fase gas y en granos del $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ ha sido estudiada por Peeters et al. (2006), y han demostrado que la principal vía para su formación es en fase gas, mientras que la producción en granos es una fuente menor en las abundancias observadas. Otras moléculas orgánicas como el ácido fórmico (HCOOH), se producen tanto en fase gas como en los granos de polvo (Liu et al. 2002).

Durante mucho tiempo se han observado grandes cantidades de moléculas orgánicas complejas (COMs, del inglés *Complex Organic Molecules*), como las menciona-

das arriba, en regiones del medio interestelar asociadas en su mayoría a la química de granos de polvo (Charnley et al. 1995; Horn et al. 2004). Estas regiones son por ejemplo, las nubes moleculares afectadas por choques en la región del centro Galáctico (CG) (Martín-Pintado et al. 1999; Requena-Torres et al. 2006), los núcleos calientes en regiones de formación de estrellas masivas (Ikeda et al. 2001; Bisschop et al. 2006), y núcleos calientes asociados con regiones de formación de estrellas poco masivas (Cazaux et al. 2003; Bottinelli et al. 2004, 2007). Los modelos químicos para las regiones de formación estelar masiva explican las abundancias de estas especies como el resultado de una serie de procesos secuenciales (Walmsley et al. 1992; Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993; Charnley 1995; Rodgers & Charnley 2001, 2003). En concreto, durante la fase fría previa al colapso ($T \sim 10$ K), en la superficie de los granos se forman moléculas simples por hidrogenación del CO y otros elementos pesados (p.ej., H_2CO , CH_3OH , y H_2S). Tras el encendido de la proto-estrella estas especies de primera generación se evaporan de los granos debido al aumento de temperatura y dan lugar a moléculas de segunda generación, más complejas, a través de rápidas reacciones neutro-neutro e ión-neutro. La comparación entre las abundancias de COMs en dichas fuentes ha demostrado que la química de estas moléculas en las nubes del CG y en los núcleos calientes masivos son muy similares, lo que sugiere la existencia de una composición química “universal” en las capas de los granos que al evaporarse es la responsable de las abundancias encontradas en estos objetos. Sin embargo en los núcleos calientes de estrellas poco masivas, estas especies muestran abundancias relativas diferentes de las encontradas en núcleos calientes masivos y las nubes del CG (Bottinelli et al. 2007). Esto indica que o bien la composición de las capas de los granos es diferente en las nubes oscuras que en los núcleos calientes y en el CG, o que los procesos de formación estelar cambian localmente las abundancias en la fase gas de COMs en las nubes oscuras (Garrod & Herbst 2006).

En las nubes oscuras que no presentan signos de formación estelar activa, las abundancias de COMs en fase gaseosa no debería estar influenciada por la evaporación/eyección de moléculas complejas desde los granos de polvo, y deberían ser reflejo únicamente de la química en fase gaseosa (Irvine et al. 1987; Hasegawa & Herbst 1993a,b). Además, observaciones recientes de moléculas en fase sólida en nubes oscuras ha demostrado la existencia de algunas de estas especies en las capas de los granos de polvo (Knez et al. 2005). Sin embargo, las nubes oscuras que poseen flujos de materia muy jóvenes deben mostrar las abundancias de COMs recién eyectadas de los granos por el efecto de los choques. Por tanto, las nubes oscuras ofrecen la posibilidad única de estudiar la formación de moléculas complejas en el medio interestelar. En este capítulo se presentan los resultados obtenidos a partir de observaciones de alta sensibilidad de COMs en las nubes oscuras L183 y L1448 (Requena-Torres et al. 2007). A continuación se describen las fuentes observadas (Sección 6.2) y las observaciones (Sección 6.3). En la Sección 6.4 se presentan los resultados, que se discuten en la Sección 6.5, donde se comparan las abundancias encontradas en estas dos nubes con las que existen en regiones de formación estelar o en el CG, y se discuten las implicaciones de la no detección de alguna de estas especies. Por último, la Sección 6.6, recoge las conclusiones principales de este capítulo.

6.2. Fuentes

6.2.1. L183

L183 es una nube oscura fría y quiescente sin signos de actividad de formación estelar y que presenta una química rica en oxígeno dominada por reacciones en fase gas. Para una descripción detallada de esta fuente ver la Sección 2.2.3.

En esta nube se ha observado anteriormente CH_3OH , con una densidad de columna para el metanol $\sim 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, que corresponde a una abundancia de 10^{-9} (Friberg et al. 1988). Estos autores obtuvieron también un límite a la densidad de columna para el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ de $4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Los límites superiores que obtuvieron para las abundancias relativas entre COMs concuerdan con las observadas para las nubes moleculares del CG y en núcleos calientes masivos (Requena-Torres et al. 2006).

6.2.2. L1448

L1448 es una nube oscura que se encuentra dentro del complejo molecular de Perseo, a 1° al suroeste de la región de formación estelar de NGC1333. A partir de mapas en NH_3 (1, 1) y (2, 2), Bachiller & Cernicharo (1986) obtuvieron una masa total en la condensación de $50 M_\odot$, una temperatura cinética $T_{\text{kin}} = 12 \pm 1$ K, y una densidad de H_2 de unos pocos 10^4 cm^{-3} . Esta nube se encuentra en las primeras fases de la formación de una o varias estrellas de baja masa, como demuestra la presencia de un flujo molecular extremadamente joven, L1448–mm, y de tres fuentes infrarrojas detectadas por el satélite *IRAS*. La Figura 6.1 muestra la emisión en la transición $J = 2 - 1$ de CO (Bachiller et al. 1990a) donde se muestra el flujo bipolar en toda su extensión y también las posiciones de la fuente central, L1448–mm y de la posición L1448–IRS. El flujo en L1448 es un flujo muy joven con una edad dinámica de tan sólo ~ 3500 años (Bachiller et al. 1990a). Dada su juventud, este objeto proporciona un laboratorio excelente para estudiar el origen de algunas moléculas en cuya formación juegan un papel importante la química de choques y las reacciones en fase gas de especies evaporadas de los granos, ya que su edad es tan corta que el gas tras la interacción con el choque aún no ha alcanzado el equilibrio (Chièze, Pineau des Forêts & Flower 1998).

En esta fuente se presentan tres componentes de velocidad que corresponderían al gas quiescente (4.7 km s^{-1}), el precursor magnético de los choques de tipo C (5.2 km s^{-1}) y el gas afectado por el choque (alas anchas de velocidad; Jiménez-Serra et al. 2004, 2005). El aumento de las abundancias de SiO y CH_3OH en el precursor del choque (de más de 5 órdenes de magnitud para el SiO) sugiere que estas moléculas han sido eyectadas recientemente de los granos y que la contribución de las reacciones químicas en fase gas posteriores a la evaporación no es importante.

6.3. Observaciones

Las observaciones fueron realizadas utilizando el radio telescopio de 30-m de IRAM en Pico Veleta (Granada), en dos sesiones diferentes en 2005. La Tabla 6.1 muestra las transiciones observadas en L183 y en dos posiciones en la dirección de

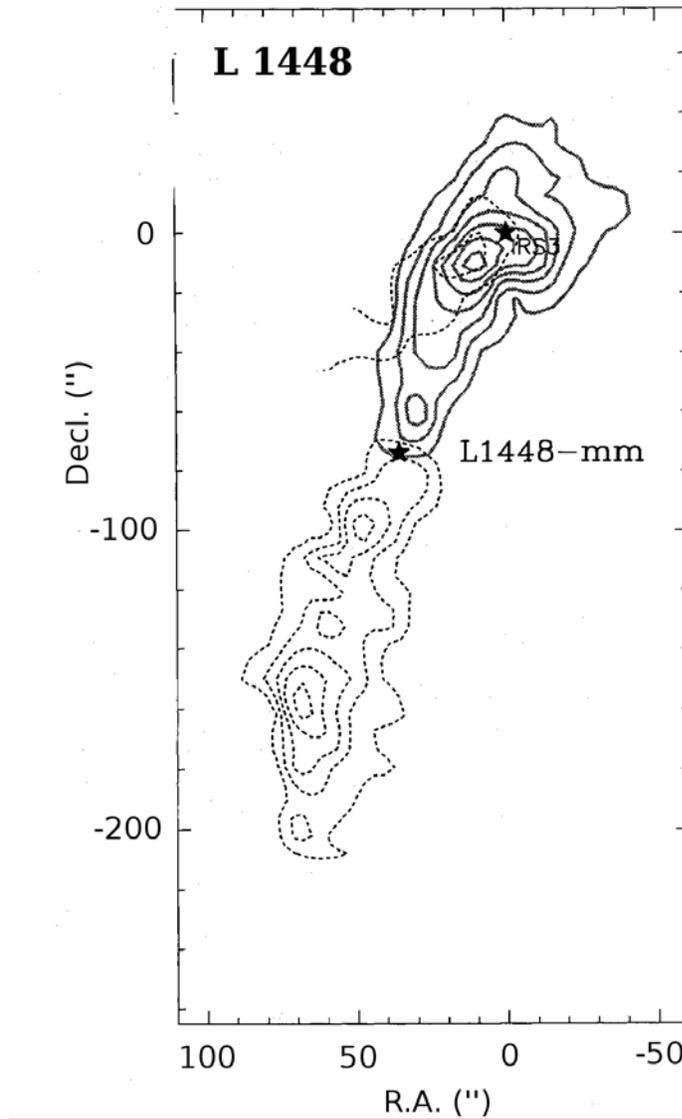


FIGURA 6.1: Mapa de la emisión integrada de CO $J = 2 - 1$ en la región de L1448 (extraído de Bachiller et al. 1990a). Los contornos en línea continua muestran la emisión desplazada al azul (desde -55 km s^{-1} a 0 km s^{-1}), y los contornos discontinuos se refieren a la emisión desplazada al rojo (desde 10 km s^{-1} a 65 km s^{-1}). El primer contorno y el intervalo entre ellos se corresponde a 10 K km s^{-1} . Las estrellas marcan las posiciones de la fuente infrarroja IRS3, y la de la fuente excitante del flujo principal, L1448-mm.

L1448. La anchura del haz principal del telescopio es de $\sim 24''$, $17''$ y $12''$ para las bandas de 3, 2 y 1.3 mm, respectivamente.

Los receptores, equipados con mezcladores SIS, fueron sintonizados en simple banda con una atenuación de la banda imagen de ≥ 10 dB. Para las observaciones de L1448-mm se utilizaron los modos de conmutación en frecuencia y del secundario, con unos valores para el cambio en frecuencia y posición de 7.2 MHz y $240''$, respectivamente. La resolución espectral utilizada fue de 40 kHz, que se corresponde con unas resoluciones de velocidad de ~ 0.14 , 0.08, y 0.05 km s^{-1} a las frecuencias observadas. Para L183 se utilizó el modo de conmutación en frecuencia, y la misma resolución utilizada para L1448 para las líneas a 2 y 3 mm, pero una resolución de 80 kHz para las de 1.3 mm (0.09 km s^{-1} de resolución en velocidad). Las temperaturas de sistema fueron típicamente de 100 y 650 K para los receptores de 3 y 1 mm, respectivamente. Los espectros fueron calibrados utilizando el sistema de carga dual (caliente/fría) standard. La intensidad de las líneas viene dada en unidades de temperatura de antena (T_A^*).

TABLA 6.1: Transiciones observadas en L183 y L1448.

Especie	Transición	ν (MHz)	E_u (K)
HCO ⁺	1 \rightarrow 0	89187.41	4.29
H ¹³ CO ⁺	1 \rightarrow 0	86754.33	4.17
HN ¹³ C	1 \rightarrow 0	87090.85	4.20
C ₂ H ₅ OH	4 ₁₄ \rightarrow 3 ₀₃	90117.61	9.36
SiO	2 \rightarrow 1, $v = 0$	86846.96	6.26
HCOOCH ₃	7 ₂₅ \rightarrow 6 ₂₄ E	90145.69	19.69
	7 ₂₅ \rightarrow 6 ₂₄ A	90156.48	19.67
HCOOH	4 ₀₄ \rightarrow 3 ₀₃	89579.17	13.57
	4 ₂₂ \rightarrow 3 ₂₁	90164.63	23.53
H ₂ CO	3 ₁₃ \rightarrow 2 ₁₂	211211.47	32.07
	3 ₀₃ \rightarrow 2 ₀₂	218222.19	20.97
CH ₃ OH	2 ₋₁ \rightarrow 1 ₋₁ E	96739.39	12.55
	2 ₀ \rightarrow 1 ₀ A ⁺	96741.42	6.97
	2 ₀ \rightarrow 1 ₀ E	96744.58	20.10
	3 ₀ \rightarrow 2 ₀ E	145093.75	27.06
	3 ₋₁ \rightarrow 2 ₋₁ E	145097.47	19.52
	3 ₀ \rightarrow 2 ₀ A ⁺	145103.23	13.94
	5 ₀ \rightarrow 4 ₀ E	241700.22	47.95
	5 ₋₁ \rightarrow 4 ₋₁ E	241767.22	40.41
	5 ₀ \rightarrow 4 ₀ A ⁺	241791.43	34.83

Nota. – Los números cuánticos y las frecuencias se tomaron del catálogo JPL (Pickett et al. 1998). L183 fue observada en la posición α [J2000]= $15^{\text{h}}54^{\text{m}}08^{\text{s}}.6$, δ [J2000]= $-02^{\circ}52'10''00$; y L1448 en dos posiciones diferentes, ($0''$, $-20''$) y ($-30''$, $+74''$), relativas a la posición de L1448-mm (α [J2000]= $03^{\text{h}}25^{\text{m}}38^{\text{s}}$, δ [J2000]= $30^{\circ}33'05''$).

6.4. Resultados

6.4.1. Descripción

La Tabla 6.2 muestra los parámetros de línea obtenidos a partir de ajustes gaussianos, y la Figura 6.2 los espectros observados. En el panel izquierdo se muestran los perfiles de línea observados en L183 y, en los paneles central y derecho, los perfiles observados en L1448 en las posiciones $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (0'', -20'')$ y $(-30'', +74'')$ respectivamente. Las líneas discontinuas verticales indican el gas quiescente en L183 a 2.5 km s^{-1} , y las componentes del gas quiescente y del precursor del choque en L1448 $(0'', -20'')$ a 4.8 y $5.2\text{--}5.5 \text{ km s}^{-1}$. Para la posición $(-30'', +74'')$ en L1448, la emisión de la componente correspondiente al flujo está centrada a 4.6 km s^{-1} (línea vertical en el panel derecho de la Figura 6.2) y la del precursor del choque, trazada por la emisión estrecha de SiO, está solapada con el gas quiescente. En L1448 $(0'', -20'')$, también se han detectado alas de alta velocidad desplazadas al rojo en las líneas de CH_3OH (a 2 mm) y de SiO, que son especies asociadas al gas afectado por el choque. Las alas de alta velocidad radial en la transición a 1 mm de CH_3OH son muy inciertas debido a que la línea de base no es muy buena en las observaciones de *frequency switching* para frecuencias altas.

La emisión de SiO, al tratarse de un trazador de choques, sólo fue detectada en las componentes correspondientes al precursor y al gas chocado en L1448–mm pero no en el gas quiescente de L183 y L1448–mm. El metanol fue detectado en todas las fuentes y para todas las componentes de velocidades. La emisión de H_2CO se detectó en todas las fuentes pero en L1448–mm los perfiles de línea son diferentes a los de otras moléculas. En la posición $(0'', -20'')$ de L1448 la emisión de H_2CO procede de las componentes quiescente y del precursor, como sucede en el caso de H_2S (Jiménez-Serra et al. 2005). En la posición $(-30'', +74'')$ también hemos encontrado un perfil ancho para el formaldehído, indicando la presencia de gas afectado por el paso del choque. El ácido fórmico (HCOOH) ha sido únicamente detectado en L183, y las moléculas más complejas como $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 , no han sido detectadas en ninguna de las fuentes.

6.4.2. Densidades de columna y abundancias

Para obtener las columnas de densidad se utilizó la aproximación de Equilibrio Termodinámico Local (ETL), y las temperaturas de excitación rotacionales (T_{rot}) obtenidas a partir de los diagramas de población del CH_3OH . Se obtuvieron T_{rot} entre $5\text{--}10 \text{ K}$, que son valores típicos para nubes oscuras con densidades de unos pocos 10^5 cm^{-3} y temperaturas cinéticas de $10\text{--}20 \text{ K}$ (Dickens et al. 2000; Curiel et al. 1999). La columna de densidad de H_2 fue estimada a partir de las columnas de densidad de HCO^+ , H^{13}CO^+ y HN^{13}C y asumiendo una razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 90 y unas abundancias HCO^+/H_2 y HNC/H_2 de $1 \cdot 10^{-8}$ para L1448 (Irvine et al. 1987); y una razón $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 64 y unas abundancias HCO^+/H_2 y HNC/H_2 de $8 \cdot 10^{-9}$ para L183 (Dickens et al. 2000). La Tabla 6.3 muestra las columnas de densidad de hidrógeno molecular y las abundancias moleculares relativas para SiO y CH_3OH , en las diferentes componentes de velocidad. Esta Tabla también contiene las abundancias de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 , HCOOH y H_2CO relativas al metanol.

TABLA 6.2: Parámetros de línea obtenidos de ajustes gaussianos.

Especie y transición	L1448 ($0''$, $-20''$)-q ^a			L1448 ($0''$, $-20''$)-p ^a			L1448 ($-30''$, $+74''$)			L183		
	T_A^* (K)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_A^* (K)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_A^* (K)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_A^* (K)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
CH ₃ OH (2 ₋₁ - 1 ₋₁) E	0.28(2) ^b	4.7(2)	0.5(3)	0.40(2)	5.4(1)	0.7(4)	1.17(7)	4.57(3)	0.43(7)	1.10(2)	2.51(3)	0.45(8)
CH ₃ OH (2 ₀ - 1 ₀) A ⁺	0.40(2)	4.75(5)	0.4(1)	0.61(2)	5.42(5)	0.7(1)	1.36(9)	4.59(2)	0.54(5)	1.36(2)	2.56(3)	0.48(6)
CH ₃ OH (2 ₀ - 1 ₀) E							0.33(3)	4.6(1)	0.6(3)	0.140(5)	2.5(2)	0.4(4)
CH ₃ OH (3 ₀ - 2 ₀) E	0.09(2)	4.38(6)	0.5(1)	0.13(2)	5.62(6)	1.10(5)						
CH ₃ OH (3 ₋₁ - 2 ₋₁) E	0.22(2)	4.69(2)	0.40(4)	0.40(2)	5.48(1)	0.65(4)						
CH ₃ OH (3 ₀ - 2 ₀) A ⁺	0.26(2)	4.7(2)	0.4(2)	0.46(2)	5.5(2)	0.9(2)						
CH ₃ OH (5 ₀ - 4 ₀) E												
CH ₃ OH (5 ₋₁ - 4 ₋₁) E												
CH ₃ OH (5 ₀ - 4 ₀) A ⁺												
C ₂ H ₅ OH (4 ₁₄ - 3 ₀₃)	≤0.036			≤0.036			≤0.048			≤0.03		
HCOOCH ₃ (7 ₂₅ - 6 ₂₄)	≤0.036			≤0.036			≤0.048			0.068(6)		
H ¹³ CO ⁺ (1 - 0)	0.482(5)	4.919(5)	0.86(1)	0.819(1)	5.570(3)	0.770(6)	2.66(9)	4.68(2)	1.20(5)	0.67(2)	2.57(1)	0.54(2)
SiO (2 - 1, v = 0)	≤0.011			0.146(6)	5.28(2)	0.61(6)	0.31(1)	4.49(1)	0.40(3)	≤0.018		
HN ¹³ C (1 - 0)	0.43(2)	4.731(3)	0.647(7)	0.73(2)	5.478(2)	0.844(5)	1.09(4)	4.646(8)	1.16(2)	0.89(7)	2.49(2)	0.56(6)
HCOOH (4 ₀₄ - 3 ₀₃)	≤0.036			≤0.036			≤0.048			0.048(3)	2.48(3)	0.43(4)
HCOOH (4 ₂₂ - 3 ₂₁)										≤0.015		
H ₂ CO (3 ₁₃ - 2 ₁₂)				0.28(5)	5.05(7)	0.5(2)	1.0(1)	4.67(5)	1.66(5)	0.259(7)	2.431(5)	0.77(1)
H ₂ CO (3 ₀₃ - 2 ₀₂)	≤0.027			0.44(5)	5.75(5)	0.7(1)	1.1(1)	5.13(5)	1.41(5)			

Nota. - Parámetros observados para las diferentes fuentes y transiciones. Los espacios en blanco indican que la línea no fue observada. El error, entre paréntesis, se aplica sobre el último decimal.

^a q por quiescente y p por precursor

^b para líneas no detectadas se muestra la temperatura de 3σ sobre el ruido.

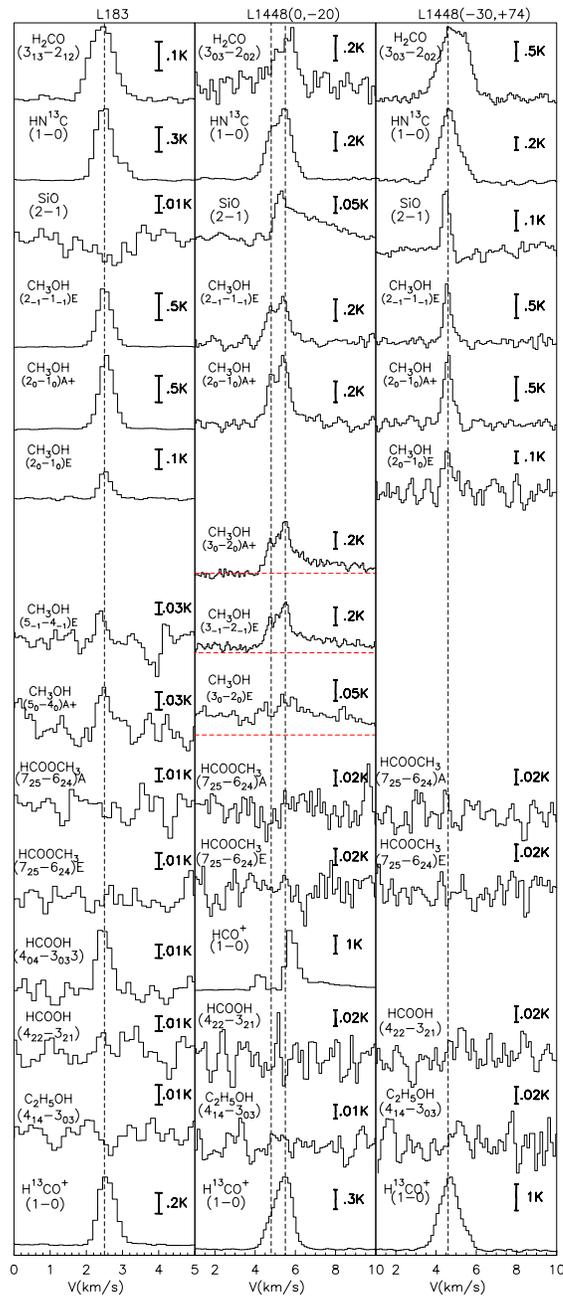


FIGURA 6.2: Perfiles de las líneas observadas en L1448 y L183. Las líneas discontinuas verticales muestran las velocidades de cada componente del gas en las diferentes etapas del choque. L183 (panel izquierdo) muestra únicamente una componente centrada a 2.5 km s^{-1} . Los perfiles para L1448 ($0'', -20''$), en el panel central, y para L1448 ($-30'', +74''$), en el panel derecho, muestran componentes en velocidad que corresponden a la nube en reposo a 4.8 km s^{-1} y 4.6 km s^{-1} , respectivamente. La posición L1448 ($0'', -20''$) muestra también un precursor a 5.5 km s^{-1} y, a velocidades mayores, la emisión asociada al gas chocado para las transiciones de 2 mm de CH_3OH ($3_0 - 2_0$) A+ y ($3_{-1} - 2_{-1}$) E.

TABLA 6.3: Columna de densidad de H₂, temperatura y abundancias de las diferentes COMs relativas al H₂ y al CH₃OH.

Fuente ^a	T _{ex} (K)	N(H ₂) 10 ²² cm ⁻²	X _{SiO} 10 ⁻¹²	X _{CH₃OH} 10 ⁻⁹	$\frac{C_2H_5OH}{CH_3OH}$ 10 ⁻²	$\frac{HCOCH_3}{CH_3OH}$ 10 ⁻²	$\frac{HCOOH}{CH_3OH}$ 10 ⁻²	$\frac{H_2CO}{CH_3OH}$ 10 ⁻²
L183-q	5.7	0.4	≤4	18.4	≤0.4	≤3	1.3	12.8
L1448 (0,-20)-q	8.9	1.2	≤2	1.4	≤4	≤15	≤9	≤0.1
L1448 (0,-20)-p	9.8	1.2	29.1	3.9	≤3	≤9	≤5	2.2
L1448 (-30,+74)-q+p	9.3	3.7	12.5	2.2	≤1	≤5	≤3	15.0
L1448 (0,-20)-c								
6-8 km s ⁻¹	15	2.1 10 ⁻³	2.3 10 ⁴	1.5 10 ³	≤7	≤17	≤9	≤0.2
8-10 km s ⁻¹	15	7.4 10 ⁻⁴	1.4 10 ⁴	2.8 10 ³	≤11	≤25	≤13	≤0.3
10-12 km s ⁻¹	15	4.8 10 ⁻⁴	≤1.2 10 ⁴	2.7 10 ³	≤17	≤40	≤21	≤0.4
12-14 km s ⁻¹	15	3.2 10 ⁻⁴	≤1.8 10 ⁴	2.6 10 ³	≤27	≤63	≤33	≤0.7
14-16 km s ⁻¹	15	2.9 10 ⁻⁴	≤3.2 10 ⁴	3.4 10 ³	≤45	≤76	≤35	≤0.9
Barnard 1 ^b					≤0.3	11.7	2.5	
L1544								
TMC-1(CP)					≤1.6	≤12.9	≤2.3	
Fuentes CG ^c					~3.7	~3.9	~0.8	~1.1
Hot Cores ^d					~2.5	~6.9	~0.02*	~16.0
Hot Corinos ^e						~160	~60	~190

^a q por quiescente, p por precursor, y c por la componente del gas tras el choque

^b fuentes observadas en el barrido espectral a 3 mm

^c Requena-Torres et al. (2006)

^d Bisschop et al. (2006)

^e Bottinelli et al. (2007)

* Se ha asumido que se encuentra relacionado a un gas más frío que el resto de moléculas complejas.

Como es de esperar para el gas quiescente en L1448 ($0''$, $-20''$) y en L183, la abundancia de SiO relativa al H_2 es muy pequeña, ($< 2 \cdot 10^{-12}$), lo que sugiere que el SiO se encuentra almacenado en los granos de polvo (Ziurys et al. 1989b; Martín-Pintado et al. 1992). Esto contrasta con las abundancias de CH_3OH y H_2CO en el gas quiescente, las cuales varían en más de uno y dos órdenes de magnitud respectivamente entre L1448-mm y L183. Para las especies complejas restantes hemos obtenido límites superiores a las abundancias similares para el gas quiescente en ambas fuentes.

Al igual que lo obtenido en Jiménez-Serra et al. (2005), hemos encontrado un incremento moderado (en un factor 3) en la abundancia del metanol y un gran incremento de un factor >15 en la abundancia del SiO para el precursor del choque (L1448 ($0''$, $-20''$)-p), con respecto a las observadas en el gas quiescente. También hemos encontrado un gran incremento de más de un orden de magnitud en la abundancia de H_2CO para el precursor del choque en ambas posiciones de L1448-mm, como es de esperar si esta molécula, al igual que el SiO y el CH_3OH , es eyectada de los mantos de los granos. Los límites superiores a las abundancias de las otras COMs son similares a las encontradas en el gas quiescente, lo que sugiere que las abundancias de esas moléculas no han sido afectadas apreciablemente por la eyección/evaporación desde los granos.

Las abundancias de SiO y de CH_3OH en el gas chocado [fuente L1448 ($0''$, $-20''$)-c en la Tabla 6.3], han aumentado cerca de 4 órdenes de magnitud con respecto a las del gas quiescente debido a la evaporación de dichas moléculas desde los granos. Sorprendentemente, la razón de abundancia de H_2CO respecto a CH_3OH disminuye en más de un orden de magnitud en el gas afectado por el paso del choque comparado con la obtenida en la componente del precursor del choque. Estos datos sugieren que la abundancia de H_2CO en los mantos de los granos es menor que la de CH_3OH . Sin embargo, los límites superiores obtenidos para las razones de abundancias de C_2H_5OH , $HCOOCH_3$ y $HCOOH$ respecto a la de CH_3OH en el gas chocado son pequeñas comparadas con las obtenidas en los núcleos calientes de estrellas poco masivas, aunque son consistentes con las medidas en núcleos calientes masivos y en las nubes del CG.

En la Tabla 6.3 también se muestran los resultados procedentes del barrido espectral a 3 mm (Capítulos 2 y 3). Excepto en al caso de B1, en la que detectamos $HCOOH$ y $HCOOCH_3$, el resto se refiere a límites superiores a la abundancia. En este caso, las razones de abundancia obtenidas en B1 y los límites superiores son también consistentes con los valores en las nubes del CG y en los "hot cores". La diferencia más significativa es la detección de $HCOOCH_3$ en B1, la cual aún no muestra signos evidentes de formación estelar activa, mientras que en L1448-mm no se detecta en ninguna de las componentes de velocidad relacionadas con el choque (ver también Sección 3.3.5).

6.5. Discusión

Las abundancias de SiO y de COMs que hemos obtenido en L183 y L1448-mm, dos nubes oscuras con diferente actividad de formación estelar, muestran una tendencia clara. El gas quiescente en ambas fuentes contiene una abundancia muy

pequeña de SiO ($<10^{-12}$), como es de esperar si la complejidad química de la fase gas no se hubiera visto afectada de forma significativa por la evaporación de moléculas desde los granos de polvo (Martín-Pintado et al. 1992). Entonces, los modelos de química en fase gaseosa deberían explicar las abundancias observadas. Los modelos de química para la formación de COMs en nubes oscuras (Hasegawa et al. 1992; Hasegawa & Herbst 1993a,b), predicen abundancias relativas de $\sim 10^{-9}$ para el CH_3OH , $10^{-9} - 10^{-10}$ (dependiendo de la abundancia metálica¹ inicial) para el HCOOH , de $10^{-7} - 10^{-8}$ para H_2CO y de 10^{-12} para $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 . Las abundancias medidas y los límites superiores en el gas quiescente en L1448–mm son consistentes con las predicciones de los modelos, excepto para el H_2CO que muestra una abundancia inferior a la esperada por los modelos. Esa pequeña abundancia de H_2CO (10^{-10}) se ha encontrado también en la envoltura de la posición central en L1448–mm, relacionada posiblemente con la reducción del CO en la fase gas (ver Maret et al. 2005). En el caso de L183, hemos encontrado discrepancias de hasta un orden de magnitud entre las abundancias predichas y las medidas para CH_3OH , HCOOH y H_2CO en el gas quiescente. Sin embargo, las razones entre abundancias si son consistentes con los modelos y sólo H_2CO presenta un comportamiento diferente como en L1448–mm. Las abundancias de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 , al igual que ocurre en L1448–mm, también son consistentes con los modelos. Podemos concluir que, excepto en el caso del H_2CO y dentro de un orden de magnitud, la abundancia observada de COMs en las nubes oscuras quiescentes son consistentes con los modelos de química en fase gas. Sin embargo, estos modelos de la química en nubes oscuras han de ser revisados, ya que Geppert et al. (2005) han predicho que la formación de CH_3OH en la fase gas es menor que la asumida hasta ahora, y esta molécula no puede producirse de manera eficiente en la fase gas. Además se ha observado la posibilidad de que muchas de las COMs en nubes oscuras se formen en los granos (Knez et al. 2005).

La abundancia de SiO en la posición de L1448 ($0''$, $-20''$), la correspondiente al precursor del choque (5.2 km s^{-1}), aumenta en más de un orden de magnitud debido a la evaporación de SiO o Si de los mantos de los granos producida por la repentina aceleración de los iones respecto a los neutros con la propagación del choque tipo-C a través de la nube molecular quiescente (Jiménez-Serra et al. 2004). La abundancia de H_2CO en esta componente también se ve incrementada en más de un factor 10. Un incremento menor, de sólo ~ 3 , se observa en CH_3OH . Los límites superiores a las abundancias de HCOOH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 en el precursor del choque indican que estas moléculas no son expulsadas de los granos en las primeras etapas de la interacción con el choque. Se observa un moderado aumento en la abundancia de CH_3OH para el gas quiescente y el precursor en L1448 ($-30''$, $+74''$), junto con un gran incremento en las abundancias de SiO y H_2CO , mientras que para el resto de COMs no se observa ningún cambio significativo. La tendencia observada en la abundancia de algunas moléculas en el precursor es incluso más drástica para la componente del gas tras el choque. Mientras que las abundancias de SiO y CH_3OH aumentan en 4 y 3 ordenes de magnitud respectivamente en el gas chocado, la razón de abundancias para el resto de COMs (incluyendo H_2CO) relativas a la del CH_3OH se mantienen similares a las observadas en el gas quiescente.

¹En astronomía, todos los elementos con excepción de H y He se suelen denominar “metales”

Para comparar los resultados obtenidos, la Tabla 6.3 muestra también las razones entre la abundancias de COMs relativas a CH_3OH para los diferentes tipos de objetos donde estas moléculas han sido detectadas: núcleos calientes en regiones de formación estelar masiva y poco masiva, y en las nubes moleculares del CG. Las razones de abundancia $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$ y $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ en el CG y en los núcleos calientes masivos sugiere una composición similar en las capas de los granos de estos dos objetos.

Los límites superiores observados de las abundancias relativas de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 respecto a la de CH_3OH en el gas quiescente y en el chocado, son consistentes con los observados en núcleos calientes masivos y en las nubes del CG y por tanto, compatibles con una composición en los granos similar en todos los objetos. Sin embargo, las grandes abundancias de COMs observadas en los núcleos calientes asociados a estrellas poco masivas, excede en más de un orden de magnitud las del gas después de la interacción con el choque en L1448–mm. Esto sugiere que este incremento de las abundancias en fase gas de las COMs, o bien se encuentra restringida al material envolvente afectado por el proceso que lleva a la formación de estrellas poco masivas, o existe un cambio drástico en la composición de los granos entre diferentes tipos de nubes.

Recientemente, se ha comenzado a probar nuevos modelos de química que expliquen las abundancias de COMs observadas. Charnley & Rodgers (2005) han propuesto algunas vías para la formación de largas moléculas complejas en los mantos de los granos. Garrod & Herbst (2006) han propuesto que en la fase de “encendido” protoestelar, el calentamiento del gas y el polvo circunestelar podría dar lugar a una química en la superficie de los granos muy efectiva y a la formación en fase gas de COMs. Aunque estos modelos no son capaces de reproducir la elevada razón de abundancia $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ en los núcleos calientes poco masivos, nos sugieren que los cambios locales asociados con el proceso de formación estelar pueden producir importantes variaciones en las abundancias relativas. Sin embargo, las grandes abundancias observadas de COMs en las nubes del CG no pueden explicarse de la misma manera, ya que la formación estelar no juega un papel importante a gran escala. Además, las reacciones en la superficie de los granos no son tan efectivas debido a las temperaturas relativamente bajas en la mayor parte de los granos (<15 K, Rodríguez-Fernández et al. 2004).

6.6. Resumen y conclusiones

En este capítulo se han presentado las observaciones de moléculas complejas, realizadas en dos nubes oscuras que se encuentran en diferente estado de evolución hacia la formación de estrellas. Podemos concluir que:

- Las abundancias de muchas COMs aumentan en el gas precursor del choque y también en el gas chocado.
- Los límites superiores de las abundancias de COMs en estas nubes son consistentes con las observadas en las nubes moleculares del CG y en los núcleos calientes asociados a formación de estrellas masivas.

- Las grandes abundancias que se observan en los núcleos calientes de estrellas poco masivas pueden ser reproducidas considerando cambios locales de la química en la región más cercana a la proto-estrella.

Por tanto, las pequeñas razones entre abundancias de COMs encontradas en estas dos nubes oscuras, corroboran el escenario propuesto por Maret et al. (2005), donde las abundancias crecen localmente en el material circunestelar. Sin embargo, el grueso del material quiescente puede tener la misma composición en las capas de los granos que la observada en las nubes del CG y en núcleos calientes masivos, lo que parece sugerir una especie de composición “universal” en las capas de los granos, como ha sido propuesto por Requena-Torres et al. (2006). Futuras medidas de alta sensibilidad y resolución de las abundancias de COMs en la fuente que produce el flujo en L1448–mm y en B1 (única fuente del barrido a 3 mm donde se ha detectado HCOOCH_3), ayudaría a esclarecer si las altas abundancias de alguna de las COMs observadas en núcleos calientes poco masivos son un efecto local asociado con la formación estelar.

Capítulo 7

Conclusiones y perspectivas

7.1. Conclusiones

En este trabajo se ha presentado el primer barrido espectral a 3 mm de varias nubes oscuras, posibles lugares de formación de estrellas de baja masa y sistemas planetarios. A continuación se enumeran los principales resultados obtenidos de este estudio.

- Dentro de los 7 GHz observados en este barrido espectral, se han detectado 20 moléculas diferentes y 17 especies isotópicas, además de varias líneas no identificadas. Las fuentes que presentan mayor densidad de líneas son TMC-1 y L1544 (unas 10 líneas/GHz), mientras que L183 es la fuente donde menos líneas hemos detectado (7.7 líneas/GHz). La cuarta fuente estudiada, B1 (9.4 líneas/GHz), presenta en general las mayores intensidades de línea observadas. El número de líneas y moléculas detectadas muestran, teniendo en cuenta el pequeño rango espectral cubierto en este barrido, la riqueza química de estas fuentes, habiendo detectado en este trabajo especies complejas de hasta 9 átomos.
- En todas las fuentes se han encontrado líneas rotacionales muy delgadas, con anchuras del orden de $< 1 \text{ km s}^{-1}$, típicas de las nubes oscuras quiescentes. Sin embargo una de ellas, B1, presenta mayores anchuras que el resto de fuentes observadas, lo que nos indica que en ella debe existir cierta actividad dinámica producto de las primeras fases de formación estelar.
- Muchas de las especies observadas son típicas de nubes oscuras (p.ej, CS, HCN, HNC). Aunque se han detectado también otras moléculas menos comunes, como algunas sustituciones isotópicas y deuteradas (NH_2D , CH_2DOH , D_2CS , etc.), HCO, HNCO, ácido fórmico (HCOOH), y otras especies que no esperábamos encontrar en este tipo de fuentes como son SiO y HCOOCH_3 (ambas consideradas típicas de núcleos calientes de formación estelar), o el propileno (CH_2CHCH_3), detectado únicamente en TMC-1 y que es la cadena más larga observada en este barrido espectral.
- El principal resultado de este trabajo es la detección de dos nuevas especies moleculares, D_2CS y CH_2CHCH_3 , nunca observadas antes en el espacio. La

detección de nuevas moléculas es un producto muy interesante de los barridos espectrales, y demuestra la importancia de este tipo de estudios a la hora de conocer la riqueza molecular de estas fuentes. Además esto pone a prueba los modelos químicos al intentar explicar la formación de especies moleculares complejas en estas regiones frías y quiescentes.

- Para cada una de las moléculas observadas se han obtenido temperaturas de excitación, densidades de columna y abundancias relativas al H_2 . Las moléculas detectadas que muestran las mayores abundancias son SO , C_2H , HCN , HNC , HCO^+ , HNCO , NH_2D , y HC_3N . Por el contrario, las especies que presentan las menores abundancias son SiO , C_3O , y CH_2CHCN .
- Considerando cada una de las fuentes observadas por separado, hemos encontrado que B1 y L183 son más ricas en especies que contienen oxígeno (p.ej. SO , HCOOH), mientras que L1544 y TMC-1 son especialmente abundantes en cadenas carbonadas (C_2S , $c\text{-C}_3\text{H}$, C_3N , HC_3N , CH_3CN , CH_2CHCN). Es importante remarcar las altas abundancias observadas para D_2CS en B1 y CH_2CHCH_3 en TMC-1, siendo las únicas fuentes donde se han observado estas especies en el medio interestelar.
- Se ha tratado de relacionar las abundancias observadas con el estado evolutivo de la nube, aunque este es un árduo trabajo puesto que existen muchos factores que influyen en la composición química de la región. Además la evolución química no siempre está en concordancia con la evolución dinámica de la nube hacia la formación estelar, como intuitivamente podemos pensar. También los modelos químicos existentes fallan a la hora de reproducir algunas abundancias y por tanto no se tiene una visión clara de qué especies pueden considerarse tempranas o tardías en la evolución química de una nube interestelar.
- A partir de la detección de una transición de D_2CS durante el barrido espectral a 3 mm, se realizó un estudio exhaustivo de la deuteración del tioformaldehído, y también del formaldehído, en B1. Para ambas especies se obtuvo un gran enriquecimiento en deuterio, pero mientras que las abundancias para la especie una vez deuterada son similares, sorprende la alta abundancia del D_2CS respecto a su especie principal (~ 0.3), superior a la correspondiente al formaldehído ($\text{D}_2\text{CO}/\text{H}_2\text{CO} \sim 0.08$).
- Las frecuencias observadas para las transiciones de H_2CS , $\text{H}_2\text{C}^{34}\text{S}$, HDCS y D_2CS , al igual que los datos de laboratorio disponibles, se ajustaron conjuntamente para obtener nuevas constantes rotacionales para estas especies, con las que se calcularon frecuencias más precisas en el dominio de las ondas milimétricas. Este trabajo demuestra que las frecuencias típicamente encontradas en los catálogos disponibles no siempre se ajustan a las frecuencias observadas en el espacio, en especial para las líneas tan delgadas procedentes de las nubes oscuras.
- Los modelos de química en fase gas son capaces de reproducir el enriquecimiento en deuterio observado para el H_2CS de forma aproximada, si se consideran

factores de empobrecimiento del gas adecuados, como los encontrados en diferentes condensaciones frías. Los procesos químicos que tienen lugar en la superficie de los granos no se han incluido de forma específica, puesto que se conocen poco. De este modo el papel de los granos se ha limitado a un plano pasivo, considerando únicamente la incorporación a los mantos de los granos de especies como el oxígeno, CO, H₂O, etc., de forma que éstas no se encuentran disponibles para que se produzcan ciertas reacciones químicas en fase gas. Nuestros resultados también incluyen algunas nuevas consideraciones químicas específicas, que no han sido estudiadas en el laboratorio o teóricamente, y que contribuyen a aumentar el enriquecimiento en deuterio. Sin embargo, su influencia en nuestros resultados no es determinante, y demuestra la necesidad de nuevos estudios teóricos o de laboratorio en tierra.

- Después de la detección de 4 dobletes procedentes del propileno dentro del rango del barrido espectral, se observaron 3 dobletes más para confirmar esta nueva detección. La densidad de columna y abundancia relativa observadas en TMC-1 son de $4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y 4×10^{-9} respectivamente, las cuales resultan ser bastante elevadas para tratarse de una nube fría y quiescente.
- Se han discutido diferentes vías de formación posibles para el propileno, aunque ninguna de ellas lo produce de forma satisfactoria en fase gas. Algunas cadenas de carbono con un gran nivel de saturación pueden producirse de forma eficiente en la superficie de los granos de polvo, pero no está claro cómo estas especies pueden evaporarse/eyectarse a la fase gas en una nube fría y quiescente sin la presencia de choques. Esta detección proporciona una información importante para mejorar los modelos químicos, tanto en fase gaseosa como de interacción gas-grano, y así avanzar un poco más en la comprensión de la química y los procesos de formación de muchas especies en el medio interestelar. En cualquier caso, parece que la química en fase gas no está considerando algunas reacciones importantes que involucren pequeños hidrocarburos, los cuales podrían producir moléculas como el propileno con grandes abundancias. La detección del propileno sugiere que otros pequeños hidrocarburos, como el propano (CH₃CH₂CH₃), podrían encontrarse en nubes oscuras.
- En este trabajo hemos buscado algunas moléculas orgánicas complejas, típicas de regiones de formación estelar, en dos nubes oscuras (L183 y L1448). En general sus abundancias aumentan en la posición del flujo bipolar contenido en L1448, y en las componentes del gas precursor del choque y del gas chocado. Sin embargo, estas especies no se detectan en la componente quiescente del gas en ninguna de las dos fuentes.
- Los límites superiores de las abundancias de estas especies complejas en nubes oscuras son consistentes con las observadas en las nubes moleculares del Centro Galáctico y en los núcleos calientes asociados a formación de estrellas masivas. Las grandes abundancias que se observan en los núcleos calientes de estrellas poco masivas pueden ser reproducidas considerando cambios locales de la química en la región más cercana a la proto-estrella.

7.2. Perspectivas

Recientemente me he incorporado al Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja (DAMIR), perteneciente al Instituto de Estructura de la Materia (CSIC) en Madrid, donde voy a realizar un Post-doc. En los próximos meses voy a publicar el artículo con los resultados del barrido espectral presentados en los Capítulos 2 y 3, además de estudiar en detalle algunos aspectos encontrados durante este trabajo, como son

- Excitación y deuteración en HCN y HNC en las cuatro fuentes observadas. Aquí vamos a modelizar la emisión de las líneas observadas en cada una de las fuentes del barrido espectral, y también los procesos químicos que llevan a la formación de sus especies deuteradas, para lo que ya se han realizado la mayor parte de las observaciones.
- Búsqueda del propileno en varias nubes oscuras en la región de Tauro, para ver si esta especie es una peculiaridad de TMC-1 o puede encontrarse en otras regiones similares. Además existe actualmente un proyecto en el telescopio de 30-m de IRAM para la búsqueda en TMC-1 del propano ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$) y de algunos derivados del propileno, como los cianidos $\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CN}$ y CH_3CHCHCN , para así intentar discernir los procesos químicos que llevan a la formación de especies tan complejas y saturadas en una nube oscura.
- Estudio de la variación de abundancias de especies deuteradas a lo largo de la nube TMC-1. Para ello utilizaremos las especies detectadas en el barrido espectral presentado aquí, y otras observaciones realizadas fuera del rango espectral observado en la posición de CP y en el pico de NH_3 . Además de las observaciones, contamos con los modelos de química específicos para esta fuente que ha desarrollado S. Viti, del University College en Londres.
- Estudio en profundidad de Barnard 1. Este va a ser un trabajo más amplio que los nombrados anteriormente puesto que pretendemos cubrir varios aspectos encontrados en esta nube, como son la gran abundancia encontrada en especies deuteradas, la presencia de especies típicas de regiones de formación estelar como el HCOOCH_3 , etc. Para ello disponemos ya de algunas observaciones realizadas en la posición observada aquí en algunas especies (metanol deuterado, DCN, DNC, DCO^+ , DNCO), y también de varios mapas de la región denominada B1-b en alguna de estas moléculas, proporcionados por E. Roueff y M. Gerin del Observatorio de París y la École Normale Supérieure. A partir de este trabajo en B1 pretendemos estudiar los procesos químicos que ocurren alrededor de los objetos proto-estelares encontrados en esta fuente, y probar la existencia de actividad de formación estelar y la presencia de un posible *hot corino*.

Además de esto, a principios del próximo año viajaré al telescopio de Effelsberg (Alemania), para completar las observaciones del barrido espectral a 1.3 cm que estamos realizando en las mismas fuentes de este trabajo. También vamos a continuar extendiendo el barrido espectral presentado aquí para cubrir toda la banda a 3 mm (entre 80–115 GHz) en las dos fuentes más ricas de este estudio, B1 y TMC-1.

Durante mi estancia en el DAMIR también voy a participar en varios proyectos utilizando HERSCHEL, en el cual el Departamento participa también aportando software para la reducción y análisis de los datos procedentes de este satélite que se pondrá en órbita el próximo año. En uno de ellos voy a estudiar la región de formación estelar masiva de Orión, donde se pretende observar la emisión de líneas atómicas como C II, O I, etc. para probar las regiones de gas ionizado y H II producidas por la formación de estrellas masivas de tipo OB. En otro de los proyectos en los que estoy involucrada, se pretende estudiar la emisión de líneas atómicas y moleculares y del continuo del polvo procedente de varios discos en estrellas Herbig AeBe, para poder realizar modelos de evolución de discos circunestelares y de la química en ellos.

Apéndice A

Diagramas de población

Los diagramas de población, de Boltzmann o rotacionales permiten estimar, a partir de la emisión molecular, condiciones físicas de la nube como la densidad de columna de las especies observadas y la temperatura de la región de emisión abarcada por el haz del telescopio (ver, p.ej., Goldsmith & Langer 1999).

Este método se basa en la relación entre la intensidad de las líneas observadas y la densidad de columna. Una transición rotacional ópticamente delgada produce una temperatura de brillo que es proporcional a la densidad de columna en el nivel superior de la transición observada. Si además todas las transiciones están termalizadas podemos convertir esa densidad de columna del nivel en densidad de columna total de la especie. Observando varias transiciones correspondientes a una misma especie se puede construir un diagrama en el que se representa la densidad de columna normalizada por el peso estadístico en cada nivel de energía en función de sus energías. En condiciones de equilibrio termodinámico (ET), los puntos representados describen una recta cuya pendiente es proporcional a $1/T$. La temperatura obtenida de este modo, llamada temperatura rotacional (T_{rot}), será igual a la temperatura cinética (T_{kin}) de la nube, y a la de excitación de los niveles rotacionales (T_{ex}), siempre que estos niveles se encuentren termalizados.

La densidad de columna de una molécula en el nivel de energía superior de una transición observada se puede expresar en función de la intensidad integrada de la línea como

$$N_u = \frac{8\pi k \nu_{ul}^2}{hc^3 A_{ul}} \left(1 - \frac{J_\nu(T_{\text{bg}})}{J_\nu(T_{\text{ex}})}\right)^{-1} \frac{\tau}{1 - e^{-\tau}} \int T_{\text{B}} dv \quad (\text{A.1})$$

siendo

- ν_{ul} la frecuencia de la transición entre el nivel superior (u) y el inferior (l);
- A_{ul} el coeficiente de Einstein para la probabilidad de transición entre los dos niveles, que podemos calcular como

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4 \nu_{ul}^3 \mu^2 S}{3hc^3 g_u} \quad (\text{A.2})$$

donde S es la fuerza de línea, μ la componente del momento dipolar eléctrico permanente de la molécula a lo largo del eje principal de inercia, y g_u la degeneración del nivel superior;

- $J_\nu(T)$ es la función fuente, que se define como

$$J_\nu(T) = \frac{h\nu}{k} (\exp(h\nu/kT) - 1)^{-1}; \quad (\text{A.3})$$

- $T_{\text{bg}} = 2.7$ K es la temperatura de la radiación de fondo cósmico, y T_{ex} la temperatura de excitación de la transición;

- τ es la profundidad óptica de la transición; y

- T_{B} la temperatura de brillo observada en la línea.

Si consideramos una emisión ópticamente delgada ($\tau \ll 1$), y asumiendo que nos encontramos en la región del espectro en que se puede aplicar la aproximación de Rayleigh-Jeans (es decir, $h\nu \gg kT$) y que la radiación de fondo es despreciable ($T_{\text{bg}} \ll T_{\text{ex}}$), la ecuación A.1 se reduce a

$$N_u = \frac{8\pi k\nu_{ul}^2}{hc^3 A_{ul}} W \quad (\text{A.4})$$

donde, por claridad, se ha abreviado la temperatura de brillo integrada de la línea como $W = \int T_{\text{B}} dv$.

En un caso de excitación arbitrario, la población de cada uno de los niveles relativa al nivel fundamental o a cualquier otro nivel puede estar caracterizada por una temperatura diferente. La temperatura de excitación se define a través de las poblaciones o densidades de columna relativas de cualquier par de niveles u y l con pesos estadísticos g_u y g_l y energías E_u y E_l relativas a una referencia común, de la forma

$$\frac{N_l}{N_u} = \frac{g_l}{g_u} \exp\left(-\frac{E_l - E_u}{kT_{\text{ex}}}\right). \quad (\text{A.5})$$

Supondremos que, por el contrario, nos encontramos en una situación de equilibrio termodinámico local (ETL) en el que todas las temperaturas de excitación son la misma, a la que denominaremos temperatura de rotación (T_{rot}). La población de cada uno de los niveles vendrá expresada entonces como

$$N_u = \frac{N}{Z} g_u \exp\left(-\frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}\right) \quad (\text{A.6})$$

donde N es la densidad de columna total de la especie estudiada, y Z es la función de partición dada por

$$Z = \sum_{\forall i} N_i \quad (\text{A.7})$$

Aplicando logaritmos a la ecuación A.6 e incluyendo la ecuación A.4, se obtiene

$$\log \frac{8\pi k\nu_{ul}^2 W}{hc^3 A_{ul} g_u} = \log \frac{N}{Z} - \frac{E_u \log e}{kT_{\text{rot}}} \quad (\text{A.8})$$

En casos en los que los datos proporcionados son el momento dipolar y la fuerza de línea, sustituyendo en la expresión anterior $A_{ul} g_u$ en función de $\mu^2 S$ de la expresión A.2, se obtiene la expresión equivalente

$$\log \frac{3kW}{8\pi^3 \nu_{ul} \mu^2 S} = \log \frac{N}{Z} - \frac{E_u \log e}{kT_{\text{rot}}} \quad (\text{A.9})$$

De esta forma, si representamos el logaritmo de la densidad de columna en el nivel superior de la transición dividido por su degeneración ($\log N_u/g_u$) frente a la energía del nivel superior (E_u/k), podremos ajustar una línea recta cuya pendiente será proporcional a la inversa de la temperatura de rotación ($1/T_{\text{rot}}$) y cuya ordenada en el origen será igual a la densidad total de la molécula dividido por la función de partición (N/Z). Esta función de partición, dependiente de la temperatura, la podemos calcular para cada especie con la temperatura derivada del propio diagrama.

En el caso en que la molécula utilizada presente una separación en especies *orto* y *para*, se pueden incluir en la expresión A.8 los factores g_I y g_k , que representan el peso de espín nuclear reducido y la degeneración del nivel K , respectivamente (ver Turner 1991). De manera que esta última expresión queda de la forma

$$\log \frac{8\pi k\nu_{ul}^2 W}{hc^3 A_{ul} g_u g_I g_k} = \log \frac{N}{Z} - \frac{E_u \log e}{kT_{\text{rot}}} \quad (\text{A.10})$$

Esta expresión se utilizó en el Capítulo 4 para obtener las densidades de columna de H_2CO , H_2CS y sus especies dos veces deuteradas. El factor g_I es importante en este caso puesto que para la forma orto suele tomar un valor tres veces superior al de la especie para. En concreto, para dichas especies este factor toma los valores $3/4$ si K_{-1} es impar y $1/4$ si K_{-1} es par.

A continuación se describe la determinación de las densidades de columna y temperaturas en casos específicos de algunas moléculas observadas en el barrido espectral a 3 mm (Cap. 3), como el de líneas con estructura fina e hiperfina, en los que se han empleado métodos y/o expresiones ligeramente distintas a las anteriores.

A.1. Líneas con estructura hiperfina

Para el cálculo de la densidad de columna en el caso de transiciones que presentan una estructura hiperfina bien definida, se ha utilizado el método HFS (del inglés, *HyperFine Structure*) del programa CLASS, que forma parte del paquete GILDAS para reducción de datos radioastronómicos. Este método asume que todas las líneas del multiplete tienen la misma anchura y la misma temperatura de excitación, y nos proporciona, a partir de un ajuste conjunto a todas las componentes hiperfinas, la profundidad óptica total de la transición, la anchura media de las líneas en aproximación de ETL, y la temperatura de radiación T_R del multiplete.

A partir de estas cantidades se puede obtener la temperatura de excitación de la transición de la forma

$$T_R = [J_\nu(T_{\text{ex}}) - J_\nu(T_{\text{bg}})](1 - e^{-\tau}) \quad (\text{A.11})$$

en la práctica la temperatura de excitación se obtiene fácilmente a partir de dos de los valores salida del método HFS y la T_{bg} . Con esta temperatura, la opacidad y la anchura obtenidas del ajuste, podemos calcular la densidad de columna según la siguiente expresión

$$N = \frac{8\pi\nu_{ul}^3}{c^3} \frac{Z(T_{\text{ex}})}{g_u A_{ul}} \Delta\nu \frac{\exp(E_u/kT_{\text{ex}})}{\exp(h\nu/kT_{\text{ex}}) - 1} \tau_{ul} \quad (\text{A.12})$$

donde ν_{ul} es la frecuencia correspondiente a la transición sin desdoblamiento hiperfino.

Este método se utilizó para calcular la densidad de columna para las especies H^{13}CN , HC^{17}O^+ y NH_2D , observadas en el barrido a 3 mm y cuyos resultados se muestran en la Tabla 3.2.

A.2. Líneas con estructura hiperfina no resuelta

En el caso de que la transición observada presenta una estructura hiperfina no resuelta, es decir, cuando se observa una sola línea, hemos considerado a ésta como resultado de la contribución de todas las componentes hiperfinas. Para ello hemos obtenido una “línea total” resultado de la contribución de cada componente hiperfina según su intensidad. Por tanto, en primer lugar calculamos la intensidad de cada una de estas componentes a una temperatura $T = 10$ K, utilizando la expresión

$$I_{ul}(T) = I_{ul}(T_0) \frac{Z(T_0) \exp(-E_l/kT) - \exp(-E_u/kT)}{Z(T) \exp(-E_l/kT_0) - \exp(-E_u/kT_0)} \quad (\text{A.13})$$

donde $I_{ul}(T_0)$, con $T_0 = 300$ K, se obtiene de los catálogos.

Con esta intensidad calculamos la intensidad relativa de cada una de las componentes hiperfinas, que nos servirán para calcular la contribución relativa de cada una de ellas a la “línea total”. De este modo, el coeficiente de Einstein y la degeneración serán

$$A_{ul}^{tot} = \sum_{\forall i} (A_{ul}^i r^i) \quad g_u^{tot} = \sum_{\forall i} (g_u^i r^i) \quad (\text{A.14})$$

Esto se utilizó en el cálculo de las densidades de columna de las especies C_3N , HNCO , HCC^{13}CN , HC^{13}CCN , H^{13}CCCN , HCCNC , DC_3N , y CH_3CN , dentro del barrido de 3 mm. En el caso de varias transiciones observadas se utilizaron después las “líneas totales” para construir el diagrama rotacional o, en el caso de una sola transición, calcular la densidad de columna asumiendo una temperatura de 10 K.

A.3. Líneas con estructura fina e hiperfina

A.3.1. C_2H & C_3N

Para calcular la densidad de columna de estas dos especies partimos de la siguiente expresión, válida para moléculas lineales, para la densidad de columna del nivel superior (ver Ziurys et al. 1982)

$$N_{N+1}(\text{cm}^{-2}) = \frac{3k(2N+3)T_R\Delta v}{8\pi^3\mu_0^2\nu(N+1)R_{hf}} \quad (\text{A.15})$$

siendo T_R , la temperatura de radiación de una componente hiperfina en concreto de la transición $N+1 \rightarrow N$; Δv , la anchura de la línea y R_{hf} la intensidad relativa de la transición hiperfina ($F+1 \rightarrow F$); y μ_0 el momento dipolar permanente de la molécula.

Sustituyendo en la ecuación anterior el momento dipolar de la expresión

$$A = \frac{64\pi^4\nu^3}{3hc^3} \mu_0^2 \frac{J+1}{2J+3} \quad (\text{A.16})$$

obtenemos

$$N_{N+1}(\text{cm}^{-2}) = \frac{8\pi k\nu^2 T_R \Delta\nu}{hc^3 A R_{\text{hf}}} \quad (\text{A.17})$$

y asumiendo ETL podemos obtener la densidad de columna de la molécula

$$N_{N+1} = \frac{N}{Q} g_{N+1} \exp\left(-\frac{E_{N+1}}{kT}\right) \quad (\text{A.18})$$

sustituyendo y aplicando logaritmos obtenemos una expresión equivalente a la utilizada anteriormente para los diagramas rotacionales

$$\log \frac{8\pi k\nu^2 W}{hc^3 A g_u R_{\text{hf}}} = \log \frac{N}{Q} - \frac{E_u \log e}{kT} \quad (\text{A.19})$$

Con esta expresión obtuvimos un valor de la densidad de columna para cada componente hiperfina, asumiendo una temperatura de 10 K para todas las fuentes. En el caso del CCH, en el que encontramos diferencias en las intensidades relativas de las componentes hiperfinas con respecto a los valores en ET (ver Sección 2.5.4), la densidad de columna total se obtuvo a partir de los valores obtenidos para las dos líneas centrales, cuyas intensidades relativas son las más similares a los valores en equilibrio.

A.3.2. HCO

La profundidad óptica, τ_ν , para una componente hiperfina del HCO con frecuencia ν es (ver Snyder et al. 1985)

$$\tau_\nu = \frac{A_{ul} N_f}{8\pi \Delta V} \left(\frac{c}{\nu}\right) \left(\frac{f_u}{f_l}\right) [1 - \exp(-\frac{h\nu}{kT_e})] \quad (\text{A.20})$$

siendo A_{ul} , el coeficiente de Einstein; N_f , la densidad de columna en el nivel hiperfino correspondiente; ΔV , la anchura a media altura de la línea en cm s^{-1} ; y $f = (2F+1)$, es la degeneración en el nivel hiperfino superior o inferior.

En el caso en que las líneas son ópticamente delgadas,

$$T_R = \frac{A N_f h c^3}{8\pi \Delta V k \nu^2} \left(\frac{f_u}{f_l}\right) \exp\left(-\frac{h\nu}{kT_e}\right) \left[1 - \frac{\exp(h\nu/kT_e) - 1}{\exp(h\nu/kT_b) - 1}\right] \quad (\text{A.21})$$

o también

$$T_R \approx \frac{f_u}{4} \left[\frac{A h c^3}{8\pi \Delta V k \nu^2}\right] \frac{N_T}{Q} \exp\left(-\frac{E_u}{kT_e}\right) \quad (\text{A.22})$$

donde E_u , es la energía del nivel rotacional superior sin desdoblar; N_T , es la densidad de columna total; y Q la función de partición rotacional.

Con esta expresión podemos calcular un valor de la densidad de columna para cada una de las componentes hiperfinas, asumiendo una temperatura $T_{\text{ex}} = 10$ K. La densidad de columna total la calculamos haciendo una media ponderada de los valores obtenidos para cada componente.

Apéndice B

Aproximación de Sobolev o LVG

Las ecuaciones de equilibrio estadístico describen la variación de la población de un nivel i con energía E_i debida tanto a transiciones radiativas como colisionales

$$\frac{dn_i}{dt} = - \sum_{j \neq i} R_{ij} n_i + \sum_{j \neq i} R_{ji} n_j - \sum_{j \neq i} C'_{ij} n_i + \sum_{j \neq i} C'_{ji} n_j \quad (\text{B.1})$$

donde, R_{ij} es la probabilidad de transición radiativa del nivel i al j y C'_{ij} la probabilidad de transición colisional. Las primeras se pueden escribir en función de los coeficientes de Einstein

$$R_{ij} = A_{ij} + 4\pi \bar{J} B_{ij} \quad (E_i > E_j) \quad (\text{B.2})$$

$$R_{ij} = 4\pi \bar{J} B_{ij} \quad (E_j > E_i) \quad (\text{B.3})$$

siendo \bar{J} la intensidad promediada a todo ángulo y frecuencia

$$\bar{J} = \int J_\nu \Phi(\nu) d\nu; \quad J_\nu = \frac{1}{4\pi} \int I_\nu(\theta, \phi) d\omega \quad (\text{B.4})$$

donde $\Phi(\nu)$ es el perfil de la línea.

Los coeficientes de las transiciones colisionales, C'_{ij} , representan la probabilidad de que se produzca la transición tras una colisión entre una partícula de la especie considerada y cualquier otra. Son proporcionales a la densidad de hidrógeno molecular del medio, la sección eficaz geométrica de la colisión y a la velocidad típica de las partículas para la temperatura cinética. Se estiman por medio de cálculos mecanocuánticos complejos, a partir de las propiedades microscópicas de la interacción electromagnética de dos partículas en colisión y apoyados por medidas de laboratorio de tiempos de relajación de niveles excitados.

En el equilibrio, $dn_i/dt = 0$, $\forall i$, por lo que tenemos un sistema de ecuaciones que nos permite, en principio, calcular la población de los niveles. Sin embargo, vemos en B.2–B.4 que los términos de estas ecuaciones dependen de la densidad de radiación en el punto considerado y ésta a su vez depende de la población de los niveles. Por tanto la resolución de estas ecuaciones acopladas puede resultar complicada. Esto

se puede evitar utilizando la llamada aproximación de Sobolev o LVG (de *Large Velocity Gradient*).

Esta aproximación considera que la anchura de las líneas se debe a la existencia de grandes gradientes de velocidad a lo largo de la nube, de manera que la variación de la velocidad entre puntos relativamente próximos es mayor que la dispersión local de velocidad. Este gradiente de velocidades puede aparecer en una envoltura en expansión (por ejemplo, en la formación de nebulosas planetarias) o, en el caso de regiones de formación estelar, en una nube en colapso gravitatorio.

El modelo que vamos a considerar es el de una esfera de densidad uniforme que ha colapsado desde un radio infinito y por tanto tendrá una velocidad radial de caída

$$v(r) = \left(\frac{2GM}{R^3} \right)^{1/2} r \equiv \frac{V}{R} r \quad (\text{B.5})$$

donde M es la masa de la nube, R es el radio exterior, G la constante gravitacional y r la distancia desde el centro de la nube.

Supondremos que el campo de velocidades es tal que no hay interacción radiativa entre puntos muy distantes, de manera que un fotón emitido por una molécula que no es reabsorbido localmente por otra que se encuentre en esa misma zona de velocidad podrá escapar de la nube. Los puntos de una misma zona de velocidades presentan similares condiciones físicas y, por tanto de excitación.

Para obtener una solución general del conjunto de ecuaciones acopladas que describen la transferencia radiativa y el equilibrio estadístico de una nube de gas en colapso, podemos aplicar un método aproximado, desarrollado por Sobolev (1960) y ampliado por Castor (1970) y Lucy (1971). Estos autores demuestran que en este límite de interacción radiativa, el valor de la intensidad media en cualquier punto de la nube, cuando se integra sobre el perfil de la línea, depende únicamente del valor local de la función fuente \bar{J} y de la probabilidad de que un fotón emitido en ese punto escape de la nube sin sufrir interacciones. La aproximación Sobolev implica por tanto una localización de la transferencia radiativa. Es decir, un punto sólo interacciona radiativamente con su entorno próximo, con lo que \bar{J} no depende de lo que pase fuera de ese entorno, es una función local.

Seguiremos aquí la formulación para la parte radiativa de B.1 debida a Castor (1970). Para un campo de velocidades radial y con simetría esférica, la opacidad total del medio a una frecuencia dada y según una dirección, definida por un parámetro de impacto p , se puede escribir

$$\tau(\nu, p) = \frac{\tau_0(\nu)}{1 + \mu^2 \left(\frac{d \ln v}{d \ln r} - 1 \right)} = \frac{\tau_0(\nu)}{1 + \mu^2 \left(\frac{r}{v} \frac{dv}{dr} - 1 \right)} = \frac{\tau_0(\nu)}{1 + \mu^2(\epsilon - 1)} \quad (\text{B.6})$$

donde τ_0 es una función suave de la frecuencia

$$\tau_0 = \frac{c^2 A_{ul}}{8\pi\nu^2} g_u(x_l - x_u) \frac{r}{\nu v(r)/c} \quad (\text{B.7})$$

siendo ϵ el gradiente logarítmico de la velocidad, μ el coseno del ángulo que forma la línea de visión y la dirección radial, A_{ul} el coeficiente de Einstein de la transición $u \rightarrow l$, g_u la degeneración del nivel superior u y $x_{u,l}$ las fracciones de población en el nivel superior e inferior.

En coordenadas esféricas y para un punto genérico r , \bar{J} viene dada por

$$\bar{J} = \frac{1}{2r} \int_{-r}^r dz \int_0^\infty \Phi(\nu) I(\nu, z) d\nu \quad (\text{B.8})$$

En nuestra aproximación LVG, podemos escribir una expresión local para \bar{J} (ver Castor 1970) de la forma

$$\bar{J} = [1 - \beta(r)] S(r) + \beta_c(r) I_c(r) \quad (\text{B.9})$$

$$\beta(r) = \int_0^1 \frac{1 - e^{-\tau(\mu, r)}}{\tau(\mu, r)} d\mu \quad (\text{B.10})$$

donde $\beta_c(r) I_c(r)$ representa la contribución de las fuentes de continuo. I_c es el brillo promedio de la fuente y depende suavemente de la frecuencia, mientras que β_c toma diferentes formas según la fuente de continuo de que se trate. Por ejemplo en el caso de una nube sin fuentes próximas de radiación, la fuente principal de continuo que hay que considerar es la radiación cósmica de fondo en la que, al ser isotrópica, $\beta_c = \beta$ e $I_c = B_\nu(2.7K)$.

El concepto básico de esta formulación es el de probabilidad de escape, β , la probabilidad de que un fotón abandone la nube, que es también una función local. Cuando la opacidad no es despreciable, no basta con la emisión de un fotón en una transición, puesto que será reabsorbido y reemitido varias veces antes de que pueda escapar de la nube. Para tener esto en cuenta, el formalismo LVG modifica las probabilidades de emisión al introducir este parámetro β . Esto se puede ver claramente al introducir la expresión de la intensidad integrada en la parte radiativa de las ecuaciones B.1 para una transición $u \rightarrow l$

$$\frac{dx_u}{dt} = -A_{ul} x_u - B_{ul} 4\pi [1 - \beta(r)] S(r) (x_u - x_l) - B_{ul} 4\pi \beta_c(r) I_c(r) (x_u - x_l) \quad (\text{B.11})$$

Utilizando las relaciones entre los coeficientes de Einstein y la expresión de la función fuente, $S(r)$, en función de las poblaciones de los niveles

$$B_{ul} = A_{ul} \frac{c^2}{8\pi h\nu^3}; \quad B_{lu} = A_{ul} \frac{c^2}{8\pi h\nu^3} \frac{g_u}{g_l} \quad (\text{B.12})$$

$$S = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{x_u}{x_l - x_u} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT_{\text{exc}}}} \quad (\text{B.13})$$

podemos escribir

$$\frac{dx_u}{dt} = -A_{ul}\beta x_u - B_{ul} 4\pi \beta_c(r) I_c(r) (x_u - x_l) \quad (\text{B.14})$$

El término $A_{ul}\beta x_u$ sustituye al $A_{ul} x_u$ del caso ópticamente delgado, lo que muestra el significado de la probabilidad de escape.

En Goldreich & Kwan (1974) podemos encontrar la aplicación detallada de esta aproximación a nubes moleculares, donde presentan soluciones numéricas para algunas moléculas y discuten los resultados y la validez del modelo de colapso.

Publicaciones

Publicaciones en revistas internacionales con sistema de arbitraje

- “*Tracing the Shock Precursors in the L1448-mm/IRS 3 Outflows*”
Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., **Marcelino, N.**
2004, *ApJ*, 603, L49
- “*Deuterated Thioformaldehyde in the Barnard 1 Cloud*”
Marcelino, N., Cernicharo, J., Roueff, E., Gerin, M., Mauersberger, R.
2005, *ApJ*, 620, 308
- “*Organic Chemistry in the Dark Clouds L1448 and L183. Unique Grain Mantle Composition*”
Requena-Torres, M.A., **Marcelino, N.**, Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Martín, S., Mauersberger, R.
2007, *ApJ*, 655, L37
- “*Discovery of Interstellar Propylene (CH_2CHCH_3): Missing Links in Interstellar Gas-Phase Chemistry*”
Marcelino, N., Cernicharo, J., Agúndez, M., Roueff, E., Gerin, M., Martín-Pintado, J., Mauersberger, R., Thum, C.,
2007, *ApJ*, 665, L127
(Reseña publicada en *Research Highlights* en la revista *Nature*, vol. 448, p. 843)
- “*A 3 mm Line Survey of Prototype Stellar Cores*”
Marcelino, N., Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Cernicharo, J., Thum, C., Roueff, E., Gerin, M.
En preparación

Otras publicaciones

- “*Test observations at frequencies below 80 GHz at the IRAM 30m telescope*”
Belloche, A., Navarro, S., Sievers, A., Thum, C., Cernicharo, J., John, D., **Marcelino, N.**, Menten, K.M.
2004, IRAM Internal Report (<http://iram.fr/IRAMFR/PV/veleta.htm>)
- “*Test observations of Cloudsat*”
Morris, D., Butin, G., **Marcelino, N.**
2007, IRAM Internal Report

Publicaciones en actas de congresos internacionales

- “*A 3 mm Line Survey of Prototype Stellar Cores*” **Marcelino, N.**, Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Cernicharo, J., Thum, C., Roueff, E., Gerin, M. en *Science with ALMA: a new era for Astrophysics*, Madrid, España, 13-17 Noviembre 2006, Madrid, España. Editado por Springer “*Astrophysics and Space Science (Ap&SS)*” *en proceso de edición*

Otras contribuciones en congresos internacionales

- “*Deuterium in dark clouds*” **Marcelino, N.** en 1^{er} Congreso Nacional de Astrofísica Molecular: Una visión general del potencial de los grupos de química españoles antes los nuevos desafíos de la Astrofísica., Ciudad Real, España, 1-4 Diciembre, 2003, p55 (*Contribución oral*)
- “*Deuterated Thioformaldehyde in the Barnard 1 Cloud*” **Marcelino, N.**, Cernicharo, J., Roueff, E., Gerin, M., Mauersberger, R. en Fourth IRAM Millimeter Interferometry School, Grenoble, Francia, 22-27 Noviembre, 2004 (*Contribución en poster*)
- “*A 3mm Line Survey of the Simplest Star Forming Regions*” **Marcelino, N.** en Summerschool in Molecular Astrophysics, Les Houches, Francia, 26-30 Septiembre, 2005 (*Contribución oral*)
- “*A 3mm Line Survey of the Simplest Star Forming Regions*” **Marcelino, N.** en The XXXVI Young European Radio Astronomers Conference (YERAC), Dalsfen, Holanda, 12-15 Septiembre, 2006 (*Contribución oral*)
- “*A 3mm Line Survey of the Simplest Star Forming Regions*” **Marcelino, N.**, Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Cernicharo, J. en *Science with ALMA: a new era for Astrophysics*, Madrid, España, 13-17 Noviembre, 2006 (*Contribución en poster*)

Bibliografía

- [1] Agúndez, M., Cernicharo, J., Pardo, J. R., Fonfría-Expósito, J. P., Guélin, M., Tenenbaum, E. D., Ziurys, L. M., & Apponi, A. J. 2007, *Ap&SS*, tmp, 247
- [2] Allen, T. L., Goddard, J. D., & Schaefer, H. F., III 1980, *JChPh*, 73, 3255
- [3] André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M. 1993, *ApJ*, 406, 122
- [4] André, P., Montmerle, T. 1994, *ApJ*, 420, 837
- [5] André, P., Ward-Thompson, D., & Barsony, M. 2000, en *Protostars and planets IV*, ed. V. Mannings, A. P. Boss, S. S. Russell, (Tucson, AZ: University of Arizona Press), p. 59
- [6] Anicich, V. 2003, JPL publication 03-19
- [7] Avery, L. W., Amano, T., Bell, M. B., Feldman, P. A., Johns, J. W. C., MacLeod, J. M., Matthews, H. E., Morton, D. C., Watson, J. K. G., Turner, B. E., Hayashi, S. S., Watt, G. D., & Webster, A. S. 1992, *ApJS*, 83, 363
- [8] Bachiller, R., & Cernicharo, J. 1984, *A&A*, 140, 414
- [9] Bachiller, R., & Cernicharo, J. 1986, *A&A*, 168, 262
- [10] Bachiller, R., Cernicharo, J., Martín-Pintado, J., Tafalla, M., & Lazareff, B. 1990a, *A&A*, 231, 174
- [11] Bachiller, R., Menten, K. M., & del Río-Alvarez, S. 1990b, *A&A*, 236, 461
- [12] Bachiller, R., Martín-Pintado, J., & Fuente, A. 1991, *A&A*, 243, L21
- [13] Bachiller, R., & Pérez-Gutiérrez, M. 1997, *ApJ*, 487, L93
- [14] Bacmann, A., Lefloch, B., Ceccarelli, C., Steinacker, J., Castets, A., & Loinard, L. 2003, *ApJ*, 585, L55
- [15] Beichman, C. A., Jennings, R. E., Emerson, J. P., Baud, B., Harris, S., Rowan-Robinson, M., Aumann, H. H., Gautier, T. N., Gillett, F. C., Habing, H. J., Marsden, P. L., Neugebauer, G., & Young, E. 1984, *ApJ*, 278, L45
- [16] Beichman, C. A., Myers, P. C., Emerson, J. P., Harris, S., Mathieu, R., Benson, P. J., & Jennings, R. E. 1986, *ApJ*, 307, 337

- [17] Bell, M. B., & Matthews, H. E. 1985, *ApJ*, 291, L63
- [18] Bell, M. B., Avery, L. W., Matthews, H. E., Feldman, P. A., Watson, J. K. G., Madden, S. C., & Irvine, W. M. 1988, *ApJ*, 326, 924
- [19] Bell, M. B., Avery, L. W., & Watson, J. K. G. 1993, *ApJS*, 86, 211
- [20] Benson, P. J., & Myers, P. C. 1983, *ApJ*, 270, 589
- [21] Benson, P. J., & Myers, P. C. 1989, *ApJS*, 71, 89
- [22] Bergin, E. A., & Langer, W. D. 1997, *ApJ*, 486, 316
- [23] Bergin, E. A., Goldsmith, P. F., Snell, R. L., & Langer, W. D. 1997, *ApJ*, 482, 285
- [24] Bisschop, S. E., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & de Wachter, E. B. 2007, *A&A*, 465, 913
- [25] Blackman, G. L., Brown, R. D., Godfrey, P. D., & Gunn, H. I. 1976, *Nature*, 261, 395
- [26] Blake, G. A., Sastry, L. V. L. N., & De Lucia, F. C. 1984, *JChPh*, 80, 95
- [27] Blake, G. A., Sutton, E. C. Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1986, *ApJS*, 60, 357
- [28] Blake, G. A., Sutton, E. C., Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1987, *ApJ*, 315, 621
- [29] Blake, G. A., Mundy, L. G., Carlstrom, J. E., Padin, S., Scott, S. L., Scoville, N. Z., & Woody, D. P. 1996, *ApJ*, 472, L49
- [30] Bok, B. J., Lawrence, R. S., & Menon, T. K. 1955, *PASP*, 67, 108
- [31] Bok, B. J. 1956, *AJ*, 61, 309
- [32] Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Williams, J. P., Castets, A., Caux, E., Cazaux, S., Maret, S., Parise, B., & Tielens, A. G. G. M. 2004, *ApJ*, 615, 354
- [33] Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Williams, J. P., & Lefloch, B. 2007, *A&A*, 463, 601
- [34] Brown, P. D., Charnley, S. B., & Millar, T. J. 1988, *MNRAS*, 231, 409
- [35] Brown, R. D. 1977, *Nature*, 270, 39
- [36] Brown, R. D., Eastwood, F. W., Elmes, P. S., & Godfrey, P. D. 1983, *Journal of the American Chemical Society*, 105, 6496
- [37] Brown, R. D., Godfrey, P. D., Cragg, D. M., Rice, E. H. N., Irvine, W. M., Friberg, P., Suzuki, H., Ohishi, M., Kaifu, N., & Morimoto, M. 1985, *ApJ*, 297, 302

- [38] Brown, R. L. 1981, *ApJ*, 248, L119
- [39] Buhl, D., & Snyder, L. E. 1970a, *BAAS*, 2, 299
- [40] Buhl, D., & Snyder, L. E. 1970b, *Nature*, 228, 267
- [41] Bujarrabal, V., Guélin, M., Morris, M., & Thaddeus, P. 1981, *A&A*, 99, 239
- [42] Butner, H. M., Lada, E. A., & Loren, R. B. 1995, *ApJ*, 448, 207
- [43] Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, *ApJ*, 408, 548
- [44] Caselli, P., Walmsley, C. M., Terzieva, R., & Herbst, E. 1998, *ApJ*, 499, 234
- [45] Caselli, P., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 1999, *ApJ*, 523, 165
- [46] Caselli, P., Walmsley, C. M., Zucconi, A., Tafalla, M., Dore, L., & Myers, P. C. 2002, *ApJ*, 565, 344
- [47] Castets, A., Caux, E., Bacmann, A., Cazaux, S., Ceccarelli, C., Comito, C., Helmich, F., Kahane, C., Parise, B., Schilke, P., Tielens, A. G. G. M., van Dishoeck, E., Wakelam, V., & Walters, A. 2005, *ASPC*, 344, 212
- [48] Castor, J.I. 1970, *MNRAS*, 149, 111
- [49] Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., Castets, A., Wakelam, V., Caux, E., Parise, B., & Teyssier, D. 2003, *ApJ*, 593, L51
- [50] Ceccarelli, C., Castets, A., Loinard, L., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 1998, *A&A*, 338, L43
- [51] Ceccarelli, C., Loinard, L., Castets, A., Tielens, A. G. G. M., Caux, E., Lefloch, B., & Vastel, C. 2001, *A&A*, 372, 998
- [52] Ceccarelli, C., Vastel, C., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., Boogert, A. C. A., Loinard, L., & Caux, E. 2002, *A&A*, 381, L17
- [53] Cernicharo J., Guélin, M., & Askne, J. 1984a, *A&A*, 138, 371
- [54] Cernicharo, J., Castets, A., Duvert, G., & Guilloteau, S. 1984b, *A&A*, 139, L13
- [55] Cernicharo, J. 1985, *ATM: A Program to Compute Atmospheric Opacity between 0 and 1000 GHz (IRAM Rep. 52; St. Martin d'Héres: IRAM)*
- [56] Cernicharo, J., Bachiller, R., & Duvert, G. 1985, *A&A*, 149, 273
- [57] Cernicharo J., & Guélin M. 1987, *A&A*, 176, 299
- [58] Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C., 2000, *A&AS*, 142, 181
- [59] Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, *ApJ*, 399, L71
- [60] Charnley, S. B. 1995, *Ap&SS*, 224, 251

- [61] Charnley, S. B., Kress, M. E., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1995, *ApJ*, 448, 232
- [62] Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Rodgers, S. D. 1997, *ApJ*, 482, L203
- [63] Charnley, S. B., & Rodgers, S. D. 2005, en IAUS 231 *Astrochemistry: Recent Successes and Future Challenges*, ed. D. C. Lis, G. A. Blake, & E. Herbst, p. 237
- [64] Chiar, J. E., Adamson, A. J., Kerr, T. H., Whittet, D. C. B. 1995, *ApJ*, 455, 234
- [65] Chièze, J.-P., Pineau des Forêts, G., & Flower, D. R. 1998, *MNRAS*, 295, 672
- [66] Chin, Y.-N., Henkel, C., Whiteoak, J. B., Langer, N., & Churchwell, E. B. 1996, *A&A*, 305, 960
- [67] Chini, R., Kreysa, E., Mezger, P. G., & Gemünd, H.-P. 1984, *A&A*, 137, 117
- [68] Chu, F. Y., Freund, S. M., Johns, J. W. C., & Oka, T. 1973, *JMSp*, 48, 328
- [69] Churchwell, E., Nash, A. G., & Walmsley, C. M. 1984, *ApJ*, 287, 681
- [70] Churchwell, E., Wood, D., Myers, P. C., & Myers, R. V. 1986, *ApJ*, 305, 405
- [71] Clark, F. O. 1991, *ApJS*, 75, 611
- [72] Clouthier, D. J., & Ramsay, D. A. 1983, *Annual Review of Physical Chemistry*, 34, 31
- [73] Comito, C., Schilke, P., Phillips, T. G., Lis, D. C., Motte, F., & Mehringer, D. 2005, *ApJS*, 156, 127
- [74] Cox, A. P., Hubbard, S. D., & Kato, H. 1982, *JMSp*, 93, 196
- [75] Crapsi, A., Caselli, P., Walmsley, M. C., & Tafalla, M. 2007, *A&A*, 470, 221
- [76] Creswell, R. A., Winnewisser, G., Pearson, E. F., & Winnewisser, M. 1976, *Sterne und Weltraum*, 15, 118
- [77] Cummins, S. E., Linke, R. A., & Thaddeus, P. 1986, *ApJS*, 60, 819
- [78] Curiel, S., Torrelles, J. M., Rodríguez, L. F., Gómez, J. F., & Anglada, G. 1999, *ApJ*, 527, 310
- [79] Dangoisse, D., Villemot, E., & Bellet, J. 1978, *JMSp*, 71, 414
- [80] de Gregorio-Monsalvo, I., Chandler, C. J., Gómez, J. F., Kuiper, T. B. H., Torrelles, J. M., & Anglada, G. 2005, *ApJ*, 628, 789
- [81] Dickens, J. E., Irvine, W. M., Snell, R. L., Bergin, E. A., Schloerb, F. P., Pratap, P., & Miralles, M. P. 2000, *ApJ*, 542, 870
- [82] Dickens, J. E., Langer, W. D., & Velusamy, T. 2001, *ApJ*, 558, 693

- [83] Duley, W. W., & Williams, D. A. 1984, en *Interstellar chemistry*, (London, England & Orlando FL: Academic Press)
- [84] Ehlerding, A., Arnold, S. T., Viggiano, A. A., Kalhori, S., Semaniak, J., Derkatch, A. M., Rosén, S., Ugglas, M., & Larsson, M. 2003, *JPhChA*, 107, 2179
- [85] Elias, J. H. 1978, *ApJ*, 224, 857
- [86] Fossé, D., Cernicharo, J., Gerin, M., & Cox, P. 2001, *ApJ*, 552, 168
- [87] Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1979, *ApJ*, 232, L65
- [88] Frerking, M. A., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982, *ApJ*, 262, 590
- [89] Friberg, P., Hjalmarsen, Å., Irvine, W. M., & Guélin, M. 1980, *ApJ*, 241, L99
- [90] Friberg, P., Madden, S. C., Hjalmarsen, Å., & Irvine, W. M. 1988, *A&A*, 195, 281
- [91] Friedel, D. N., Snyder, L. E., Turner, B. E., & Remijan, A. 2004, *ApJ*, 600, 234
- [92] Fuller, G. A., & Myers, P. C. 1993, *ApJ*, 418, 273
- [93] Gardner, F. F., & Winnewisser, G. 1975, *ApJ*, 195, L127
- [94] Garrod, R. T., & Herbst, E. 2006, *A&A*, 457, 927
- [95] Garrod, R. T., Wakelam, V., & Herbst, E. 2007, *A&A*, 467, 1103
- [96] Geppert, W. D., Hellberg, F., Österdahl, F., Semaniak, J., Millar, T. J., Roberts, H., Thomas, R. D., Haamberg, M., af Ugglas, M., Ehlerding, A., Zhaunerchyk, V., Kaminska, M., & Larsson, M. 2005, en *IAUS 231 Astrochemistry: Recent Successes and Future Challenges*, Ed. Lis, D.C., Blake, G. A., & Herbst, E.
- [97] Gerin, M., Pearson, J. C., Roueff, E., Falgarone, E., & Phillips, T. G. 2001, *ApJ*, 551, L193
- [98] Gerlich, D., Herbst, E., & Roueff, E. 2002, *P&SS*, 50, 1275
- [99] Gerlich, D., & Schlemmer, S. 2002, *P&SS*, 50, 1287
- [100] Gerry, M. C. L., Yamada, K., & Winnewisser, G. 1979, *JPCRD*, 8, 107
- [101] Goldreich, P., & Kwan, J. 1974, *ApJ*, 189, 441
- [102] Goldsmith, P. F., & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, 517, 209
- [103] Gordy, W., & Cook, R. L. 1984, *Microwave Molecular Spectra* (New York: Wiley)
- [104] Gottlieb, C. A., & Ball, J. A. 1973, *ApJ*, 184, L59
- [105] Gottlieb, C. A., Apponi, A. J., McCarthy, M. C., Thaddeus, P., & Linnartz, H. 2000, *JChPh*, 113, 1910

- [106] Gould, R. J., & Salpeter, E. E. 1963, *ApJ*, 138, 393
- [107] Greaves, J. S., & White, G. J. 1991, *A&AS*, 91, 237
- [108] Green, S., Garrison, B. J., & Lester, W. A., Jr. 1978, *ApJS*, 37, 321
- [109] Gregersen, E. M., Evans, N. J. II, Zhou, S., & Choi, M. 1997, *ApJ*, 484, 256
- [110] Guarnieri, A., Hinze, R., Krüger, M., Zerbe-Foese, H., Lentz, D., & Preugschat, D. 1992, *JMSP*, 156, 39
- [111] Guélin, M., & Thaddeus, P. 1977, *ApJ*, 212, L81
- [112] Guélin, M., Langer, W. D., & Wilson, R. W. 1982a, *A&A*, 107, 107
- [113] Guélin, M., Friberg, P., & Mezaoui, A. 1982b, *A&A*, 109, 23
- [114] Harris, A. I., Avery, L. W., Schuster, K.-F., Tacconi, L. J., & Genzel, R. 1995, *ApJ*, 446, L85
- [115] Hartquist, T. W., Williams, D. A., & Viti, S. 2001, *A&A*, 369, 605
- [116] Hasegawa, T. I., Herbst, E., & Leung, C. M. 1992, *ApJS*, 82, 167
- [117] Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993a, *MNRAS*, 261, 83
- [118] Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993b, *MNRAS*, 263, 589
- [119] Helmich, F. P., & van Dishoeck, E. F. 1997, *A&AS*, 124, 205
- [120] Herbst, E., & Klemperer, W. 1973, *ApJ*, 185, 505
- [121] Herbst, E. 1978, *ApJ*, 222, 508
- [122] Herbst, E., Smith, D., & Adams, N. G. 1984, *A&A*, 138, L13
- [123] Herbst, E., & Leung, C. M. 1989, *ApJS*, 69, 271
- [124] Herbst, E., Millar, T. J., Wlodek, S., & Bohme, D. K. 1989, *A&A*, 222, 205
- [125] Herbst, E. 1990, *Angewandte Chemie International Edition in English*, 29, 595
- [126] Herbst, E., & Leung, C. M., 1990, *A&A*, 233, 177
- [127] Herbst, E. 2000, en *Astrochemistry: From Molecular Clouds to Planetary Systems*, eds. Y. C. Minh & E. F. van Dishoeck, p. 147
- [128] Herbst, E., Terzieva, R., & Talbi, D. 2000, *MNRAS*, 311, 869
- [129] Herbst, E. 2005, en *The Dusty and Molecular Universe: A Prelude to Herschel and ALMA*, ed. A. Wilson, (Netherlands: ESA Publications Division), p. 205
- [130] Heyer, M. H., Vrba, F. J., Snell, R. L., Schloerb, F. P., Strom, S. E., Goldsmith, P. F., & Strom, K. M. 1987, *ApJ*, 321, 855

- [131] Hickman, A. P., Miles, R. D., Hayden, C., & Talbi, D. 2005 *A&A*, 438, 31
- [132] Hirahara, Y., Suzuki, H., Yamamoto, S., Kawaguchi, K., Kaifu, N., Ohishi, M., Takano, S., Ishikawa, S.-I., & Masuda, A. 1992, *ApJ*, 394, 539
- [133] Hirano, N., Kameya, O., Mikami, H., Saito, S., Umemoto, T., & Yamamoto, S. 1997, *ApJ*, 478, 631
- [134] Hirano, N., Kamazaki, T., Mikami, H., Ohashi, N., & Umemoto, T. 1999, en *Star Formation 1999*, ed. T. Nakamoto, NRO, 181
- [135] Hirota, E. 1966, *JChPh*, 45, 1984
- [136] Hirota, E., Hirooka, T., & Morino, Y. 1968, *JMSp*, 26, 351
- [137] Hirota, E. 1970, *JMSp*, 34, 516
- [138] Hirota, T., Yamamoto, S., Mikami, H., & Ohishi, M. 1998, *ApJ*, 503, 717
- [139] Hirota, T., Ikeda, M., & Yamamoto, S. 2001, *ApJ*, 547, 814
- [140] Hogerheijde, M. R., van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., & van Langevelde, H. J. 1997, *ApJ*, 489, 293
- [141] Hollenbach, D., & Salpeter, E. E. 1971, *ApJ*, 163, 155
- [142] Hollis, J. M., Snyder, L. E., Buhl, D., & Giguere, P. T. 1975, *ApJ*, 200, 584
- [143] Horn, A., Møllendal, H., Sekiguchi, O., Uggerud, E., Roberts, H., Herbst, E., Viggiano, A. A., & Fridgen, T. D. 2004, *ApJ*, 611, 605
- [144] Howe, D. A., Millar, T. J., Schilke, P., & Walmsley, C. M. 1994, *MNRAS*, 267, 59
- [145] Ikeda, M., Ohishi, M., Nummelin, A. Dickens, J. E., Bergman, P., Hjalmarsen, Å., & Irvine, W. M. 2001, *ApJ*, 560, 792
- [146] Irvine, W. M., & Schloerb, F. P. 1984, *ApJ*, 282, 516
- [147] Irvine, W. M., Schloerb, F. P., Hjalmarsen, Å., & Herbst, E. 1985, en *Protostars and planets II*, (Tucson, AZ: University of Arizona Press), p. 579
- [148] Irvine, W. M., Goldsmith, P. F., & Hjalmarsen, Å. 1987, en *Interstellar processes*, ed. D. J. Hollenbach, & H. A. Thromson, (Dordrecht: Reidel), Vol. 134, p. 561
- [149] Irvine, W. M., Friberg, P., Kaifu, N., Kawaguchi, K., Kitamura, Y., Matthews, H. E., Minh, Y., Saito, S., Ukita, N., & Yamamoto, S. 1989, *ApJ*, 342, 871
- [150] Irvine, W. M., Friberg, P., Kaifu, N., Matthews, H. E., Minh, Y. C., Ohishi, M., & Ishikawa, S. 1990, *A&A*, 229, L9
- [151] Jackson, J. M., Armstrong, J. T., & Barrett, A. H. 1984, *ApJ*, 280, 608

- [152] Jacq, T., Walmsley, C. M., Mauersberger, R., Anderson, T., Herbst, E., & De Lucia, F. C. 1993, *A&A*, 271, 276
- [153] Jewell, P. R., Hollis, J. M., Lovas, F. J., & Snyder, L. E. 1989, *ApJS*, 70, 833
- [154] Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., & Marcelino, N. 2004, *ApJ*, 603, L49
- [155] Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., & Martín, S. 2005, *ApJ*, 627, L121
- [156] Johansson, L. E. B., Andersson, C., Elldér, J., Friberg, P., Hjalmarson, Å., Höglund, B., Irvine, W. M., Olofsson, H., & Rydbeck, G. 1984, *A&A*, 130, 227
- [157] Jørgensen, J. K., Hogerheijde, M. R., Blake, G. A., van Dishoeck, E. F., Mundy, L. G., & Schöier, F. L. 2004, *A&A*, 415, 1021
- [158] Kaifu, N., Ohishi, M., Kawaguchi, K., Saito, S., Yamamoto, S., Miyaji, T., Miyazawa, K., Ishikawa, S.-I., Noumaru, C., Harasawa, S., Okuda, M., Suzuki, H. 2004, *PASJ*, 56, 69
- [159] Kalenskii, S. V., Slysh, V. I., Goldsmith, P. F., & Johansson, L. E. B. 2004, *ApJ*, 610, 329
- [160] Kawaguchi, K., Ohishi, M., Ishikawa, S.-I., & Kaifu, N. 1992, *ApJ*, 386, L51
- [161] Kawaguchi, K., Kasai, Y., Ishikawa, S.-I., Ohishi, M., Kaifu, N., & Amano, T. 1994, *ApJ*, 420, L95
- [162] Kim, H.-D., Cho, S.-H., Chung, H.-S., Kim, H.-R., Roh, D.-G., Kim, H.-G., Minh, Y. C., & Minn, Y.-K. 2000, *ApJS*, 131, 483
- [163] Kim, H.-D., Cho, S.-H., Lee, C.-W., & Burton, M. G. 2001, *JKAS*, 34, 167
- [164] Kim, H.-D., Balasubramanyam, R., & Burton, M. G. 2002, *PASA*, 19, 505
- [165] Kim, S.-J., Kim, H.-D., Lee, Y., Minh, Y. C., Balasubramanyam, R., Burton, M. G., Millar, T. J., & Lee, D.-W. 2006, *ApJS*, 162, 161
- [166] Klemperer, W. 1970, *Nature*, 227, 1230
- [167] Knez, C., Boogert, A. C. A., Pontoppidan, K. M., Kessler-Silacci, J., van Dishoeck, E. F., Evans, N. J. II, Augereau, J.-C., Blake, G. A., & Lahuis, F. 2005, *ApJ*, 635, L145
- [168] Kontinen, S., Harju, J., Heikkilä A., & Haikala, L. K. 2000, *A&A*, 361, 704
- [169] Kuan, Y.-J., & Snyder, L. E. 1996, *ApJ*, 470, 981
- [170] Lada, C. J. 1987, en *IAUS 115 Star Formation: from OB Associations to Protostars. Star Forming Regions*, eds. M. Peimbert, J. Jugaku. (Dordrecht: Reidel), p. 1

- [171] Lada, E. A. 1992, BAAS, 24, 1262
- [172] Lai, S.-P., & Crutcher, R. M. 2000, ApJS, 128, 271
- [173] Langer, W. D., Goldsmith, P. F., Carlson, E. R. & Wilson, R. W. 1980a, ApJ, 235, L39
- [174] Langer, W. D., Schloerb, F. P., Snell, R. L., & Young, J. S. 1980b, ApJ, 239, L125
- [175] Langer, W. D., & Penzias, A. A. 1993, ApJ, 408, 539
- [176] Langer, W. D., Velusamy, T., Kuiper, T. B. H., Peng, R., McCarthy, M. C., Travers, M. J., Kovacs, A., Gottlieb, C. A., & Thaddeus, P. 1997, ApJ, 480, L63
- [177] Lee, C. W., Myers, P. C., & Tafalla, M. 1999, ApJ, 526, 788
- [178] Lee, C. W., Cho, S.-H., & Lee, S.-M. 2001, ApJ, 551, 333
- [179] Lee, C. W., & Cho, S.-H. 2002, JKAS, 35, 187
- [180] Lee, H.-H., Bettens, R. P. A., & Herbst, E. 1996, A&AS, 119, 111
- [181] Lee, S. K., & Amano, T. 1987, ApJ, 323, L145
- [182] Léger, A., Jura, M., & Omont, A. 1985, A&A, 144, 147
- [183] Le Petit, F. & Roueff, E. 2003, en *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons*, ed. S. L. Guberman (New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers), 373
- [184] Leung, C. M., & Brown, R. L. 1977, ApJ, 214, L73
- [185] Li, Z.-Y., Shematovich, V. I., Wiebe, D. S., & Shustov, B. M. 2002, ApJ, 569, 792
- [186] Lide, D. R., & Mann, D. E., 1957, JChPh, 27, 868
- [187] Lilley, A. E. 1955, ApJ, 121, 559
- [188] Linsky, J. L. 1998, S&SRv, 84, 285
- [189] Lis, D. C., Roueff, E., Gerin, M., Phillips, T. G., Coudert, L. H., van der Tak, F. F. S. & Schilke, P. 2002, ApJ, 571, L55
- [190] Liu, S.-Y., Mehringer, D. M., & Snyder, L. E. 2001, ApJ, 552, 654
- [191] Liu, S.-Y., Girart, J. M., Remijan, A., & Snyder, L. E. 2002, ApJ, 576, 255
- [192] Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Faure, A., Caux, E., & Duvert, G. 2000, A&A, 359, 1169
- [193] Loinard, L., Castets, A., Ceccarelli, C., Caux, E., & Tielens, A. G. G. M. 2001, ApJ, 552, L163

- [194] Lovas, F. J., Johnson, D. R., Buhl, D., & Snyder, L. E. 1976, *ApJ*, 209, 770
- [195] Lovas, F.J. 1992, *JPCRD*, 21, 181
- [196] Lovas, F.J. 2004, *JPCRD*, 33, 177
- [197] Lucy, L.B. 1971, *ApJ*, 163, 95
- [198] Macdonald, G. H., Gibb, A. G., Habing, R. J., & Millar, T. J. 1996, *A&AS*, 119, 333
- [199] Marcelino, N., Cernicharo, J., Roueff, E., Gerin, M., & Mauersberger, R. 2005, *ApJ*, 620, 308
- [200] Marcelino, N., Cernicharo, J., Agúndez, M., Roueff, E., Gerin, M., Martín-Pintado, J., Mauersberger, R. & Thum, C. 2007, *ApJ*, 665, L127
- [201] Mardones, D., Myers, P. C., Tafalla, M., Wilner, D. J., Bachiller, R., & Garay, G. 1997, *ApJ*, 489, 719
- [202] Maret, S., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Caux, E., Lefloch, B., Faure, A., Castets, A., & Flower, D. R. 2005, *A&A*, 442, 527
- [203] Markwick, A. J., Millar, T. J., & Charnley, S. B. 2000, *ApJ*, 535, 256
- [204] Markwick, A. J., Charnley, S. B., & Millar, T. J. 2001, *A&A*, 376, 1054
- [205] Marquette, J. B., Rowe, B. R., Dupeyrat, G., Poissant, G., & Rebrion, C., 1985, *ChPhL*, 122, 431
- [206] Martín, S., Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Henkel, C., & García-Burillo, S. 2006, *ApJS*, 164, 450
- [207] Martín-Pintado, J., Bachiller, R., & Fuente, A. 1992, *A&A*, 254, 315
- [208] Martín-Pintado, J., Gaume, R. A., Rodríguez-Fernández, N. J., de Vicente, P., & Wilson, T.L. 1999, *ApJ*, 519, 667
- [209] Matthews, H. E., & Sears, T. J. 1983a, *ApJ*, 267, L53
- [210] Matthews, H. E., & Sears, T. J. 1983b, *ApJ*, 272, 149
- [211] Matthews, H. E., Irvine, W. M., Friberg, P., Brown, R. D., & Godfrey, P. D. 1984, *Nature*, 310, 125
- [212] Mauersberger, R., Henkel, C., Jacq, T., & Walmsley, C. M. 1988, *A&A*, 194, L1
- [213] McEwan, M. J., Scott, G. B. I., Adams, N. G., Babcock, L. M., Terzieva, R., & Herbst, E. 1999, *ApJ*, 513, 287
- [214] McNaughton, D., & Bruget, D.N. 1993, *JMSp*, 159, 340
- [215] Menon, T. K. 1956, *AJ*, 61, 9

- [216] Miao, Y., Mehringer, D. M., Kuan, Y.-J., & Snyder, L. E. 1995, *ApJ*, 445, L59
- [217] Millar, T. J., & Herbst, E. 1990, *A&A*, 231, 466
- [218] Millar, T. J., Herbst, E., & Charnley, S. B. 1991, *ApJ*, 369, 147
- [219] Millar, T. J., Farquhar, P. R. A., & Willacy, K., 1997, *A&AS*, 121, 139
- [220] Millar, T. J. 2003, *S&SRv*, 106, 73
- [221] Minh, Y. C., Ziurys, L. M., Irvine, W. M. & McGonagle, D. 1990, *ApJ*, 360, 136
- [222] Minowa, H., Satake, M., Hirota, T., Yamamoto, S., Ohishi, M., & Kaifu, N. 1997, *ApJ*, 491, L63
- [223] Mitchell, G. F., Huntress, W. T., Jr., & Prasad, S. S. 1979, *ApJ*, 233, 102
- [224] Morata, O., Girart, J. M., & Estalella, R. 2005, *A&A*, 435, 113
- [225] Morris, M., Turner, B. E., Palmer, P., & Zuckerman, B. 1976, *ApJ*, 205, 82
- [226] Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A. & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
- [227] Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, *JMSt*, 742, 215
- [228] Myers, P. C. 1983, *ApJ*, 270, 105
- [229] Myers, P. C., Linke, R. A., & Benson, P. J. 1983, *ApJ*, 264, 517
- [230] Myers, P. C., & Benson, P. J. 1983, *ApJ*, 266, 309
- [231] Nagaoka, A., Watanabe, N., & Kouchi, A. 2005, *ApJ*, 624, L29
- [232] Nejad, L. A. M., & Wagenblast, R. 1999, *A&A*, 350, 204
- [233] Nilsson, A., Hjalmarson, Å., Bergman, P., & Millar, T. J. 2000, *A&A*, 358, 257
- [234] Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, Å., Friberg, P., Irvine, W. M., Millar, T. J., Ohishi, M., & Saito, S. 1998, *ApJS*, 117, 427
- [235] Nummelin, A., Bergman, P., Hjalmarson, Å., Friberg, P., Irvine, W. M., Millar, T. J., Ohishi, M., & Saito, S. 2000, *ApJS*, 128, 213
- [236] Nummelin, A., Whittet, D. C. B., Gibb, E. L., Gerakines, P. A., Chiar, J. E. 2001, *ApJ*, 558, 185
- [237] Oesterling, L. C., Albert, S., De Lucia, F. C., Sastry, K. V. L. N., & Herbst, E. 1999, *ApJ*, 521, 255

- [238] Ohishi, M., & Kaifu, N., 1998, *Faraday Discussion*, 109, 205
- [239] Olberg, M., Bester, M., Rau, G., Pauls, T., Winnewisser, G., Johansson, L. E. B., & Hjalmarsen, Å. 1985, *A&A*, 142, L1
- [240] Pagani, L., Bacmann, A., Motte, F., Cambrésy, L., Fich, M., Lagache, G., Miville-Deschênes, M.-A., Pardo, J.-R., & Apponi, A. J. 2004, *A&A*, 417, 605
- [241] Pagani, L., Pardo, J.-R., Apponi, A. J., Bacmann, A., & Cabrit, S. 2005, *A&A*, 429, 181
- [242] Palumbo, M. E., Geballe, T. R., Tielens, A. G. G. M. 1997, *ApJ*, 479, 839
- [243] Pardo, J. R., Cernicharo, J., & Serabyn, E. 2001, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 49, 12
- [244] Pardo, J. R., Cernicharo, J., Goicoechea, J. R., & Phillips, T. G. 2005, *IAUS* 231, 235, 40
- [245] Pardo, J. R., Cernicharo, J., Goicoechea, J. R., Guelin, M., & Asensio, A. 2007, *ApJ*, 661, 250
- [246] Parise, B., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Herbst, E., Lefloch, B., Caux, E., Castets, A., Mukhopadhyay, I., Pagani, L., & Loinard, L. 2002, *A&A*, 393, L49
- [247] Parise, B., Castets, A., Herbst, E., Caux, E., Ceccarelli, C., Mukhopadhyay, I. & Tielens, A. G. G. M. 2004, *A&A*, 416, 159
- [248] Parise, B., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. G. M., Castets, A., Caux, E., Lefloch, B., & Maret, S. 2006, *A&A*, 453, 949
- [249] Parker, N. D. 1988, *MNRAS*, 235, 139
- [250] Pearson, J. C., Sastry, K. V. L. N., Herbst, E., & De Lucia, F. C. 1994, *JMSp*, 166, 120
- [251] Peeters, Z., Rodgers, S. D., Charnley, S. B., Schriver-Mazzuoli, L., Schriver, A., Keane, J. V., & Ehrenfreund, P. 2006, *A&A*, 445, 197
- [252] Peng, R., Langer, W. D., Velusamy, T., Kuiper, T. B. H., & Levin, S. 1998, *ApJ*, 497, 842
- [253] Penzias, A. A., Solomon, P. M., Wilson, R. W., & Jefferts, K. B. 1971, *ApJ*, 168, L53
- [254] Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., Delitsky, M. L., Pearson, J. C., & Müller, H. S. P. 1998, *JQSRT*, 60, 883
- [255] Pineau des Forêts, G., Roueff, E., Schilke, P., & Flower, D. R. 1993, *MNRAS*, 262, 915
- [256] Prasad, S. S., & Huntress, W. T., Jr. 1982, *ApJ*, 260, 590

- [257] Pratap, P., Dickens, J. E., Snell, R. L., Miralles, M. P., Bergin, E. A., Irvine, W. M., & Schloerb, F. P. 1997, *ApJ*, 486, 862
- [258] Redman, M. P., Keto, E., & Rawlings, J. M. C. 2006, *MNRAS*, 370, L1
- [259] Remijan, A. J., Hollis, J. M., Snyder, L. E., Jewell, P. R., & Lovas, F. J. 2006, *ApJ*, 643, L37
- [260] Requena-Torres, M. A., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., Martín, S., Rodríguez-Fernández, N. J., & de Vicente, P. 2006, *A&A*, 455, 971
- [261] Requena-Torres, M. A., Marcelino, N., Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Martín, S., & Mauersberger, R. 2007, *ApJ*, 655, L37
- [262] Roberts, H., & Millar, T. J. 2000a, *A&A*, 361, 388
- [263] Roberts, H., & Millar, T. J. 2000b, *A&A*, 364, 780
- [264] Roberts, H., Herbst, E., & Millar, T. J. 2003, *ApJ*, 591, L41
- [265] Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2001, *ApJ*, 546, 324
- [266] Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2003, *ApJ*, 585, 355
- [267] Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., Fuente, A., & Wilson, T. L. 2004, *A&A*, 427, 217
- [268] Rohlfs, K., & Wilson, T. L. 1986, en *Tools of Radio Astronomy*, 2 ed. (Heidelberg: Springer-Verlag)
- [269] Roueff, E., Tiné, S., Coudert, L. H., Pineau des Forêts, G., Falgarone, E., & Gerin, M. 2000, *A&A*, 354, L63
- [270] Roueff, E., Lis, D. C., van der Tak, F. F. S., Gerin, M., & Goldsmith, P. F. 2005, *A&A*, 438, 585
- [271] Rowe, B. R., Dupeyrat, G., Marquette, J. B., Smith, D., Adams, N. G., & Ferguson, E. E., 1984, *JChPh*, 80, 241
- [272] Ruffle, D. P., Hartquist, T. W., Taylor, S. D., & Williams, D. A. 1997, *MNRAS*, 291, 235
- [273] Ruffle, D. P., Hartquist, T. W., Caselli, P., & Williams, D. A. 1999, *MNRAS*, 306, 691
- [274] Rydbeck, O. E. H., Irvine, W. M., Hjalmarsen, Å., Rydbeck, G., Ellmér, J., & Kollberg, E. 1980, *ApJ*, 235, 171
- [275] Saito, S., Ozeki, H., Ohishi, M., & Yamamoto, S. 2000, *ApJ*, 535, 227
- [276] Saito, S., Aikawa, Y., Herbst, E., Ohishi, M., Hirota, T., Yamamoto, S., & Kaifu, N. 2002, *ApJ*, 569, 836

- [277] Saykally, R. J., Szanto, P. G., Anderson, T. G., & Woods, R. C. 1976, *ApJ*, 204, L143
- [278] Schenewerk, M. S., Snyder, L. E., & Hjalmarsen, Å. 1986, *ApJ*, 303, L71
- [279] Schenewerk, M. S., Snyder, L. E., Hollis, J. M., Jewell, P. R., & Ziurys, L. M. 1988, *ApJ*, 328, 785
- [280] Schiff, H. I., & Bohme, D. K. 1979, *ApJ*, 232, 740
- [281] Schilke, P., Walmsley, C. M., Pineau des Forêts, G., Roueff, E., Flower, D. R., & Guilloteau, S. 1992, *A&A*, 256, 595
- [282] Schilke, P., Groesbeck, T. D., Blake, G. A., & Phillips, T. G. 1997, *ApJS*, 108, 301
- [283] Schilke, P., Benford, D. J., Hunter, T. R., Lis, D. C., & Phillips, T. G. 2001, *ApJS*, 132, 281
- [284] Schöier, F. L., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & Blake, G. A. 2002, *A&A*, 390, 1001
- [285] Schutte, W. A., & Khanna, R. K. 2003, *A&A*, 398, 1049
- [286] Shu, F. H. 1977, *ApJ*, 214, 488
- [287] Sims, I. R., Queffelec, J.-L., Travers, D., Rowe, B. R., Herbert, L. B., Karthäuser, J., & Smith, I. W. M. 1993, *ChPhL*, 211, 461
- [288] Smith, D., Adams, N. G., Giles, K., & Herbst, E. 1988, *A&A*, 200, 191
- [289] Smith, I. W. M., Herbst, E., & Chang, Q. 2004, *MNRAS*, 350, 323
- [290] Snell, R. L. 1981, *ApJS*, 45, 121
- [291] Snyder, L. E., & Buhl, D. 1971, *BAAS*, 3, 388
- [292] Snyder, L. E., & Buhl, D. 1972, *ApJ*, 177, 619
- [293] Snyder, L. E., & Hollis, J. M. 1976, *ApJ*, 204, L139
- [294] Snyder, L. E., Hollis, J. M., & Ulich, B. L. 1976a, *ApJ*, 208, L91
- [295] Snyder, L. E., Hollis, J. M., Lovas, F. J., & Ulich, B. L. 1976b, *ApJ*, 209, 67
- [296] Snyder, L. E., Schenewerk, M. S., & Hollis, J. M. 1985, *ApJ*, 298, 360
- [297] Snyder, L. E., Kuan, Y.-J., & Miao, Y. 1994, en *The Structure and Content of Molecular Clouds*, ed. T. L. Wilson & K. J. Johnston (New York: Springer), p. 187
- [298] Snyder, L. E., Hollis, J. M., Jewell, P. R., Lovas, F. J., & Remijan, A. 2006, *ApJ*, 647, 412

- [299] Sobolev, V. V. 1960, en *Moving Envelopes of Stars*, (Cambridge: Harvard University Press)
- [300] Solomon, P. M., Jefferts, K. B., Penzias, A. A., & Wilson, R. W. 1971, *ApJ*, 168, L107
- [301] Solomon, P. M., Penzias, A. A., Jefferts, K. B., & Wilson, R. W. 1973, *ApJ*, 185, L63
- [302] Sohn, J., Lee, C. W., Lee, H. M., Park, Y.-S., Myers, P. C., Lee, Y., & Tafalla, M. 2004, *JKAS*, 37, 261
- [303] Strom, S. E., Strom, K. M., & Grasdalen, G. 1975, *ARA&A*, 13, 187
- [304] Sutton, E. C., Blake, G. A., Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1985, *ApJS*, 58, 341
- [305] Sutton, E. C., Jaminet, P. A., Danchi, W. C., & Blake, G. A. 1991, *ApJS*, 77, 255
- [306] Sutton, E. C., Peng, R., Danchi, W. C., Jaminet, P. A., Sandell, G., & Russell, A. P. G. 1995, *ApJS*, 97, 455
- [307] Suzuki, H., Kaifu, N., Miyaji, T., Morimoto, M., Ohishi, M., & Saito, S. 1984, *ApJ*, 282, 197
- [308] Suzuki, H., Ohishi, M., Kaifu, N., Kasuga, T., Ishikawa, S.-I., & Miyaji, T. 1988, *Vistas in Astronomy*, 31, 459
- [309] Suzuki, H., Yamamoto, S., Ohishi, M., Kaifu, N., Ishikawa, S.-I., Hirahara, Y., & Takano, S. 1992, *ApJ*, 392, 551
- [310] Swade, D. A. 1989, *ApJ*, 345, 828
- [311] Tafalla, M., Mardones, D., Myers, P. C., Caselli, P., Bachiller, R., & Benson, P. J. 1998, *ApJ*, 504, 900
- [312] Takagi, N., Fukuzawa, K., Osamura, Y., & Schaefer, H. F., III 1999, *ApJ*, 525, 791
- [313] Takahashi, J., & Williams, D. A. 2000, *MNRAS*, 314, 273
- [314] Talbi, D., & Herbst, E. 1998, *A&A*, 333, 1007
- [315] Talbi, D., & Ellinger, Y. 1998, *ChPhL*, 288, 155
- [316] Teixeira, T. C., Emerson, J. P., Palumbo, M. E. 1998, *A&A*, 330, 711
- [317] Tenenbaum, E. D., Apponi, A. J., Ziurys, L. M., Agúndez, M., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Guélin, M. 2006, *ApJ*, 649, L17
- [318] Terzieva, R., & Herbst, E. 1998, *ApJ*, 501, 207

- [319] Thum, C., Sievers, A., Navarro, S., Brunswig, W., & Peñalver, J. 1995, Frequency Switching at the 30 m Telescope (IRAM Tech. Rep. 228; St. Martin d'Hères: IRAM)
- [320] Tielens, A. G. G. M., & Hagen, W. 1982, A&A 114, 245
- [321] Tielens, A. G. G. M. 1983, A&A, 119, 177
- [322] Tielens, A. G. G. M., & Allamandola, L. J. 1987, en *Interstellar processes*, (Dordrecht: D. Reidel Publishing Co.), p. 397
- [323] Tielens, A. G. G. M. 2005, en *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*, (Cambridge, UK: Cambridge University Press)
- [324] Tiné, S., Roueff, E., Falgarone, E., Gerin, M., & Pineau des Forêts, G. 2000, A&A, 356, 1039
- [325] Thompson, M. A., & Macdonald, G. H. 1999, A&AS, 135, 531
- [326] Thompson, M. A., & Macdonald, G. H. 2003, A&A, 407, 237
- [327] Tucker, K. D., Kutner, M. L., & Thaddeus, P. 1974, ApJ, 193, L115
- [328] Tucker, K. D., & Kutner, M. L. 1978, ApJ, 222, 859
- [329] Turner, B. E. 1971, ApJ, 163, L35
- [330] Turner, B. E. & Zuckerman, B. 1978, ApJ, 225, L75
- [331] Turner, B. E. 1979, A&AS, 37, 1
- [332] Turner, P.H., Halonen, L. & Mills, I.M., 1981, JMSP, 88, 402
- [333] Turner, B. E. 1982, ApJ, 255, L33
- [334] Turner, B. E. 1988, en *Galactic and extragalactic radio astronomy*, 2nda ed., (Berlín & New York: Springer-Verlag), p. 154
- [335] Turner, B. E. 1989, ApJS, 70, 539
- [336] Turner, B. E. 1990, ApJ, 362, L29
- [337] Turner, B. E. 1991, ApJS, 76, 617
- [338] Turner, B. E., Pirogov, L., & Minh, Y. C. 1997, ApJ, 483, 235
- [339] Turner, B. E., Terzieva, R., & Herbst, E. 1999, ApJ, 518, 699
- [340] Turner, B. E., Herbst, E., & Terzieva, R. 2000, ApJS, 126, 427
- [341] Turner, B. E. 2001, ApJS, 136, 579
- [342] Ungerechts, H., Walmsley, C. M., & Winnewisser, G. 1982, A&A, 111, 339

- [343] Ungerechts, H., Bergin, E. A., Goldsmith, P. F., Irvine, W. M., Schloerb, F. P., & Snell, R. L. 1997, *ApJ*, 482, 245
- [344] van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, *ApJ*, 447, 760
- [345] van der Tak, F. F. S., Schilke, P., Müller, H. S. P., Lis, D. C., Phillips, T. G., Gerin, M., & Roueff, E. 2002, *A&A*, 388, L53
- [346] van der Tak, F. F. S., Caselli, P., & Ceccarelli, C. 2005, *A&A*, 439, 195
- [347] Vastel, C., Phillips, T. G., Ceccarelli, C., & Pearson, J. 2003, *ApJ*, 593, L97
- [348] Vastel, C., Phillips, T. G., & Yoshida, H. 2004, *ApJ*, 606, L127
- [349] Viggiano, A., A., Ehlerding, A., Arnold, S., T., & Larsson, M. 2005, *JPhChA*, 4, 198
- [350] Viti, S., Collings, M. P., Dever, J. W., McCoustra, M. R. S., & Williams, D. A. 2004, *MNRAS*, 354, 1141
- [351] Wakelam, V., Caselli, P., Ceccarelli, C., Herbst, E., & Castets, A. 2004, *A&A*, 422, 159
- [352] Walawender, J., Bally, J., Kirk, H., & Johnstone, D. 2005, *AJ*, 130, 1795
- [353] Walmsley, C. M., Churchwell, E., Nash, A., & Fitzpatrick, E. 1982, *ApJ*, 258, L75
- [354] Walmsley, C. M., Cesaroni, R., Churchwell, E., & Hofner, P. 1992, *Astronomy Gesellschaft Abstract Service*, 7, 93
- [355] Ward-Thompson, D., Scott, P. F., Hills, R. E., & André, P. 1994, *MNRAS*, 268, 276
- [356] Ward-Thompson, D., Motte, F., & André, P. 1999, *MNRAS*, 305, 143
- [357] Watson, J. K. G. 1967, *JChPh*, 46, 1935
- [358] Watson, J. K. G. 1977, en *Vibrational Spectra and Structure*, Vol. 6, 1 (Elsevier, Amsterdam: J.R. Durig, Ed.)
- [359] Watson, W. D. 1974, *ApJ*, 188, 35
- [360] Watson, W. D. 1976, *RvMPh*, 48, 513
- [361] Watson, W. D., & Walmsley, C. M. 1982, en *Regions of Recent Star Formation*, ed. R. S. Roger & E. Dewdney (Dordrecht: Reidel), p. 357
- [362] White, G. J., Araki, M., Greaves, J. S., Ohishi, M., & Higginbottom, N. S. 2003, *A&A*, 407, 589
- [363] Willacy, K., & Millar, T. J. 1998, *MNRAS*, 298, 562

- [364] Wilson, R. W., Penzias, A. A., Jefferts, K. B., Kutner, M., & Thaddeus, P. 1971, *ApJ*, 167, L97
- [365] Winnewisser, G., & Churchwell, E. 1975, *ApJ*, 200, L33
- [366] Winnewisser, G., & Walmsley, C. M. 1979, *Ap&SS*, 65, 83
- [367] Wlodarczak, G., Demaison, J., Heineking, N., & Császár, G., 1994, *JMSp*, 167, 239
- [368] Woodall, J., Agúndez, M., Markwick-Kemper, A., J., & Millar, T., J. 2007, *A&A*, 466, 1197
- [369] Woods, R. C., Dixon, T. A., Saykally, R. J., & Szanto, P. G. 1975, *PhRvL*, 35, 1269
- [370] Woon, D. E. 2002, *ApJ*, 569, 541
- [371] Wootten, A., Bozyan, E. P., Garrett, D. B., Loren, R. B., & Snell, R. L. 1980, *ApJ*, 239, 844
- [372] Wynn-Williams, C. G. 1982, *ARA&A*, 20, 587
- [373] Yamamoto, S., Saito, S., Ohishi, M., Suzuki, H., Ishikawa, S.-I., Kaifu, N., & Murakami, A. 1987, *ApJ*, 322, L55
- [374] Yamamoto, S., Mikami, H., Saito, S., & Kaifu, N. 1992, *PASJ*, 44, 459
- [375] Yan, J., Wang, H., Wang, M., Deng, L., Yang, J., & Chen, J. 1998, *AJ*, 116, 2438
- [376] York, D. G., & Rogerson, J. B., Jr. 1976, *ApJ*, 203, 378
- [377] Yun, J. L., & Clemens, D. P. 1990, *ApJ*, 365, L73
- [378] Zhou, S. 1992, *ApJ*, 394, 204
- [379] Zinchenko, I., Henkel, C., & Mao, R. Q. 2000, *A&A*, 361, 1079
- [380] Ziurys, L. M., Saykally, R. J., Plambeck, R. L., & Erickson, N. R. 1982, *ApJ*, 254, 94
- [381] Ziurys, L. M., Snell, R. L., & Dickman, R. L. 1989a, *ApJ*, 341, 857
- [382] Ziurys, L. M., Friberg, P., & Irvine, W. M. 1989b, *ApJ*, 343, 201
- [383] Ziurys, L. M., & McGonagle, D. 1993, *ApJS*, 89, 155
- [384] Zuckerman, B., Ball, J. A., & Gottlieb, C. A. 1971, *ApJ*, 163, L41