

Universitat d'Alacant Universidad de Alicante

Esta tesis doctoral contiene un índice que enlaza a cada uno de los capítulos de la misma.

Existen asimismo botones de retorno al índice al principio y final de cada uno de los capítulos.

Ir directamente al índice

Para una correcta visualización del texto es necesaria la versión de Adobe Acrobat Reader 7.0 o posteriores

Aquesta tesi doctoral conté un índex que enllaça a cadascun dels capítols. Existeixen així mateix botons de retorn a l'index al principi i final de cadascun deis capítols.

Anar directament a l'index

Per a una correcta visualització del text és necessària la versió d' Adobe Acrobat Reader 7.0 o posteriors.





ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR

Universitat d'Alacant Universidad de Alicante

EVOLUCIÓN DE LA MATERIA EN

EL ESPACIO: MODELOS DE

LABORATORIO PARA

APLICACIONES ASTROFÍSICAS

MEMORIA PRESENTADA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS POR D. MIGUEL ÁNGEL SATORRE AZNARALA ALICANTE 1998



Guillermo Bernabeu Pastor, Catedrático de Escuela Universitaria de Física Aplicada, del Departamento de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal de la Escuela Politécnica Superior de la Universidad de Alicante.

CERTIFICA: Que la presente Memoria, "Evolución de la materia en el espacio: modelos de laboratorio para aplicaciones astrofísicas", presentada por D. Miguel Ángel Satorre Aznar para optar al grado de Doctor en Ciencias, ha sido realizada bajo mi dirección en el Departamento de Física e Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal de la Escuela Politécnica Superior de la Universidad de Alicante.

Y para que conste a los efectos oportunos, en cumplimiento de la Legislación vigente, firmo el presente certificado en Alicante a 19 de junio de mil novecientos noventa y ocho.

Virtighan allber mon Mart

Guillermo Bernabeu Pastor

José Antonio Quintana Arévalo, Profesor Titular de Física Aplicada, del Departamento de Física Aplicada de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Alicante.

CERTIFICA: Que he sido tutor de D. Miguel Ángel Satorre Aznar que presenta la Memoria, "Evolución de la materia en el espacio: modelos de laboratorio para aplicaciones astrofísicas", para optar al grado de Doctor en Ciencias. Esta Tesis ha sido realizada en el Departamento de Física, Ingeniería de Sistemas y Teoría de la Señal de la Escuela Politécnica Superior de la Universidad de Alicante.

> Y para que conste a los efectos oportunos, en cumplimiento de la Legislación vigente, firmo el presente certificado en Alicante a 19 de junio de mil novecientos noventa y ocho.

José Antonio Quintana Arévalo

Agradecimientos.

Para llegar hasta aquí ha tenido que pasar mucho tiempo y han sido muchas las personas, que con su interés, me han ayudado a terminar este trabajo que constituye mi tesis doctoral.

El Big Bang de todo ha sido Guillermo Bernabeu, director de esta tesis doctoral. Sin él nada hubiese empezado, además sigue hoy, con su apoyo y consejos, proporcionándome energía para que me sumerja más en el mundo de la astrofísica.

Para llegar desde la gran explosión hasta la Tesis ha sido imprescindible la ayuda del profesor Dianni Strazzulla. No sólo me ha enseñado aquellos conocimientos que poseo, además gran parte del presente trabajo ha sido llevado a cabo en su laboratorio de Catania junto con su grupo (Maria Elisabetta, Franco, Pippo, John, Diovanna y Claudio). Todos ellos han hecho de mi investigación un placer, además me han ayudado tanto en los aspectos científicos como humanos durante mis estancias en Sicilia. En especial quiero agradecer a John R. Brucato por compartir, más de cerca, mis primeros pasos en astrofísica.

La base científica necesaria para aprovechar mis investigaciones la he adquirido gracias a los componentes del laboratorio de materiales fotosensibles de la Universidad de Alicante (Angel, Pedro, Mario y Juan Manuel), gracias sobre todo a José Antonio Quintana por ser mi tutor y a Jaime Javier Crespo por el título de la tesis.

Mis viajes a Catania han supuesto que dejase mis obligaciones como profesor en manos de mis compañeros, por ello mi agradecimiento a todos ellos (María Ángeles, Carlos, Manolo, Luís y Juan), especialmente a Georgina Blanes que ha compartido mis avatares desde el principio. Hago este agradecimiento extensivo al Departamento de Física Aplicada de la Universidad Politécnica de Valencia por facilitarme siempre estos desplazamientos.

También agradecer a aquellos que han sufrido mis cambios de humor y ausencias que este trabajo llevaba consigo, mis padres Pepe y Conchita y mis hermanos José y Ricardo.

Mi agradecimiento último a Carmina por compartir, además, muchas tardes de iones, moléculas y radiaciones.

Índice	
ÍNDICE	
PRÓLOGO	Universitat d'Alacant
1. SÓLIDOS DE INTERÉS ASTROFÍSI	CO 4
1.1. Introducción	
1. 2. Origen y abundancias de los eleme	entos en el espacio8
1.2.1. Nucleogénesis	
1.2.2. Nucleosíntesis estelar	
1.2.3. Inserción en el medio interestela	r
1.2.4. Abundancias	
1.3. Polvo interestelar	
1.3.1. Extinción interestelar	
1.3.2. Evolución	
1.3.3. Características fisicoquímicas	
1.4. Mantos helados	
1.5. Moléculas en el medio interestelar.	
2. IRRADIACIÓN DE IONES EN EL ES	SPACIO 39
2.1. Introducción	
2.2. Dosis en el ISM	
2.3. Dosis en los cometas	
2.3.1. Dosis durante la fase de crecimie	ento 41
2.3.2. Dosis en la nube de Oort	

ce .	
.4. Dosis en el Sistema Solar	45
2.4.1. Viento solar	45
2.4.2. Rayos cósmicos	46
2.4.3. Efecto de las magnetosferas	47
.5. Simulaciones de laboratorio	50
ROCEDIMIENTO DE LABORATORIO	53
.1. Aparato experimental en el LASp	53
.2. Técnica de análisis	55
3.2.1. Reducción de datos	55
3.2.2. Calibrado	56
.1. Introducción	58
.1. Introducción	30 58
4.2.1. Implantación de protones en silicio y silicatos	58
4.2.2. Implantación de C, N, O en silicio y silicatos	61
4.2.3. Implantación de iones en hielos.	62
.3. Aplicaciones astrofísicas	67
ES POSIBLE DETECTAR O2 Y N2 EN LOS GRANOS	
TERESTELARES?	69
.1. Introducción	69
2. Resultados	72

ice	
5.2.1. CO puro	
5.2.2. Mezclas de CO:O ₂ (1:1) y CO:N ₂	
5.2.3. Resumen de los resultados experimentales	versitat d'A ₇₈ aca
5.3. Aplicaciones astrofísicas	
5.3.1. Dosis de iones en las nubes interestelares	
5.3.2. La banda del CO	
5.3.3. La banda del CO2	
5.3.4. Búsqueda de subóxidos de carbono	
6 1 Introducción	86
6. 1. Introduccion	
6.2.1 Nuevos experimentos: CO	89 80
6.3. Aplicaciones astrofísicas	
x	
6.3.1. Resumen de resultados previos	
6.3.1. Resumen de resultados previos 6.3.2. Discusión	
6.3.1. Resumen de resultados previos 6.3.2. Discusión , CONCLUSIONES	

Introducción

PRÓLOGO

En el Laboratorio di Astrofísica Esperimentale (LASp), que se encuentra en el Osservatorio Astrofísico di Catania (Italia), donde he realizado esta Tesis se trabaja en la irradiación de hielos de interés astrofísico para realizar simulaciones de la evolución de la materia en el espacio. Este tipo de investigación no sólo tiene interés desde el punto de vista astrofísico sino también desde el punto de vista del comportamiento de la materia a bajas temperaturas (~ 10K).

Los cambios producidos en los cuerpos existentes en el espacio pueden ser debidos a reacciones entre moléculas allí existentes o debido a efectos de la radiación UV o a la de iones.

Las simulaciones de laboratorio que llevamos a cabo pretenden llevarnos a comprender la evolución de la materia en el espacio. Conseguir este objetivo no es sencillo porque además de no conocer exactamente qué efectos producen tanto la radiación como las reacciones, tampoco se conoce la composición inicial de los materiales allí presentes. Precisamente las simulaciones de laboratorio proporcionan una herramienta útil para hacernos una idea de lo que está sucediendo, comparando nuestros resultados con los obtenidos en las observaciones.

En nuestro laboratorio se trabaja con la irradiación de iones sobre hielos que se cree tienen una especial relevancia en el contexto astrofísico. En general son moléculas simples como el monóxido de carbono, el agua, etc. Los resultados de los experimentos permiten obtener conclusiones interesantes para diversas situaciones en diferentes contextos, ya sea en el medio interestelar (ISM), en objetos primitivos como cometas o en superficies heladas de nuestro Sistema Solar (SS).

Introducción

En la Tesis presento diversos experimentos que he realizado en el laboratorio así como la discusión sobre sus posibles aplicaciones en astrofísica. Los experimentos se engloban dentro de otros que el equipo de investigación está llevando a cabo y que en muchos casos son complementarios a los aquí presentados.

Esta Tesis, persigue también el objetivo de introducir aquellos conceptos básicos que permitan la incorporación a este tipo de trabajo, de personas que estuviesen interesadas en él. Cuando se inició la colaboración con el LASp se pretendía formar un núcleo de investigación en España que colaborase con el citado laboratorio con experimentos del mismo tipo que fuesen complementarios a los allí realizados.

La estructura de la tesis tratará de conseguir estos objetivos empezando con una revisión teórica donde se analizan aquellos materiales que son de interés en astrofísica, su origen y su presencia en distintos escenarios espaciales. Para que estos materiales sean modificados necesitan una energía (que nosotros conseguimos mediante irradiación con iones), por tanto también analizaré la cantidad de irradiación que pueden recibir los materiales presentes en el espacio, para justificar los órdenes de magnitud de las energías que se utilizan en el laboratorio. Por último la parte teórica nos hará ver cuáles son las condiciones en las que nos llega la información del espacio. Esta información está condicionada por la manera de obtenerla, por las fuentes que la producen y por las modificaciones que puede sufrir desde que es emitida hasta que la registramos.

La parte de los resultados, que han sido presentados en tres publicaciones en revistas internacionales, se expone precedida de una explicación sobre el procedimiento experimental en el laboratorio, donde se analiza el dispositivo

Introducción

experimental utilizado en el laboratorio, cómo se obtienen los espectros y la forma en que se tratan los datos.

Las publicaciones en sí se refieren a la implantación de iones en silicatos y en hielos, a un método indirecto de detectar oxígeno y nitrógeno y, finalmente, a una posible explicación de la emisión extendida de monóxido de carbono observado en el coma de los cometas.

1. SÓLIDOS DE INTERÉS ASTROFÍSICO

1.1. Introducción

Los elementos esenciales para la vida, además del hidrógeno (creado en el Big Bang), como el C, N, O, P y S son sintetizados en las estrellas e introducidos en el medio interestelar (ISM) por procesos de pérdida de masa. La mayor parte de estos elementos se agrupan en partículas de polvo, las cuales condensan durante el flujo estelar y crecen por superposición de átomos y moléculas provenientes de las nubes de gas interestelar. A partir del material contenido en esas nubes se pueden formar nuevas estrellas, sistemas planetarios, distintos objetos como por ejemplo cometas, o bien permanecer como nubes durante un tiempo muy largo en el medio interestelar.

Con la expresión medio interestelar entendemos aquella "región del espacio entre las estrellas de nuestra galaxia". Esta región está constituida por gas, partículas de polvo y radiación, y contiene cerca de una décima parte de la masa de la galaxia $(M_G \approx 10^{11} M_{\odot}^{-1})$. A la densidad de esta materia interestelar se le ha estimado un límite superior de alrededor de 6 x 10^{-21} kg cm⁻³ (límite de Oort), en el plano de la Galaxia.

Las características del gas están determinadas por la densidad de partículas (n), la temperatura (T) y la fase (molecular, atómica, ionizada) respecto al hidrógeno.⁽⁷⁹⁾ Estas características son determinadas por medio de las observaciones de la absorción en el ultravioleta, visible, infrarrojo y de las emisiones en las ondas de radio y milimétricas.

El gas interestelar está constituido principalmente por hidrógeno. El hidrógeno atómico neutro (HI), tiene una densidad de partículas media de $\sim 10^{-1}$ átomos cm⁻³ a la

 $^{^{1}}$ M_o≈2x10³⁰ kg es la masa del Sol

temperatura cinética de cerca de 100K, si bien pueden haber variaciones importantes cerca de este valor. En algunas regiones, como son las nubes moleculares, el gas interestelar está constituido principalmente por hidrógeno molecular (H₂) a la temperatura cinética de 10K y la densidad llega a unos valores de 10⁴ moléculas cm⁻³. En la proximidad de estrellas calientes (tipos espectrales O o B) el hidrógeno está ionizado a causa de la radiación UV emitida por la estrella. En el caso que la radiación sea uniforme en todas las direcciones, puede darse una región esférica que envuelve completamente la estrella; estas regiones se denominan regiones HII o esferas de Strömgren.⁽¹⁵⁾

Dado que el hidrógeno, en forma atómica y molecular, es el componente más abundante, se prefiere utilizar como unidad de medida de la densidad el número

$n_0 = H + 2H_2$

definido como la suma del número de átomos H y dos veces el número de moléculas H_2 presentes por cm^{3.(80)} En estas unidades la densidad media del gas resulta ser de algunos n_o .

En el medio interestelar se forman regiones relativamente frías y densas (nubes), inmersas en gas enrarecido y "caliente". De hecho, para poder mantener el equilibrio entre diversas regiones con diferente temperatura, la ley los gases perfectos requiere que el producto **nT** sea constante. La temperatura de una nube depende del mecanismo de calentamiento y enfriamiento;⁽⁸¹⁾ las nubes se calientan por el campo de radiación interestelar y por el flujo de rayos cósmicos, y enfrian por la emisión discreta de iones, átomos y moléculas y por la emisión continua de una parte del polvo. Las transiciones moleculares que enfrían el gas son generalmente rotacionales, seguidas de excitaciones por colisiones, de forma que la tasa de enfriamiento varía

como n^2 . Un pequeño cambio de densidad puede causar una sustancial pérdida de calor; esto hace aumentar el valor de la presión y disminuir la temperatura y causa una contracción de la materia en esta región con el consiguiente aumento de la densidad.

Las nubes interestelares se clasifican en función de la densidad como difusas o densas. En las nubes difusas, que tienen unas dimensiones de 3-300 pc,² la densidad del gas es $3 < n_o(cm^{-3}) < 10^3$ a la temperatura cinética T ~ 100K. En estas regiones la abundancia de moléculas H₂ es cercana a la del hidrógeno atómico. En las nubes densas, que tienen unas dimensiones de 1-200 pc, la densidad es $>10^4 cm^{-3}$ y la temperatura es T = 10-30 K. A causa de la elevada densidad dentro de estas últimas, la radiación ultravioleta está fuertemente atenuada, y en ausencia de fotodisociación, la mayor parte de los elementos en fase gaseosa se encuentran en forma molecular.

Respecto a las reacciones en las nubes, vienen limitadas por el recorrido libre medio de los componentes del gas. En las nubes interestelares el tiempo del recorrido libre medio es de $t_2 = 300/n$ para el choque entre dos partículas, donde n es la densidad de partículas y el tiempo se mide en años. Para una nube difusa (supongamos $n \sim 30 \text{ cm}^{-3}$), $t_2 \sim 10$ años; para una nube densa ($n > 1000 \text{ cm}^{-3}$) $t_2 < 0.3$ años. Si el choque se tiene que llevar a cabo entre tres partículas el tiempo es aproximadamente $t_3 = 3x10^{23}$ años, tiempo este mayor que la edad del Universo ($15x10^9$ años) para n menores de $4x10^6$ cm⁻³. Por tanto, tan solo debemos considerar reacciones en las que intervenga el encuentro entre dos partículas en las condiciones interestelares.

En las nubes moleculares del medio interestelar, las partículas de polvo heladas

(10 < T(K) < 30) constituyen los núcleos sobre los cuales los átomos y moléculas presentes en la fase gaseosa pueden condensar para formar mantos helados. La existencia de estos últimos está claramente evidenciada por la presencia de bandas de absorción en los espectros infrarrojos (IR) de fuentes estelares oscurecidas por nubes moleculares. Estas bandas, características de moléculas en el estado sólido, son atribuidas a moléculas simples como H₂O, CH₃OH, CO, OCS, CO₂. Hay otras moléculas que deben estar presentes, pero de momento son difíciles de identificar, como por ejemplo el O₂ y el N₂ que no dan señal en el infrarrojo.

El estudio de estas moléculas y su evolución con la irradiación, es de gran importancia porque las nubes moleculares al condensar forman nuevas estrellas y sistemas planetarios. En el caso de nuestro Sistema Solar, muchos de los planetas exteriores y satélites están formados por hielos compuestos de materiales como los que hemos citado. Estos hielos son también importantes constituyentes de los cometas. Para comprender su evolución debemos partir de experimentos de laboratorio que nos puedan explicar la composición actual de los mismos y que, a su vez, nos sirvan para averiguar su historia. Otros cuerpos cuya composición podremos estudiar son los asteroides, los meteoritos y las partículas de polvo interplanetario.

Por tanto, para la comprensión de las características fisicoquímicas de los mantos helados (gases depositados sobre partículas de polvo) y su estado, es de gran importancia el estudio en el laboratorio, utilizando espectroscopía IR, de los compuestos de una o más especies de interés astrofísico. También es importante reproducir las condiciones en que se encuentran en el medio interestelar: irradiación, variaciones de temperatura, etc.

Recientemente se han obtenido evidencias de la presencia de material orgánico en el polvo interestelar.(1)(2)(3)(4)(5) Este material se podría formar en las atmósferas de estrellas en las últimas etapas de su vida, pero de las observaciones se deduce que el material se destruye, en ese escenario, más rápidamente de lo que se forma; por tanto, los materiales orgánicos se deben sintetizar en el medio interestelar, seguramente en la parte interna de las nubes moleculares.

Estas nubes son, como hemos dicho, el lugar donde se generan las estrellas y las partículas de polvo que proporcionan material para la formación de cometas, asteroides y planetas. Por tanto, la composición y el destino de estas partículas tienen gran importancia: si en la atmósfera y los océanos de la Tierra primitiva estaban presentes complejas moléculas interestelares, es posible que hayan jugado un papel fundamental en la formación de las moléculas que dieron lugar al origen de la vida.

1. 2. Origen y abundancias de los elementos en el espacio

1.2.1. Nucleogénesis

De acuerdo con los modelos estándar del Big Bang caliente, durante los primeros minutos de la expansión del Universo, las reacciones nucleares que suceden a 10⁹ K permiten la formación de He a partir de los protones y neutrones primordiales. Antes del comienzo de la nucleosíntesis, protones y neutrones libres se crean y destruyen según las reacciones:

$$p + e --- n + v$$

 $p + v --- n + e$

La relación entre el número de protones y de neutrones se determina por la temperatura, y para un tiempo de ~10s tenemos $T \sim 10^{10}$ K y p/n ~ 5. En dicho

momento, esta relación permanece constante porque el campo de fotones se hace más suave y genera los pares electron-positrón necesario para dar las reacciones de equilibrio anteriores. En consecuencia la nucleosíntesis deriva hacia la formación de deuterones por la fusión de neutrones y protones.

n+p---d+ γ (γ es el fotón)

La captura de protones, neutrones y deuterones permite la producción de ³H, ³He, y finalmente ⁴He.

La abundancia del Helio primordial está determinada por el cociente entre protón y neutrón, porque los neutrones libres son capturados para la formación de ⁴He en un tiempo más pequeño que el tiempo medio de desaparición. También se pueden formar trazas de litio (Li/H aproximadamente 10⁻¹⁰); en el Big Bang no se producen elementos más pesados. Esto sucede porque no existen elementos, de masas 5 u 8 que sean estables: el ⁴He no puede formar un producto estable por la captura de un protón, un neutrón u otro núcleo de ⁴He. En particular, la producción de ¹²C está limitada por la inestabilidad de ⁸Be, y requiere la fusión casi simultánea de tres núcleos de ⁴He; son necesarias densidades de varios ordenes de magnitud por encima de la que tiene lugar en la nucleosíntesis del Big Bang para que esta fusión de tres núcleos a la vez tenga lugar a una velocidad apreciable. La velocidad de todas estas reacciones de fusión cae rápidamente conforme se está expandiendo el Universo, de manera que una vez transcurridos los tres primeros minutos no se produce más nucleosíntesis hasta la primera generación de estrellas.

La fracción de masa primordial de He prevista por el Big Bang ($Y_P \sim 0'24$) está bastante de acuerdo con las observaciones hechas de las nebulosas gaseosas, que sugieren (por extrapolación a Z=0) un valor de Y, antes de la formación de galaxias,

de aproximadamente 0'23. Estas observaciones son una pieza básica para el soporte de la teoría del Big Bang. El Helio se va produciendo en las estrellas de manera que su porcentaje va creciendo muy lentamente con el tiempo.

1.2.2. Nucleosíntesis estelar

niversidad de Alicante

En las estrellas no existen generalmente neutrones libres, por eso la nucleosíntesis tiene que llevarse a cabo entre dos núcleos cargados positivamente. En la fusión de dos núcleos existen dos fuerzas opuestas: la nuclear, que es muy fuerte pero de corto alcance, y la repulsión electrostática, debida a que los núcleos están cargados positivamente. Para que dos núcleos puedan fusionarse, deben estar suficientemente cerca y para que esto ocurra deben aproximarse a una velocidad muy alta. La velocidad con la cual se produce la fusión depende tanto de la temperatura como de la densidad. Al considerar diferentes fases de nucleosíntesis en estrellas, la temperatura que se debe alcanzar aumenta con la carga nuclear del elemento.

Las primeras reacciones nucleares que ocurren en la nueva estrella formada, son las que dan lugar a los elementos del grupo del Li (Li, Be, B), que se convierten en He a una temperatura de 10^6 K. Durante la secuencia principal de la vida de la estrella, se utiliza como combustible el hidrógeno que empieza la fusión a T $\ge 10^7$ K. El proceso de formación de He a partir de hidrógeno se da por dos cadenas de reacciones, la reacción protón-protón y el ciclo CNO. Este ciclo forma los átomos que componen las moléculas que tienen interés para nuestro estudio.

El ciclo para la formación de CNO requiere la existencia previa de 12 C (que proviene de la combustión de He) y por tanto es necesaria la presencia de materia de generaciones anteriores de estrellas. El 12 C se consume y se produce en este ciclo y puede considerarse como catalizador.



¹³N ---¹³C + e + v
¹³C + p --- ¹⁴N +
$$\gamma$$

¹⁴N + p --- ¹⁵O + γ
¹⁵O --- ¹⁵N + e + v
¹⁵N + p --- ⁴He + ¹²C

Un aspecto importante de este ciclo es que puede dar lugar a la aparición de cantidades significativas de nitrógeno. Hay que tener en cuenta que el nitrógeno es el 5° elemento por orden de abundancia, aunque no es el producto final de ninguna de las principales secuencias de combustión. Sin embargo, una estrella que está quemando hidrógeno y compuesta inicialmente por un material rico en ¹²C, producirá rápidamente nitrógeno, de acuerdo con los tres primeros pasos del ciclo anterior. A pesar de todo, el nitrógeno se consume en las siguientes fases, pero su abundancia todavía es elevada en relación con el carbono durante esta fase de evolución estelar, porque tiene una sección de captura de protones menor que la del carbono.

 ${}^{12}C + p - - {}^{13}N + \gamma$

Para la producción de elementos más pesados se necesita el helio como combustible. Esto sucede cuando en el núcleo de las estrellas, que es donde primero termina el hidrógeno, se alcanza una determinada temperatura. Ésta es el resultado de un balance de las fuerzas gravitatoria y termodinámica cuando está acabando la secuencia principal. Cuando el núcleo de la estrella, que contiene aproximadamente el 10% de la masa, alcanza la temperatura de T $\geq 2x10^8$ K, el helio empieza a quemar dando lugar al ¹²C según:

$${}^{4}\text{He} + {}^{4}\text{He} + {}^{4}\text{He} - {}^{-12}\text{C} + \gamma$$

seguido de la captura de una partícula alfa para producir oxígeno:

$$^{12}C + {}^{4}He - {}^{-16}O + \gamma$$

Aunque esta es la reacción principal, pueden darse otras reacciones también significativas, que consumen productos del ciclo CNO como son:

$$^{13}C + {}^{4}He - {}^{-16}O + n$$

 $^{14}N + {}^{4}He - {}^{-18}E + \gamma$

Cuando se acaba el He como combustible, se produce un nuevo aumento de la temperatura para restablecer el equilibrio entre las fuerzas gravitatoria y termodinámica. Si la estrella es suficientemente masiva, se pueden alcanzar temperaturas a las cuales el carbón $(5x10^8 \text{ K})$ y el oxígeno (10^9 K) fusionan para formar elementos con pesos atómicos en el rango 20-32. Es interesante resaltar que la masa crítica de estrellas en las cuales se producen estas reacciones, es del orden del valor de la masa crítica que diferencia las estrellas que producirán supernovas de aquellas que darán lugar a enanas blancas (Trimble 1991).⁽⁸²⁾ Las reacciones de combustión del carbón primario son:

$$^{12}C + ^{12}C - ^{-24}Mg + \gamma$$

 $^{12}C + ^{12}C - ^{-23}Na + p$
 $^{12}C + ^{12}C - ^{-20}Ne + ^{4}He$

que preceden a:

20
Ne + ⁴He --- ²⁴Mg + γ
 24 Mg + ⁴He --- ²⁸Si + γ

esta secuencia se denomina normalmente de combustión del neón.

Las reacciones del oxígeno primario son:



 $^{16}O + ^{16}O - ^{31}P + p$ $^{16}O + ^{16}O - ^{31}S + n$ $^{16}O + ^{16}O - ^{28}Si + ^{4}He$

Todas estas reacciones entran en competencia unas con otras. Los protones, neutrones y partículas alfa rápidamente sufren otras reacciones y el producto típico de la combustión de carbono y oxígeno es la producción del núcleo de ²⁸Si que es un núcleo estable.

 ${}^{16}O + {}^{16}O - {}^{32}S + \gamma$

El siguiente paso en la nucleosíntesis es la producción de elementos de pesos atómicos próximos al del hierro, generalmente por la combustión de silicio. Todas las reacciones de fusión que producen elementos más pesados que el hierro en la tabla periódica son endotérmicas y como consecuencia, estos elementos están enlazados más débilmente que los núcleos que los han generado. El hierro presenta la energía más grande por nucleón de todos los elementos, y no existen reacciones exotérmicas que puedan fusionar el hierro.

La generación de elementos más pesados depende de reacciones de captura de neutrones. Estas reacciones se pueden dar gracias a que estas partículas no están frenadas por las barreras de potencial electrostático, dado que los neutrones no tienen carga.

Como el neutrón es (sin la interacción con protones) inestable, las reacciones de adquisición de neutrones van acompañadas de una "transición beta" donde el neutrón se descompone en un protón, un electrón y un neutrino, aumentando en una unidad el número atómico, del elemento que había capturado el neutrón.

Los elementos más pesados que el hierro se caracterizan por un aumento de la relación n/p que llega a ser 1'6 para los más pesados (los más inestables).

El que exista esta variación en la relación n/p, desde valores cercanos a 1, pesos atómicos similares al del hierro, hasta 1'6 se puede explicar mediante los procesos que se dan en dos situaciones diferentes:

La primera, cuando la captura de neutrones se da en estrellas que estén en las etapas de combustión de helio, carbono y oxígeno, a partir de los neutrones liberados en diversas reacciones, como los que son producidos en la reacción de helio con el isótopo de carbono 13 para dar oxígeno y un neutrón, como hemos visto anteriormente. Aquí el tiempo de captura de neutrones es más grande que el tiempo para una "transición beta", produciéndose isótopos pobres en neutrones, "proceso-s".

La segunda, cuando dicha captura se produce después de una explosión tipo supernova que da lugar a una gran cantidad de neutrones. Ahora el tiempo de captura de ellos es menor que el de la "transición beta" produciendo isótopos más ricos en neutrones, "proceso-r", aumentando así la relación n/p.

1.2.3. Inserción en el medio interestelar

La secuencia de formación de elementos pesados por reacciones de fusión exotérmicas se lleva a cabo en estrellas masivas ($M>M_{\odot}$) hasta que se produce un núcleo formado por hierro. Trimble (1991)⁽⁸²⁾ examina las siete edades de una estrella de 20 M_{\odot} , desde la combustión de hidrógeno en la secuencía principal, hasta los sucesivos ciclos de combustión de He, C, N, O y Si, durante los cuales la estrella alcanza periodos de estabilidad, cada vez más cortos conforme avanzamos en los ciclos.

Las capas externas de las estrellas todavía son ricas en hidrógeno, recordando la composición inicial. Bajo la superficie existen distintas capas de material de un peso atómico cada vez mayor alrededor del núcleo de hierro. En la etapa número siete la estrella forma una supernova de tipo II.

La temperatura del núcleo aumenta a medida que éste se va contrayendo hasta que el entorno del campo de fotones es suficiente para la fotodestrucción del núcleo de hierro en partículas alfa y neutrones, absorbiendo energía y llevándolo a una implosión catastrófica que da lugar a la formación de una estrella de neutrones. Las capas exteriores de la estrella son expulsadas y aunque el hidrógeno es todavía predominante, también contienen elementos de los anteriores ciclos de combustión y productos de la evolución del "proceso-r" durante la supernova.

A pesar de que las supernovas son una fuente importante de elementos pesados, la mayor parte del material procesado que entra en el ISM no proviene de ellas, sino de estrellas de masa intermedia (M entre $1-8M_{\odot}$). Éstas son varios ordenes de magnitud más numerosas que las estrellas más pesadas y pierden gran parte de su masa cuando están en la fase de gigante roja o "rama asintótica de gigante". Los modelos aceptan, de forma general, que este tipo de estrellas no pasa de la fase de combustión de helio y, sin explotar como supernovas, evolucionan a enanas blancas expulsando material en forma de nebulosa planetaria. Los vientos de las gigantes rojas y las nebulosas planetarias son los que más contribuyen al enriquecimiento del medio interestelar (ISM) y son, también, productores de polvo.

También se emite material cuando se están formando las estrellas ya que existe una fase previa a la secuencia principal donde son estables. Esto ocurre cuando condensa el material de la nube molecular al superar sucesivamente el límite de Jeans.

Al empezar la contracción las capas que están contrayéndose son tan delgadas, que la energía que se está generando se emite en su mayor parte y la temperatura permanece constante. Cuando aumenta el espesor de las capas la temperatura aumenta hasta cerca de 2000K. En este momento tenemos una gigante roja, "fría" y poco luminosa que esta emitiendo materia al medio interestelar, por la presión de radiación, de zonas que envuelven a la "protoestrella" y que están algo por debajo de los 1000K.

Los productos de la nucleosíntesis, que son expulsados en la fase final de la vida de una estrella, sólo pueden alcanzar la superficie de la estrella si el material enriquecido se encuentra en la zona convectiva o si las capas externas son expulsadas. La estructura de una estrella que está evolucionando viene determinada fundamentalmente por su edad y masa, aunque también influyen otros factores, como la inestabilidad "pulsacional", y en el caso de las binarias, efectos de marea e intercambio de masa.

Una estrella pasa diversas etapas de pérdida de masa (dredge-up) durante la evolución de la post-secuencia principal (Iben 1983),⁽⁸³⁾ durante estas inestabilidades temporales pueden ocurrir convecciones temporales en las capas de combustión de H o He. La fase más significativa tiene lugar en la rama asintótica de gigante, en la cual la estrella tiene un núcleo compacto rico en C o en O rodeado de las capas de combustión de helio e hidrógeno y tiene una "cubierta completamente convectiva".

El pulso térmico regulado por una contracción gravitatoria provoca que la capa de combustión del helio se expanda a la zona de convección, y como resultado lleva la extracción de C a la superficie. La pérdida de masa es, con diferencia, la mayor fuente de C en el universo y de este modo constituye la unión fundamental en la

cadena de evolución, desde la síntesis de elementos a la química basada en el carbono y la vida.

Las atmósferas de las gigantes rojas contienen gas tanto en forma atómica como molecular. El monóxido de carbono es la más abundante de todas las moléculas que contienen elementos pesados: se forma rápidamente y es estable en fase gaseosa en la atmósfera estelar a temperaturas por debajo de 3000K. La energía de disociación de CO (11'1eV) es suficientemente alta como para que el enlace no se rompa en reacciones simples en la fase gaseosa. A pesar de que puede encontrarse como radical, el CO no es reactivo, de manera que su abundancia en la fase gaseosa sólo está limitada por las cantidades existentes de sus constituyentes.

Dada la abundancia y la reactividad del oxígeno y del carbono, el CO debe ser la única molécula que se puede formar en fase gaseosa. En general, las estrellas que presentan evidencias experimentales de la presencia de polvo circumestelar, se pueden clasificar como estrellas de tipo-M o estrellas de carbono, dependiendo del cociente C/O; existiendo una relación estrecha entre la clasificación de los espectros ópticos de las atmósferas estelares, y las señales del polvo (silicato o carburo de silicio) observados en el infrarrojo.

Como hemos dicho, el CO es una molécula muy estable y su formación sólo está limitada por la ausencia de uno de sus componentes; es decir, una estrella que tenga un exceso de carbono no formará otros compuestos que contengan oxígeno porque todo se encuentra en forma de CO, que se forma a temperaturas altas (aproximadamente 3000K) y es inerte. La mayor parte de las estrellas que nos encontramos tienen una mayor abundancia de oxígeno que de C -posiblemente porque cuando se produce la principal emisión de material la estrella está más

evolucionada- de forma que todo el carbono se encuentra en forma de CO y el oxígeno remanente puede interactuar con otras moléculas como el Si. Se forma de esta manera el enlace Si-O que puede presentarse de diversas formas y que nosotros denominaremos bajo el nombre general de silicatos. Al contrario de lo que ocurre con el CO que permanece en forma gaseosa, los silicatos se presentan en forma sólida, dando origen a lo que constituye el polvo interestelar.

Otra molécula de interés en el mismo contexto es el N_2 . Al igual que el CO, el N_2 es fisicamente estable y químicamente inerte, de forma que está asociado a la fase gaseosa en las condiciones que existen en las capas circumestelares. Se cree que la mayor parte del nitrógeno se encuentra en forma molecular, independientemente del cociente C/O, y su abundancia tampoco permite la formación de sólidos.

Estimaciones basadas en la etapa principal sobre la velocidad de pérdida de masa y las densidades de estrellas evolucionadas, sugieren que aproximadamente el 80% del polvo de estrellas expulsado en el ISM es rico en oxígeno (predominantemente silicatos) y el resto es rico en carbono (predominantemente carbono amorfo). La escala de tiempo para la inserción, puede ser definida como el tiempo para producir en el espacio una densidad igual a la densidad actual de polvo interestelar. Este tiempo se ha estimado en aproximadamente 10⁹años (Whittet 1992),⁽⁴⁴⁾ que es del orden de magnitud para su destrucción por impactos (aproximadamente 4·10⁵años de acuerdo con McKee 1989).⁽⁸⁴⁾ Esto sugiere que sólo el 30% de la masa refractaria que compone el polvo interestelar, proviene de una estrella. El resto puede ser sintetizado en nubes interestelares por crecimiento de capas (mantle growth).

1.2.4. Abundancias

Podemos utilizar la media de las abundancias "cósmicas" como referencia para comprobar los modelos de nucleosíntesis estelar. Las llamadas abundancias "cósmicas" son las que actualmente encontramos en el Sistema Solar (SS): éste es el sitio donde podemos determinarlas con mayor precisión.

La atmósfera del Sol proporciona una muestra representativa de los elementos presentes cuando se formó: la nucleosíntesis que pueda tener lugar en su interior apenas influye en las abundancias que se miden, excepto para el caso de elementos con "baja barrera de Coulomb" como son D, Li, Be y B. Por otro lado, se espera que los resultados sean representativos de las abundancias para todos los elementos estables, y por tanto, podrían ser representativos de las abundancias en el medio interestelar en el nacimiento del SS hace unos 4'6·10⁹años. Las listas, se suelen completar con elementos que puedan condensar tomando como referencia los valores obtenidos de meteoritos de tipo-C (condritas carbonáceas) representativos de las muestras de material sólido disponible en el SS primario.

La figura 1.1 muestra la abundancia de los elementos en función del número atómico (Z). La tendencia es una caída exponencial desde las abundancias mayores (H y He) a las menores, de los elementos con Z>30, con un rango aproximadamente de 12. Esta forma de la curva confirma que los elementos más pesados son producto de la nucleosíntesis en estrellas, con máximos en aquellos puntos donde los números másicos son múltiplos de los de las partículas alpha (¹²C, ¹⁶O, ²⁰Ne, ²⁴Mg, ²⁸Si y ³²S). El pico del hierro, centrado en Z=26, representa el punto final de la fabricación de elementos por nucleosíntesis exotérmica y el valle donde se encuentran los valores del 3-5 (grupo del Li), refleja la fragilidad de estos elementos, los cuales queman en

queman en las estrellas a temperaturas por debajo de la temperatura de inicio de la



combustión del hidrógeno.

Figura 1.1. Representación del logaritmo de la abundancia en número en el Sistema Solar frente al número atómico.⁽¹¹³⁾

En la figura 1.2 se pueden ver los histogramas correspondientes a las abundancias de algunos elementos comunes, en ella se compara la atmósfera solar con la materia difusa interplanetaria, la corteza terrestre y el cuerpo humano. Además de los elementos de la vida, también se pueden ver los metales que forman parte de los principales minerales, como el Na, Mg, Al, Si, Ca y Fe.

Los datos de la materia interplanetaria están basados en datos de meteoritos de tipo-C, que probablemente tienen su origen en los asteroides y contienen un porcentaje típico de materia carbonosa.

Los granos de polvo interplanetario, que seguramente son la materia base para la formación de cometas, contienen pequeñas cantidades de elementos pesados, pero

con una cantidad considerable de carbón: los valores que son representativos de los meteoritos y las partículas de polvo se muestran en la figura 1.2b. Los histogramas presentan similitudes y diferencias interesantes.



Figura 1.2a-d. Histogramas de abundancia para los elementos biogénicos (H, C, N, O, P y S) y los principales constituyentes de minerales (O, Na, Mg, Al, Si, Ca y Fe) para cuatro escenarios (a) la atmósfera solar, (b) condritas carbonáceas y polvo interplanetario, (c) corteza Terrestre y (d) cuerpo humano.

Las abundancias solares y condríticas (entendemos por "chondrites" un material formado por agrupaciones de granitos vidriosos de silicio, que contienen un pequeño porcentaje en masa de material carbonoso y también otros elementos en proporciones que son muy similares a las que se daban en el SS primitivo), son muy similares para los materiales que forman los minerales, haciéndonos ver que los meteoritos son restos del material que formó la nebulosa solar primitiva. La superficie de la tierra está formada por material que ha evolucionado respecto de las abundancias

condríticas, mostrando una pérdida de material gaseoso porque la gravedad no es suficiente como para retenerla y posteriormente una diferenciación por densidades al formarse un núcleo rico en hierro. El oxígeno desempeña diferentes facetas en la formación de minerales y de elementos de la vida. Es el elemento más abundante en la superficie de la tierra formando parte de, principalmente, silicatos y otros materiales (la gran afinidad del Si por el O impide la formación de un tipo de vida basado en el Si que, por otra parte, es químicamente equivalente al C). También la mayor parte del carbón disponible en la superfície de la tierra está formando carbonatos en minerales, formados por reacciones entre las rocas de la superficie y el CO2 atmosférico. Es curioso que la presencia de C, N y O en sistemas biológicos lo haga en las mismas proporciones que sus abundancias cósmicas. Los metales no están presentes en el cuerpo humano a excepción del Ca que está presente en los huesos. El único elemento que está en el cuerpo humano por encima de sus abundancias solares es el P. Por tanto, si uno quiere poner un tope por encima a la cantidad total de biomasa presente en el universo, basándose en las abundancias cósmicas, el elemento crítico podría ser el P.

1.3. Polvo interestelar

El polvo interestelar (granos) es un componente importante del medio interestelar. La relación entre la densidad de partículas de los granos y la del gas es aproximadamente 10^{-12} ,⁽³⁾ mientras que la de la masa total del polvo y la del gas es ~ 10^{-2} .⁽¹⁵⁾ El polvo representa tan solo una pequeña fracción de la masa total en el medio interestelar. Los granos son los responsables de la evolución de la materia interestelar y del proceso de calentamiento y enfriamiento de las nubes a través de emisiones de fotoelectrones, colisiones gas-partícula, absorciones y emisiones de

colisiones gas-partícula, absorciones y emisiones de radiación electromagnética. También son la principal causa de la extinción de la radiación de las estrellas que observamos detrás de nubes moleculares o inmersas en ellas.

Por otra parte, las partículas del polvo influyen en la composición química del gas en las nubes moleculares. Algunas especies, de hecho, se forman sólo después de reacciones químicas que tienen lugar en la superficie de los granos. Por ejemplo, la presencia de hidrógeno molecular en fase gaseosa es atribuida a reacciones H-H que se producen sobre los granos. Estas reacciones son exotérmicas y no pueden darse directamente en fase gaseosa. En definitiva, el polvo mantiene en fase sólida algunos elementos que posibilitan reacciones químicas que alteran la composición de la fase gaseosa.

1.3.1. Extinción interestelar

Hay extinción continua cuando la radiación electromagnética se propaga en un medio que contiene partículas pequeñas. En general, la intensidad del haz trasmitido se reduce a causa de dos procesos físicos: absorción y difusión (scattering). Cuando un fotón es absorbido, su energía se convierte en energía interna de la partícula, que de esta manera se calienta. Mientras que cuando un fotón es difundido, simplemente se ve desviado de su dirección de propagación.

La dependencia espectral de la extinción continua, conocida como la curva de extinción, depende de las dimensiones de la partícula.

La polarización que tiene la radiación estelar muestra que al menos un componente de los granos, responsable de la extinción, tiene propiedades ópticas anisótropas, debidas probablemente a la forma alargada de los granos y al alineamiento de estos mismos, producido por el campo magnético de la galaxia.

A pesar de esta evidencia, en los modelos se consideran partículas esféricas de radio **a** distribuidas uniformemente, con la densidad de partículas n_d por unidad de volumen, a lo largo de la dirección de observación de una estrella lejana. El número de partículas contenido en una columna cilíndrica de longitud L y de sección unitaria es $N_d=n_dL$. Considerando un diferencial de longitud dL, la reducción de la intensidad de la radiación estelar I viene definida por la ecuación

$$\frac{dI}{I} = -n_d C_{ext} dI$$

donde C_{ext} es la sección eficaz de la extinción y tiene las dimensiones de una longitud al cuadrado. Integrando la ecuación anterior encontramos

$$I = I_o e^{-i}$$

donde I_o es el valor inicial de I y $\tau = n_d C_{ext} L = N_d C_{ext}$ es la profundidad óptica de la extinción debida al polvo.

Se define el factor de eficiencia de la extinción Q_{ext} como el cociente entre la sección eficaz de la extinción y la sección eficaz geométrica

$$Q_{ext} = \frac{C_{ext}}{\pi a^2}$$

La eficiencia de extinción, y así la sección eficaz de la extinción, viene dada por la suma de factores correspondientes a la absorción y la difusión

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{sca}$$

Estos factores dependen de dos cantidades: un parámetro adimensional, ligado a las dimensiones **a** de la partícula, $\mathbf{x} = 2\pi a/\lambda$, donde la λ es la longitud de onda de la radiación incidente, y un parámetro ligado a la composición, que es el índice de refracción complejo **m**= **n** -i**k**. Las cantidades **n** y **k** son generalmente función de la

longitud de onda. Para materiales dieléctricos (k \approx 0), el índice de refracción depende poco de λ . Los hielos y los silicatos están entre los materiales más importantes en astrofísica que pueden ser considerados como dieléctricos (k<0'05). Para partículas pequeñas del orden de la longitud de onda x <<1 (límite de Rayleigh), los factores de eficiencia están dados por⁽¹⁶⁾

$$Q_{abs} \approx 4x$$
$$Q_{sca} \approx \frac{8}{3}x^4 \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right)^2$$

En partículas constituidas por material dieléctrico, **m** es real y casi constante, por tanto, $Q_{ext} = Q_{sca} \propto x^4 \propto \lambda^{-4}$ en el límite de partícula pequeña. En general, la cantidad (m²-1)/(m²+2), para materiales que no son fuertemente absorbentes, depende poco de la longitud de onda, y así $Q_{abs} \propto \lambda^{-1}$ frente a $Q_{sca} \propto \lambda^{-4}$.

1.3.2. Evolución

Los materiales que aparecen en las observaciones en el IR, han mostrado que las partículas de polvo se forman en las atmósferas de las estrellas en fase evolutiva de postsecuencia principal³ (gigantes de tipo espectral avanzado, nebulosas planetarias, etc.). El polvo expulsado de la atmósfera estelar se mezcla, en tiempo muy breve, con el medio interestelar, donde los valores de temperatura y densidad pueden favorecer la formación de material refractario amorfo.

En atmósferas ricas en oxígeno (es decir en aquellas atmósferas donde el oxígeno está en una proporción mayor que el carbono) se forman partículas de silicatos amorfos; en las ricas en carbono (el C>O) se forman partículas de material

³ Secuencia principal: periodo de fusión del hidrógeno en el núcleo de una estrella

carbonoso como grafito, carbono amorfo, PAHs (hidrocarburos aromáticos policíclicos). Estos materiales forman los granos en los que se condensan los gases a causa de las bajas temperaturas a las que se encuentran.

Se ha estimado que la vida media de una nube molecular (nube densa) es decir, el tiempo que tardaría todo el material en condensar en la superficie de los granos si no sufriese ningún otro tipo de proceso, varía entre 3×10^7 y 5×10^8 años.⁽³⁾ Este tiempo es inferior al tiempo de vida media del polvo en el medio interestelar; es decir, el tiempo de supervivencia en el medio interestelar antes de la formación de una nueva estrella (aproximadamente 2×10^9 años). Deducimos que el material interestelar pasa cíclicamente de regiones densas a regiones difusas, de 2 a 20 veces, antes de ser "destruido" para la formación de estrellas o de cuerpos celestes, como planetas, satélites, cometas y asteroides, en caso de que se forme un sistema planetario. Algunas observaciones han mostrado que en los granos de las nubes moleculares, para las cuales T~ 10K, se forman mantos helados, bien por deposición directa de moléculas ya formadas, haciendo crecer el material en la superficie (por ejemplo CO) o bien como consecuencia de reacciones que involucren especies que condensan a partir de la fase gaseosa en los granos (por ejemplo H u O) y que reaccionan formando moléculas simples como H₂O, CH₃OH.

Asumiendo que la especie química que choca con el grano tiene la probabilidad casi unitaria de quedarse, la velocidad de aumento de los mantos helados, es decir el tiempo necesario para que condense todo el gas en los granos, resulta ser $\sim 10^9/n_o$ años.⁽¹⁷⁾ A pesar de que este tiempo es inferior a la vida media de una nube molecular, las observaciones muestran que no todo el gas está condensado al mismo tiempo en los granos de las nubes moleculares. Esto implica que debe haber algún mecanismo

capaz de retornar a la fase gaseosa átomos y moléculas después de condensarse en los granos. Entre las hipótesis dadas está la de las interacciones con la radiación UV y los rayos cósmicos, la de las colisiones grano-grano, la de la presencia de una fuente de calor que esté próxima (estrella en formación), o bien la de un continuo cambio de materia entre el interior más frío (T~10 K) y el exterior (T~25K) del núcleo de la nube.⁽¹¹¹⁾

La radiación ultravioleta (UV) y los rayos cósmicos interaccionando con los mantos helados pueden provocar la formación de otras especies, inicialmente no presentes en el medio. Así, la composición química de los mantos varía notablemente de la del gas que lo envuelve. Los mantos helados son volátiles, y de hecho, no han estado nunca observados en el medio interestelar difuso, donde pueden ser fácilmente destruidos por desabsorbimiento con fotones⁽¹⁸⁾ y por ondas de choque de baja velocidad. En esta región los granos están recubiertos de material orgánico refractario que contiene grupos CH₃, CH₂, C=O, y probablemente, OH. La transformación de los mantos helados en material orgánico refractario es atribuida a la interacción con la radiación UV y con partículas de gran velocidad (keV-MeV), como los rayos cósmicos de baja energía.⁽³⁾⁽¹⁹⁾

1.3.3. Características fisicoquímicas

El polvo interestelar se puede dividir en dos clases según sea su origen. La primera está constituida por el polvo estelar expulsado de estrellas gigantes, nebulosas planetarias y novas, compuestas de silicatos, grafito y carbón amorfo. A la segunda clase pertenece el polvo que se forma en el mismo medio interestelar, ya sean los mantos helados que se forman en las mismas superficies de los granos en las
nubes moleculares, ya sea el material refractario constituido por moléculas complejas que recubre los granos en el medio interestelar difuso.

En el medio interestelar difuso, cerca de la mitad del polvo está constituido por silicatos amorfos; la otra mitad está compuesta de material carbónico, como el grafito, carbón amorfo y/o mantos orgánicos. Dentro de las nubes moleculares, los mantos helados pueden contener hasta el 40% del carbón y del oxígeno presente.

La mayor parte de la información que hay sobre el polvo deriva del estudio de la curva de extinción y de las observaciones espectroscópicas. La primera da, sobre todo, información sobre las dimensiones y la forma de las partículas de polvo. Los modelos teóricos prevén que los granos tengan una forma elipsoidal con una distribución en dimensiones

donde n(a)da es el número de granos por unidad de volumen con un radio en el intervalo $a \rightarrow a + da$.⁽²⁰⁾ Estos modelos son, por desgracia, poco sensibles a la composición química del polvo.

La mayor parte de los conocimientos sobre la composición química de los granos deriva del estudio de los espectros infrarrojos en absorción. El potencial de esta técnica de análisis se debe a muchos factores:

a) Cada grupo funcional absorbe a una o más frecuencias características. Es decir, el espectro de cada grupo tiene unas señales que le caracterizan; es como si fuese una "imprenta digital" para su identificación, que da información sobre su composición química.

b) Para las dimensiones típicas del grano en el infrarrojo, la extinción es debida principalmente a la absorción, mientras que la difusión tan sólo tiene un papel importante si trabajamos en el UV y visible. La absorción es directamente proporcional al volumen del grano y al número total de grupos funcionales presentes. El efecto de la partícula pequeña⁽²¹⁾ sobre la sección de choque de la absorción,⁽¹⁷⁾ producido por la forma y las dimensiones de los granos, es despreciable porque el valor del oscilador para las transiciones vibracionales que se producen, en particular para materiales amorfos, es pequeño.

c) Del perfil (posición, anchura y forma) de las bandas de infrarrojo se puede obtener información sobre la estructura (amorfa o cristalina), la temperatura y sobre eventuales procesos energéticos sufridos por las partículas de polvo.

1.4. Mantos helados

Las partículas de polvo frías (10 < T(K) < 30), en el interior de las nubes densas, constituyen los núcleos sobre los cuales los átomos o las moléculas presentes en fase gaseosa pueden condensarse para formar los mantos helados. Según algunos modelos, los núcleos tienen unas dimensiones ~0'05 µm y llegan a ~0'12 µm cuando se forman los mantos helados.⁽²²⁾ En fase gaseosa la molécula más abundante es el hidrógeno, que se encuentra principalmente en forma molecular (H₂). La abundancia del hidrógeno atómico es inversamente proporcional a la densidad total (figura 1.3). Después del hidrógeno molecular, el monóxido de carbono es la molécula más abundante, seguido por oxígeno y nitrógeno, tanto en forma atómica como molecular.

Algunas especies, por ejemplo hidrógeno y oxígeno atómico, una vez condensadas, gracias a su elevada movilidad, pueden reaccionar fácilmente con otras menos móviles para formar nuevas moléculas, de forma que la composición química

del hielo difiere bastante de la del gas. Por ejemplo, el agua es la especie más abundante en forma sólida. Su presencia en los granos es atribuida a reacciones químicas que tienen lugar en la superficie del grano, más que a un depósito directo de la fase gaseosa. Tan sólo algunas moléculas, presentes en los mantos helados, condensan directamente en la fase gaseosa; de hecho, tal como están actualmente las observaciones, tan sólo el CO puro puede ser incluido entre éstas, aunque los modelos teóricos prevén la presencia de O_2 y N_2 en los mantos helados, a causa también de la condensación directa. Estas moléculas de un solo componente, no presentan banda de absorción y su identificación en los granos no es fácil.



Figura 1.3. Composición molecular de las nubes interestelares, en función de la densidad, en fase gaseosa y en los mantos helados.⁽²⁷⁾

Hay modelos teóricos que prevén que la composición química de los mantos helados depende de la del gas que los envuelve, que al mismo tiempo, depende de su densidad (figura 1.3). Estos modelos están, en general, de acuerdo con todo lo que se

deduce de las observaciones, aunque presenten algunos inconvenientes. El más grave en este momento, es la presencia de CH₃OH (metanol), que se ha identificado en los granos interestelares en diversas ocasiones,⁽¹⁷⁾⁽²³⁾⁽²⁴⁾⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾ ya que según los cálculos teóricos, los mantos están constituidos por H₂O, H₂CO, N₂, O₂, CO, CO₂, H₂O₂.⁽²⁷⁾

La composición química exacta depende de las condiciones de la fase gaseosa:

- Para densidades n < 10^3 cm⁻³, el hidrógeno atómico es más abundante que las especies más pesadas (O, O₂, CO) y el gas es altamente reductor. En estas condiciones se forman sobre los granos especies hidrogenadas, como H₂O, H₂CO, CH₃OH (?).

- Para densidades mayores (n > 5 x 10^4 cm⁻³), la cantidad de hidrógeno atómico es inferior a la de las especies más pesadas, y las moléculas que se forman en los granos no son hidrogenadas. En este caso, la composición de los mantos depende del cociente entre la abundancia del oxígeno atómico y molecular (el oxígeno atómico es el radical móvil más abundante después del hidrógeno). Si el cociente es menor que la unidad (atmósfera inerte), la composición de los mantos refleja la de la fase gaseosa (CO, O₂, N₂); si es mayor (atmósfera oxidante), O y CO reaccionan y el dióxido de carbono (CO₂) resulta ser el constituyente principal de los mantos.

La mayor parte de los conocimientos que hoy en día tenemos de los mantos helados deriva de observaciones espectroscópicas en el infrarrojo. Uno de los objetos más estudiados son las protoestrellas, ya que aún están inmersas en la nube de polvo y gas de la cual se han formado. La estrella en formación calienta el polvo que la envuelve y emite en el infrarrojo un pseudocontinuo. Cuando la radiación atraviesa las regiones más externas y más frías de la nube, es absorbida a las frecuencias fundamentales de las moléculas en estado sólido que están presentes. De esta forma,

el espectro que observamos indica las condiciones y la composición química de la nube. Esta situación se ilustra en la figura 1.4.

También son de gran interés las observaciones de las estrellas que se encuentran, respecto al observador, detrás de nubes de materia. Son las denominadas estrellas de campo. En este caso existe la oportunidad de estudiar el polvo en un estado no influido por fuentes luminosas que están en sus alrededores.



Figura I.4. Representación esquemática de la obtención de los espectros de hielos interestelares en astrofísica.

La combinación de las masas de los átomos que cósmicamente son más abundantes (H, O, C, N), con los tipos de enlaces que pueden formarse entre éstas, da como resultado las frecuencias fundamentales de vibración dentro del intervalo espectral 4000-500 cm⁻¹ (2'5-20µm)⁴; sin embargo, para todas las moléculas que se forman, no todo este intervalo es observable desde la Tierra, a causa de la absorción de la atmósfera.

Algunas regiones son observadas con telescopios montados en aviones (Kuiper Airborne Observatory, KAO) o con observaciones espaciales (InfraRed Astronomical Satellite, IRAS, y el Infrared Spatial Observatory, ISO), que proporcionan visión en todo el intervalo espectral.



Figura 1.5. Espectro en el infrarrojo de una nube molecular típica (NGC7538E), de 2 a $14\mu m$.⁽¹²⁾

⁴ El número de onda v(cm⁻¹) está definido como $1/\lambda$ donde λ es la longitud de onda de la radiación electromagnética.

La figura 1.5 muestra un ejemplo de un espectro IR de una fuente inmergida en una nube molecular. En el espectro se pueden ver las bandas de absorción (3'05; 4'67; 6'0; 6'85 μ m) atribuidas a las moléculas (H₂O, CO, CH₃OH) que forman parte de los mantos helados. La banda de 9'7 μ m se atribuye a los silicatos que constituyen los granos sobre los cuales se forman los mantos.

A lo largo de la dirección de observación de fuentes oscurecidas por nubes moleculares se ponen de manifiesto diversas bandas de absorción. En la tabla 1.1 se presentan las posiciones de las bandas observadas, el modo vibracional y la especie responsable de esta absorción. En todas las direcciones de observación parece que el H_2O sea la molécula más abundante en fase sólida. En la tabla 1.2, se presentan las absorbancias de diversas moléculas individualizadas en fase sólida presentes en los mantos helados, relativas a la molécula de H_2O . El intervalo de variación de la abundancia refleja la diversa composición de los granos a lo largo de la dirección de observación.

En las nubes densas, los mantos helados sufren la interacción con radiación ultravioleta (>6 eV) y también con iones y electrones energéticos (keV-MeV; rayos cósmicos de baja energía). El modelo teórico descrito anteriormente prevé la composición química de los mantos, considerando tanto la composición del gas como las posibles reacciones químicas entre las moléculas condensadas en el grano. La interacción con fotones UV y'rayos cósmicos provoca posteriores efectos en los mantos. De hecho, estos agentes externos causan la ruptura de las moléculas presentes que, recombinándose, forman nuevas especies, más volátiles que refractarias. En este proceso se forman abundantemente los radicales OH y NH₂, químicamente activos, que dan lugar a la formación de otras moléculas.

Se ha de tener en cuenta que, muchas veces, para poder interpretar los datos observados, hemos de recurrir al estudio de las modificaciones inducidas en los mantos helados por la interacción con la radiación UV y los rayos cósmicos.⁽²⁴⁾⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾⁽³⁰⁾ Todo esto se representa en la figura 1.6.

CRECIMIENTO Y EVOLUCIÓN DE LOS MANTOS HELADOS



La irradiación con fotones UV y rayos cósmicos produce moléculas complejas



Figura I.6. Representación esquemática de la estructura y la evolución de los mantos helados en las nubes moleculares.

v(cm ⁻¹)	λ(μ m)	Modo vibracional	Molécula	Referencia	locant
4125	2'42	Combinación sobre-tono	CH ₃ OH	31	lacalit
3367	2'97	Estiramiento N-H	NH3, aminas, amidas	32, 16	Alicant
3300	3'03	Estiramiento O-H	H ₂ O, CH ₃ OH	32, 16, 33	
2985	3°35	Estiramiento C-H	CH₃OH	34	
28 80	2'47	Estiramiento C-H en carbono terciario	"diamante"	25	
2825	3`54	Combinación	CH₃OH, H₂CO	25, 35, 36	
2600	3'85	Combinación	СН3ОН	25	
2540	3'94	Estiramiento S-H	CH ₃ OH H ₂ S	25	
2343	4'67	C=O	CO ₂	41,42	
2166	4'62	C=N	XCN, OCN	37, 29, 38	
2140	4'67	C=O	со	37, 30, 39	
2041	4'90	Sobre-tono C-O	XCS, C ₃ , CN CH ₂ OH_OCS	23, 22	
1818	5'50	Estiramiento C=O	HCO, HOCO	16	
1660	6'00	Acercamiento O-H	H ₂ O	16	
1460	6`85	Deformación C-H	СН3ОН	16	
		Estiramiento asimétrico CO3 ⁻	Carbonatos	16	
1315	7'60	Deformación C-H	CH ₄	33	
1123	8*90	Enrollamiento CH ₃	CH ₃ OH	26	
1020	9'80	Estiramiento C-O	CH ₃ OH	26	
1000	10,0	Estiramiento Si-O	silicatos	34	
740	13'5	Libration	H ₂ O	43	
658	15'2	Acercamiento O=C=O	CO ₂	41,42	
435	23'0	Acercamiento Si-O-Si	silicatos	44	

Tabla 1.1. Posición de las bandas de absorción observadas en los mantos helados y moléculas a las que corresponden

Especies	Abundancia	Referencias
H ₂ O	100	
CO	0-40	45 niversidad de Alican
СН ₃ ОН	~10	7, 16
ocs	0'04-0'1	46
CH ₄	1-3	33
H ₂ CO	3	36
NH ₃	<5	47
CO ₂	~20	41, 42
XCN	1-8	29
H_2S	0'3	48
	1	

Tabla 1.2. Composición de los mantos helados. Las abundancias están dadas respecto a $H_2O=100$.

1.5. Moléculas en el medio interestelar

El medio interestelar tiene como componente más abundante el hidrógeno en forma atómica; seguido, como molécula fundamental, del monóxido de carbono (CO) en fase gaseosa. Éste está presente en cualquier dirección de observación, aunque no uniformemente distribuido. A la temperatura ambiente normal de las nubes moleculares presenta una banda en el IR cerca de 2140 cm (4°67µm) mediante la cual se identificó en 1984.⁽³⁷⁾

Teniendo en cuenta que también están presentes en cantidades importantes tanto el nitrógeno como el oxígeno, en las nubes moleculares se forman compuestos que derivan de reacciones con éstas, tal como H₂O, CO₂, H₂CO₃ las bandas de los cuales ya hemos visto en la tabla 1.1, donde está indicado a qué número de onda

corresponden. Estos compuestos se han identificado con las observaciones en el IR. Los compuestos de combinación con el nitrógeno, como CN, han sido identificados con más dificultades.

Otras moléculas que también se encuentran en el medio interestelar son las que están compuestas por azufre. Un ejemplo de este tipo es el sulfuro de carbonilo (OCS), que es una molécula común en fase gaseosa, tanto en regiones relativamente estables como en aquellas de formación estelar. La identificación de esta banda tampoco es fácil y algunas simulaciones proponen que se identifique con azufre (S),⁽²⁴⁾ mientras que otros⁽²³⁾ lo hacen con C₃, CN o bien CH₃OH.

Como hemos visto, recientemente las observaciones con el ISO han permitido la identificación de dióxido de carbono en multitud de fuentes, de forma que esta molécula también será importante en el estudio de los materiales en distintos escenarios en el espacio.

2. IRRADIACIÓN DE IONES EN EL ESPACIO

2.1. Introducción

Durante el tiempo de residencia en distintos lugares en el espacio desde su génesis hasta que se encuentran formando parte de algún cuerpo (como cometas o superficies de planetas), el material recibe irradiación de varias fuentes. La irradiación recibida lo modifica pudiéndose formar nuevas moléculas. Es, por tanto, necesario evaluar la dosis recibida por estos materiales.

Evaluaremos a continuación la irradiación recibida en tres escenarios, en el ISM, en los cometas y en el SS.

2.2. Dosis en el ISM

El medio interestelar (ISM) tiene como constituyentes partículas de silicatos, tal y como muestran, por ejemplo, los espectros de IR de estrellas frías evolucionadas. Estas zonas son lugares donde las partículas de silicatos (radio ~0'05µm) se forman y son expulsadas al medio interestelar difuso (0'1<n_{Htot} $<10^3$ cm⁻³). La contracción de la nube desde la fase difusa a la densa (por encima de 10⁴ cm⁻³) y el descenso de la temperatura de 100 a 10K permite que las partículas frías condensen sobre el núcleo de silicio formando una partícula que se estima del orden de 0'12µm.

Como hemos visto se estima que el tiempo de vida medio de una nube molecular está comprendido entre 3×10^7 y 5×10^8 ó más (Greenberg 1982).⁽³⁾ Esto es como si el grano, pasase de la fase difusa a la densa entre 2 y 20 veces antes de que la nube condense para formar una estrella. Por tanto el tiempo de vida medio de un grano es de unos 10^9 años.

Supongamos que el grano pasa unos 5×10^7 años en una nube densa (por ejemplo $n_o \sim 10^4 \text{cm}^{-3}$) donde crecen las capas congeladas pudiendo ser parcialmente convertidas en material refractario por irradiación de iones y 5×10^7 años en las nubes difusas donde el material orgánico puede ser alterado aun más, dado que aquí sí puede penetrar la radiación UV. Supongamos que este ciclo ocurre unas 10 veces.

El flujo de los rayos cósmicos de baja energía que irradian los granos en el medio interestelar no se conoce con exactitud. Como se ve en detalle en (Jenniskens et al. 1993),⁽⁶⁾ se asume un flujo de protones J (E= 1MeV) = 3 cm⁻²s⁻¹; el rango de penetración de un protón de 1 MeV es del orden de 10^{-2} - 10^{-3} cm para materiales orgánicos de densidad 1 g/cm³ (Ziegler 1980),⁽⁷⁾ es decir mucho mayor que el tamaño típico del grano. Por tanto, la radiación de 1MeV, protón cósmico, pasa a través del grano depositando parte de su energía. De acuerdo con las suposiciones anteriores el tiempo de residencia del manto refractario es de aproximadamente mil millones de años en el medio interestelar y está sometido a un flujo total (de protones de 1MeV) de aproximadamente 10^{17} cm⁻². La pérdida específica de energía de estos protones en un material típico que contenga átomos pesados (C, N, O, Si) es del orden de 10^{-14} eV cm²/átomo. Esto implica que la energía total depositada en 10^{9} años es ~ 10^{3} eV/molécuła.

Los mantos helados están expuestos a una dosis menor que el material refractario que acabamos de ver; por una parte sólo están expuestos a radiación en la parte densa de la nube (ya que cuando el material pasa a la parte difusa -T ~100K- los hielos que no se han transformado en material refractario subliman y al no estar en la fase sólida no les afecta la irradiación) y por otra pueden ser destruidos en su interior por choques o por sublimación, dejando de recibir irradiación. De forma que su

tiempo de vida se estima entre 10^5 años, que es el tiempo necesario para que todos los gases de la nube condensen sobre el grano, y $5x10^8$ años, que es el tiempo de vida de la nube, tras el cual se estima que se formará una nueva estrella. De este modo la cantidad de radiación recibida equivale a una dosis total comprendida entre 0'1 y 45 eV/molécula.

Si como se piensa, el manto refractario sobrevive a la fase de la nube difusa se puede llegar a formar un manto de material carbonoso sobre la superficie que puede formar parte de diversos cuerpos celestes como los cometas.

2.3. Dosis en los cometas

El material que los compone, que como ya se ha dicho proviene de los granos del ISM, se ve modificado por la irradiación recibida en dos escenarios; por un lado, durante su fase de crecimiento y por otro durante su estancia en la nube de Oort.

2.3.1. Dosis durante la fase de crecimiento

Vamos a analizar qué sucede cuando los granos del medio interestelar se unen para formar cuerpos más grandes como cometas que, a grandes rasgos, conservan la impronta de sus componentes.

El crecimiento se da durante la formación del Sistema Solar (SS), aunque la forma en que esto sucede no está muy clara y no se ha establecido si los granos precometarios se destruyen primero y después se reforman (Yamamoto 1991)⁽⁸⁾ o si formarán parte de los cometas tal y como habían terminado su procesado en el ISM.

En cualquier caso parece ser que en la superficie del núcleo refractario pueden condensar nuevos materiales (gases congelados) antes de formar fragmentos más grandes. También es posible que este proceso tenga lugar cuando el Sol es todavía

muy activo, por ejemplo durante la llamada fase T-Tauri (Strazzulla 1986; Strazzulla and Johnson 1991).⁽⁴⁾⁽⁹⁾ Strazzulla (1986)⁽⁴⁾ usó un flujo de protones (E>1MeV) $J=10^{10}$ cm⁻²s⁻¹ a 1 unidad astronómica (UA) (variando con el inverso del cuadrado de la distancia) y el tiempo de duración de la fase T-Tauri de 10⁶ años.

La energía depositada por los iones en los materiales que están formando los cometas, depende de la forma en que tenga lugar el proceso de crecimiento. Para dar una primera estimación, suponemos que los cometas se forman en 10⁶ años (durante la fase T-Tauri) a la distancia de 50UA del Sol. Por tanto el flujo de protones de 1-MeV será Φ = 10¹⁰ (cm⁻²s⁻¹)(50)⁻²(3'2x10⁷) (años⁻¹s) \approx 10¹⁴(cm⁻²años⁻¹). Podemos imaginar dos escenarios diferentes para la formación de los cometas (radio $a_{máx}$ =10⁵cm):

Primer escenario: los cometas se forman por un continuo y directo crecimiento al ir uniéndose otros granos precometarios interestelares. En este caso se espera que aparezcan grandes heterogeneidades, ya que mientras el grano está creciendo es recubierto rápidamente por otros que lo preservan de la radiación. De esta forma los granos que han sido rápidamente recubiertos por otros sufren una irradiación menor que aquellos que se unen más tarde. La variación del radio del cometa es **da/dt** = 0°1 cm año⁻¹ y **D**=10⁻¹⁴ (eV cm²/mol) 10¹⁴ (cm⁻²año⁻¹) t = **10** a(t), es la energía depositada por molécula (donde **a** se expresa en cm). Así, una partícula en **a** = 1m sufre una dosis de 1000eV, para **a** = 1km tenemos una dosis de 1.000.000 eV. Esta dosis es mayor que la sufrida en el ISM, pudiendo formar grandes cantidades de carbono amorfo, aunque la transformación no es lo suficientemente grande como para evitar heterogeneidades. No debemos perder de vista que la dosis recibida por los cometas es la suma de la que aquí se ha calculado más la sufrida en el ISM.

Segundo escenario: se forman cometas infinitesimales de radio cada vez mayor que, cuando tienen un radio ~1cm, se van uniendo entre sí. En este caso, la irradiación recibida depende del tiempo empleado para formar un "cometesimal" de radio ~1cm, ya que al unirse entre sí sólo aquellos que quedasen en el exterior seguirían recibiendo algo de irradiación. Como hemos visto antes, el espesor de la capa que recibe esta irradiación debe estar entre 10^{-2} y 10^{-3} cm.

Que nosotros sepamos no existe en la literatura, una estimación del tiempo necesario para formar estos cometesimals. A partir de ahora se estimará en 10⁴ años para aquellos que tienen un radio aproximadamente de 1 cm; 10⁵años para que crezcan hasta un tamaño de aproximadamente 10m y en 10⁶años se formarán cometas de 1km de radio. Como no existen evidencias que justifiquen estas estimaciones, los cálculos de las dosis deben considerarse como una estimación.

En este escenario la irradiación del material es más homogénea. De hecho sólo se consideran los primeros 10^4 años, durante los cuales los "cometésimals" de ~1cm están sujetos a una dosis de 10^4 eV/mol, mientras la radiación posterior debe ser menos importante. Así, se espera que existan heterogeneidades en el interior de celdas del orden de los cm. Está claro que, también en este caso, la irradiación por partículas debe jugar un papel importante en el procesado de granos precometarios o en el procesado de granos cometarios "ex novo", si se hubiesen destruido y vuelto a formar en el SS.

2.3.2. Dosis en la nube de Oort

Por último, los cometas son modificados durante su larga estancia en la nube de Oort en la que también están sometidos a radiación. Una vez que se han formado, los

cometas son expulsados a la nube de Oort donde están expuestos durante ~4'6x10⁹años al flujo de los rayos cósmicos. Strazzulla y Johnson (1991)⁽⁹⁾ estimaron que las capas externas (0'1-0'5m) están sujetas a una radiación de 600eV/molécula. Las capas más internas están sometidas a una dosis menor por que los iones más abundantes son los de menor energía y son detenidos en las capas externas.

Aunque esta dosis es menor que la que han sufrido en fases precedentes, su efecto puede ser importante para la fisica de los cometas. Se ha sugerido (Strazzulla y Johnson 1991; Johnson, et al. (1987))⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾ que un cometa que está expuesto a radiación en la nube de Oort consigue un entramado de material no volátil que puede dar lugar a la formación de una corteza consistente.

Los experimentos de irradiación de muestras con espesores mayores que el rango de penetración de los iones con los que se irradia (Strazzulla et al. 1991)⁽¹¹⁾ muestran que se puede obtener una corteza de material orgánico, que permanece aun después de sublimar los hielos que han quedado por debajo. Esto da soporte a la hipótesis de que los iones pueden producir una corteza orgánica que puede sobrevivir a la eliminación de gas desde las capas más internas, de forma que dicha corteza sería tan antigua como el mismo cometa.

Además la espectroscopía Raman revela que la corteza orgánica también se forma durante el bombardeo a baja temperatura y, por tanto, la corteza del cometa puede ser formada durante su estancia en la nube de Oort y su formación no requiere un primer paso (calentándolo) en la parte interna del SS (Spinella et al. 1991; Strazzulla et al. 1991).⁽¹²⁾⁽¹³⁾

2.4. Dosis en el Sistema Solar

Aquellos objetos que se encuentran en un sistema solar pueden verse modificados, fundamentalmente, por tres tipos de irradiación: El viento solar, los rayos cósmicos y las partículas que quedan atrapadas a grandes velocidades en las magnetosferas.

2.4.1. Viento solar

En el Sistema Solar (SS) existen distintos tipos de irradiación que pueden afectar a los materiales presentes en él. En general, cualquier cuerpo en cualquier sistema planetario puede verse sometido a una radiación por parte de partículas conocidas como *viento solar* y que son desprendidas de la estrella, en nuestro caso el Sol. Estas partículas pueden ser capturadas por los campos magnéticos de los planetas o los satélites, siendo una importante fuente de irradiación que afecta a las superficies que, en el caso de algunos satélites de los planetas exteriores, están formadas fundamentalmente por hielos.

El viento solar consiste en un *plasma* –mezcla neutra de iones (principalmente hidrógeno con una menor, pero significativa, presencia de iones más pesados) y electrones-calientes (alrededor de 100.000K). La fuente que los genera es la atmósfera del Sol, llamada *corona*, de forma que el viento solar está continuamente presente en el espacio interplanetario. Después de escapar del campo gravitatorio del Sol, este gas se aleja radialmente a una velocidad alrededor de 450km/s (energías del orden de los keV) a distancias, que por el momento se conocen, de por lo menos 45 UA (~7 x 10^9 km). Aunque la velocidad de movimiento de las partículas es independiente de la distancia al Sol, se producen fluctuaciones en la velocidad de

forma que los flujos más rápidos se superponen a los más lentos, produciendo fenómenos de choque.

Aunque el Sol emite en todas las direcciones radialmente, el hecho de que esté girando hace que la emisión de gas tome la forma de una espiral de Arquímedes. En la órbita de la Tierra la espiral toma un ángulo de 45° de la línea radial respecto al Sol y llega a ser prácticamente perpendicular a partir de la órbita de Saturno (9'5 UA).

En el caso de la órbita de la tierra la densidad de partículas de iones y electrones en el espacio interplanetario tiene un valor de ~5 partículas/cm³ en condiciones de estabilidad. Esta densidad de población disminuye con el inverso del cuadrado de la distancia respecto al Sol. De todas formas se pueden producir variaciones de órdenes de magnitud, dependiendo de la actividad solar.

2.4.2. Rayos cósmicos

A principios de siglo se encontró una radiación misteriosa cuya presencia se incrementaba en la atmósfera terrestre con la altitud, a la que se denominó como rayos cósmicos. Aunque su presencia en los alrededores de la tierra es muy pequeña, algunas partículas de rayos cósmicos por centímetro cuadrado, sus energías pueden llegar a los miles de millones de eV. Estos rayos se producen en catástrofes como supernovas y posteriormente se aceleran con ondas de choque. Estas partículas también se pueden producir en llamaradas en el Sol, aunque sus energías tan solo son del orden de algunos millones de eV, siendo considerados rayos cósmicos de baja energía.

Los rayos cósmicos de mayor energía se denominan primarios y son los únicos que se detectan en la superficie terrestre, aunque de forma indirecta a partir de los

llamados rayos cósmicos secundarios que son los producidos por los primarios con energías de $\sim 10^9$ eV que interactúan con nuestra atmósfera.

Parece ser que el Sol actúa como modulador de la radiación de rayos cósmicos que llegan a la Tierra, de forma que existe un máximo de éstos en los periodos de menor actividad solar. Este efecto de repulsión de rayos cósmicos es menor cuanto más nos alejamos del Sol, desapareciendo este efecto a una distancia estimada de ~100 UA. Este lugar donde empieza a desaparecer la zona de actuación del Sol y comienza la zona interestelar se denomina *heliopausa* y el espacio que queda encerrado en su interior *helioesfera*.

Cuando atravesamos la heliopausa los efectos observados deben ser distintos. En el medio interestelar la dirección, composición, temperatura y velocidad del viento, ahora llamado viento interestelar, es distinta de la del viento solar. Además, la intensidad y el espectro de la radiación cósmica se hará constante, debido a que se supone que el medio interestelar es una media de muchos tipos de contribuciones, sin que prevalezca una en concreto. Por último, la radiación cósmica debe ser mayor que en cualquier punto de la helioesfera, dado que ha desaparecido la acción del Sol.

En el SS, además de la influencia del Sol, el campo magnético de los planetas influye significativamente en la radiación que llega hasta sus superficies.

2.4.3. Efecto de las magnetosferas

El efecto de partículas cargadas y con una determinada velocidad, viene condicionada por la interacción de esas partículas con el campo magnético del planeta o satélite que se está estudiando.

En general, un planeta puede generar un campo magnético si se cumplen dos condiciones: ser un cuerpo que gira y tener que tener un interior eléctricamente conductor, que esté caliente y sea fluido, de manera que puedan producirse acca movimientos de convección.

En estos campos magnéticos pueden quedar confinadas partículas durante un cierto periodo de tiempo. Estas partículas, con energías comprendidas entre 10keV y 10 MeV, pueden modificar materiales que se encuentren con ellas. Además estos campos previenen la interacción directa de la superficie del planeta con el viento solar.

El efecto del confinamiento de partículas es importante en el caso de los planetas exteriores porque no sólo sus campos magnéticos son mayores que los de la Tierra, sino porque algunos de sus satélites con superficies formadas fundamentalmente por hielo están en el interior de sus magnetosferas.

A continuación, se discuten algunos aspectos sobre esta irradiación en los objetos del SS externo.⁽¹⁴⁾

El campo magnético de Júpiter incluye en su interior a Io; este satélite emite, fundamentalmente, partículas sulfuradas que quedan confinadas dentro del campo magnético de Júpiter, es lo que se conoce como "toro" de Io.

Las superficies de Europa, Ganímedes y Calixto, también pueden ser afectadas por partículas cuyos flujos han sido medidos por el Voyager.⁽¹⁰²⁾⁽¹⁰³⁾⁽¹⁰⁴⁾⁽¹⁰⁵⁾ Es muy posible que la diferencia entre la reflectancia de la parte de avance y la posterior de los satélites Europa y Ganímedes sea debida a la diferente radiación de los dos hemisferios.

En cuanto a Saturno, cálculos detallados muestran que los procesos de fotodisociación, pérdida y transporte de las especies erosionadas pueden explicar bien la producción de un "toro" de iones pesados en la magnetosfera interna como se observa en los experimentos de plasma del Pioneer y el Voyager.

Los efectos de los fotones UV, electrones y partículas cargadas en interacción con Titán podrían ser la causa de la producción y condensación de gases orgánicos.

Se sabe que Iapetus es el objeto con las características fotométricas más extrañas en el SS. La parte de la superficie que está en el hemisferio que se encuentra en la parte de avance, es una de las superficies más oscuras, mientras que el hemisferio opuesto es tan brillante como la nieve. La superficie oscura podría estar formada por cromóforos orgánicos producidos por radiación UV de hielo rico en metano, siendo el valor de albedo el resultante de distribuciones balísticas en la superficie en respuesta a un gradiente en el flujo de impactos.

En cuanto a Urano, el Voyager 2, en su aproximación al planeta y sus lunas, descubrió cinturones de radiación más intensas que las de Saturno, comparables a los cinturones de Van Allen en la Tierra y altos flujos $(10^6-10^7 \text{ iones cm}^{-2}\text{s}^{-1})$ de, casi exclusivamente, protones a energías mayores de 500keV.

Una primera explicación de la coloración oscura de las superficies sólidas, es que durante la fase T-Tauri, los flujos de iones existentes, podrían haber formado estas capas de material orgánico a profundidades de varios centímetros. Después de esta fase, una mayor radiación de protones podría haber oscurecido la superficie progresivamente.

De Neptuno se conocen 8 lunas, dos de las cuales, Tritón y Nereida, han sido las más estudiadas.

La atmósfera de Tritón contiene metano y nitrógeno congelado. Se ha sugerido que una capa congelada de metano, localizada en la superficie puede ser alterada por iones energéticos (rayos cósmicos) y formar una corteza orgánica.

En Nereida se han descubierto, por parte de Cruikshank y colaboradores,⁽¹⁰⁶⁾ bandas que podrían ser asignadas a CO y CO_2 congelado. La detección de CO, podría ser consistente con la idea de que el satélite tiene una composición similar a la de un cometa, con lo que el satélite podría ser un cometa capturado.

Finalmente el sistema Plutón-Caronte, presenta características diferentes para cada una de las superficies. Plutón tiene una superficie rica en metano congelado, en contraste con Caronte que la tiene fundamentalmente compuesta por agua. Caronte presenta hemisferios con dos colores diferentes, la cara que da a Plutón aparece de color neutro y el hemisferio opuesto rojo, parecido a Plutón.

Si Plutón y Caronte tienen el mismo origen, entonces los mismos procesos tienen que haber alterado la superficie de dos modos distintos. Según la irradiación con rayos cósmicos de la superficie de Plutón, se produce una capa oscura de material orgánico de varios centímetros de profundidad. En el caso de Caronte dada la ausencia de atmósfera, el metano que estaba originalmente en la superficie de Caronte sublimó y escapó de la superficie.

2.5. Simulaciones de laboratorio

La composición de la materia en el espacio se observa, generalmente, mediante espectros infrarrojos. Una herramienta muy importante para la comprensión de dichos espectros, la proporciona el estudio en el laboratorio de la irradiación de hielos que puedan estar presentes en diversos escenarios; es decir, gas o mezclas de gases que se hacen condensar en un sustrato a baja temperatura (T = 10-200 K). Las moléculas

más utilizadas son aquellas que se han encontrado en los espectros IR de las nubes moleculares, o que se piensa que pueden ser componentes abundantes de la fase gaseosa y/o sólida de distintos objetos en el espacio. También tienen mucho interés para la astrofísica las modificaciones inducidas en el hielo debidas a la irradiación con iones rápidos o rayos UV.⁽⁴⁹⁾⁽⁹⁾

En las simulaciones de laboratorio nos encontramos con el problema de reproducir algunos parámetros astrofísicos, como la composición y el estado físico (presión, temperatura, densidad) de la muestra a estudiar, y las condiciones de exposición a radiación, UV y/o iones rápidos. La composición inicial no es un parámetro fácil de reproducir porque no se conoce con exactitud qué sucede en los mantos helados de las nubes densas. Por otra parte, en el laboratorio la muestra se obtiene haciendo depositar en un sustrato a baja temperatura las moléculas de interés, pero como se ha dicho antes, la mayor parte de las moléculas presentes en los mantos helados se forman por reacciones químicas que se producen sobre los mismos granos.

Cuando se estudian las modificaciones producidas por los rayos cósmicos, en el laboratorio se han de reproducir la masa y la energía de los iones incidentes, la dosis total dada a las moléculas del blanco (eV molécula⁻¹), el número de partículas incidentes por unidad de área (flujo integral en iones cm⁻²) y el flujo (iones cm⁻² s⁻¹). El flujo de rayos cósmicos de baja energía (protones de 1 MeV) en el medio interestelar se estima de cerca de ~3 iones cm⁻² s⁻¹,⁽⁶⁾ mientras el flujo mínimo que puede obtenerse en el laboratorio vale ~10¹⁰ iones cm⁻² s⁻¹, y por tanto, no tiene sentido extrapolar a los escenarios astrofísicos todos los efectos que dependen de la tasa de energía incidente (eV mol⁻¹ s⁻¹).

A pesar de todas las dificultades descritas, los experimentos de laboratorio permiten obtener algunas informaciones valiosas, como son:

- La absorbancia integrada, para numerosos materiales de interés.

- Poder confrontar los resultados obtenidos con los datos observados.
- Crear modelos que definan la evolución de los objetos estudiados.

Cabe subrayar que encontrar una muestra que reproduzca perfectamente los resultados observados, puede ser completamente falta de significado si el modelo no prevé y justifica la presencia de la mezcla estudiada, en el contexto astrofísico examinado.

3. PROCEDIMIENTO DE LABORATORIO

Universitat d'Alacant

Los resultados experimentales que se presentan en este trabajo se han obtenido en el "Laboratorio di Astrofisica Sperimentale", (LASp, Catania). En este capítulo veremos una breve descripción del aparato experimental del LASp y de las técnicas de análisis utilizadas. (Para más detalles que tengan que ver con el procedimiento experimental y con las técnicas de calibrado se recomienda ver los trabajos de Strazzulla & Baratta (1991),⁽⁵⁰⁾ Spinella y al. (1991),⁽⁵¹⁾ Palumbo (1992)⁽⁵²⁾).

3.1. Aparato experimental en el LASp

El aparato experimental del Laboratorio di Astrofisica Sperimentale está representado esquemáticamente en la figura 4.1. Está constituido por una cámara portamuestras (cámara de vacío) que puede ponerse en el interior de un espectrofotómetro de IR y que permite obtener "in situ" y sin mover la muestra, espectros de IR de la especie que se ha depositado sobre el sustrato (T = 10-300 K) y, eventualmente, irradiarla con iones producidos en un cañón iónico.

La cámara portamuestras está constituida por un cubo de acero inoxidable, de 7'5 cm de lado, en el que se puede llegar a un vacío por debajo de los 10^{-7} mbar. En ella se coloca un dedo frío de cobre (10-300 K) conectado a un criostato al helio. Sobre el dedo está superpuesto el sustrato, transparente a la radiación infrarroja, generalmente de silicio cristalino (1,1,1), pulido y de un grosor de 500 µm, sobre el cual se hacen condensar las especies que queremos estudiar. El gas o la mezcla de gases a depositar, preparados en una cámara de mezcla, se introducen en la cámara de

vacío a través de una válvula que permite regular el flujo, y por tanto, la velocidad de

depósito del gas en la superficie.



Figura 3.1. Representación esquemática del aparato experimental.

Los espectros, en el intervalo 4400-400 cm⁻¹ (2'27-25 µm), se adquieren con un espectrofotómetro de IR de Transformada de Fourier (FTIR). Perpendicularmente a la dirección del haz IR está dispuesto un cañón que acelera iones con una diferencia de potencial que puede llegar a 30 keV. El área de la muestra golpeada por los iones (2 x 2 cm²) es mayor que la atravesada por el haz de IR. Para bombardear la muestra se utilizan iones que no condensen en el dedo frío en las condiciones de temperatura y presión del experimento que se está llevando a cabo. Los datos presentados en el siguiente capítulo se refieren a muestras irradiadas con diversos iones que llegan a

una energía de hasta 60keV. La cantidad de iones que llegan a la muestra es medida mediante una jaula de Faraday. En los experimentos llevados a término, la corriente de los iones varía en el intervalo 0'3-3'0 μ A cm⁻² (para evitar el calentamiento de la muestra), y la cantidad de energía depositada (dosis) entre pocos y algo más de un centenar de eV/16amu. Esta última viene expresada como energía depositada (eV) por molécula pequeña (16amu) del blanco, para así poder comparar los resultados del laboratorio relativos a la irradiación del blanco, compuesto de una o más moléculas de distinto peso molecular.

La superficie del dedo frío forma un ángulo de 45° con el haz IR y con el haz de iones, de forma que se puedan adquirir espectros durante la irradiación sin hacer girar el portamuestras. Como la profundidad de penetración de los iones es pequeña en los materiales estudiados, cerca de 50nm, y una muestra de este grosor no permitiría el estudio de las bandas de absorción menos intensas, se hace necesario irradiar el blanco mientras depositamos. De esta forma podemos obtener una muestra que, con el grosor de unas decenas de micras, esté enteramente irradiada, con lo que presentará un buen espectro de IR.

3.2. Técnica de análisis

3.2.1. Reducción de datos

Los espectros de absorción que adquirimos con el espectrofotómetro representan la transmitancia en tanto por ciento, en función del número de onda. Durante la adquisición se tiene en cuenta el espectro de fondo; es decir, el espectro del sustrato y del aire que el haz IR atraviesa en su curso de la fuente al detector. Para reducir la cantidad de vapor de agua y de dióxido de carbono que el haz IR encuentra

en la cámara del espectrofotómetro, se utiliza un flujo de aire seco y depurado de dióxido de carbono. El espectro final se obtiene sustrayendo la intensidad de la radiación transmitida cuando está la muestra, por la del espectro de fondo.

Para el estudio de los datos resulta conveniente representar la profundidad óptica ($\tau = \alpha x$) en función del número de onda. En este punto debemos normalizar el continuo del espectro obtenido, para poder cambiar las variables a representar en el gráfico. Para los espectros normalizados utilizamos la relación:

$$T = e^{-\alpha x}$$

donde la T es la transmitancia normalizada, α es el coeficiente de absorción con dimensiones del inverso de la longitud y x es el grosor de la muestra.

La elección del continuo es arbitraria y constituye una fuente de error muy dificil de eliminar. En cualquier caso, cuando son reducidos diversos espectros que se refieren al mismo experimento o a experimentos equivalentes, se ha buscado elegir el continuo coherentemente para poder obtener resultados consistentes.

3.2.2. Calibrado

Para poder evaluar la abundancia de una especie presente en el portamuestras, se utilizará de ahora en adelante en el estudio del espectro IR, la absorbancia integrada de una de las bandas más intensas de la misma especie. La absorbancia integrada A (cm/molécula) de una banda en absorción está definida por la relación:

$$A = \frac{\int \tau_v dv}{N}$$

donde $\int \tau_{\nu} d\nu$ (cm⁻¹) representa el área de la banda y N (moléculas cm⁻²) es la medida del grosor. El área integrada es medida mediante un programa de cálculo; el espesor,

relativo al espectro adquirido a tiempos conocidos, lo obtenemos de la velocidad de depósito de las especies en examen. Esta última es obtenida depositando la especie y midiendo su grosor, a partir de las franjas de interferencia producidas por el haz de un láser ($\lambda = 632.8$ nm), reflejado en la interfase vacío-muestra y muestra-sustrato.⁽⁵¹⁾

Estas medidas dan el grosor en centímetros; para poder sacar N de éstas, se ha de conocer la densidad de la muestra. La determinación de la densidad de un determinado compuesto es de gran interés en astrofísica, ya que permite el conocimiento tanto de la absorbancia integrada (y/o los coeficientes de absorción) que se extrae de los espectros astronómicos observados, como de las abundancias de columna (molécula cm⁻²) de las especies responsables. Los valores de la absorbancia integrada para las especies consideradas en este trabajo se presentan en la tabla 3.1.

Molécula	Molécula Modo vibracional		λ(μ m)	A (10-17 cm/	molé)
				biblio, ^(49,109)	LASp ⁽²⁸⁾
H_2O	Estiramiento O-H	3300	3'03	20	21
	Combinación	2205	4'53	0'33	
	Acercamiento O-H	1655	6'04	1	1'1
	Libration	810	12`34	2'8	2'8
со	Estiramiento C=O				
	en hielo puro de CO	2139	4'68	1	1'1
	en hielo de H ₂ O	2136	4`67	1'7	>1'5
OCS	Estiramiento C=O	2025	4'94	15	
	Estiramiento C=S	857	11'67	0'13	
	Ecercamiento O-C-S	514	19'4	0'18	
CH₃OH	Estiramiento O-H	3260	3'07	13	11
	Estiramiento C-H	2961	3'38	2'1	1'1
	Estiramiento C-H	2829	3'53	0'53	0'4 '
	Deformación O-H	1460	6'84	1'2	0'8
	Acercamiento O-H	1460	6'84	1'2	0'8
	Enrollamiento CH3	1129	8'86	0'18	
	Estiramiento C-O	1031	9'70	1'8	1'4
	Torsión	735	13'6	1'4	
CO_2	Estiramiento C=O	2340	4'27	14	
	Acercamiento C=O	656	15'24	2	

Tabla 3 1	Proniedades	espectroscón	vicas de a	lounas mo	léculas e	n estado	sólido
Laura J.L.	1 Toprodados	opportoscop	noas ao a	igunas mo	novunas v	n vouauo	sonuo

4. IMPLANTACIÓN DE IONES REACTIVOS Y NO REACTIVOS EN SILICATOS Y HIELOS

4.1. Introducción

En el espacio hay muchos lugares, incluyendo el polvo interestelar y los objetos planetarios, donde partículas energéticas (keV-MeV) pueden colisionar con superficies sólidas formando materiales refractarios (carbonosos y/o de silicatos) y/o gases congelados sobre esas superficies. El estudio de los efectos que produce la irradiación iónica se basa en simulaciones de laboratorio, donde utilizamos partículas rápidas cargadas para bombardear muestras adecuadas bajo condiciones físicas más o menos similares a las astrofísicas.⁽⁵³⁾⁽⁵⁴⁾

En este capítulo presentamos algunos resultados de una serie de experimentos, realizados en el laboratorio, sobre la implantación de iones reactivos (H, C, N, O) y no reactivos (He, Ar) en silicatos y hielos de interés astrofísico.

4.2. Resultados experimentales

4.2.1. Implantación de protones en silicio y silicatos

A partir de experimentos de laboratorio se ha propuesto que la observación del estiramiento-SiH es una forma de comprobar la implantación de protones en superficies de objetos planetarios sin atmósfera.⁽⁵⁵⁾ El número de onda del estiramiento varía desde 2278 cm⁻¹ (4'39 μ m), en silicatos oxidados, a 2110 cm⁻¹ (4'74 μ m), en sólidos reducidos.⁽⁵⁵⁾⁽⁵⁶⁾

En un trabajo precedente se presentaban los resultados experimentales de la banda del estiramiento Si-H por implantación de iones H^+ (1'5 keV) en silicio,

cuarzo, palagonita y feldespato.⁽⁵⁷⁾ Aquí se acompañan para poder compararlos con los nuevos resultados obtenidos.

La figura 4.1a muestra el espectro de transmisión de IR en la región de 1800-2300 cm⁻¹ (5'56-4'35 μ m), de un monocristal de silicio (111; de 600 μ m de espesor) y de cuarzo, feldespato y palagonita después de la implantación de 7'5x10¹⁶ H⁺ (1'5keV)/cm².

La muestra implantada de cuarzo era una ventana de aproximadamente 4mm de espesor. La palagonita y el feldespato se prepararon por presión de polvo de estos minerales en un trozo de KBr que previamente se había preparado para obtener muestras de algunas micras. La palagonita es un termino geológico muy amplio, asociado con frecuencia a un gel de silicio amorfo hidratado que contiene componentes de hierro (Fe³⁺), formada por la alteración de material volcánico máfico. La muestra utilizada se recogió del volcán Etna: se trata de material piroclástico de su historia eruptiva expuesto a la intemperie. El feldespato se puede conseguir comercialmente y es una mezcla de la ortoclasa (feldespato de K) y la albita (feldespato de Na).

También hemos irradiado olivino (preparado como una capa de polvo en KRS-5 por ablación con un láser a partir de un poco de muestra) y moscovita, que es un filosilicato del cual hemos obtenido muestras que se soportan por sí mismas y que son del orden de las µm. Sus espectros se muestran en la figura 4.1b. En la figura 4.1 se ve claramente que las muestras seleccionadas, excepto el silicio puro, no presentan ninguna evidencia clara de la banda del estiramiento Si-H. En el caso del cuarzo sólo presenta su espectro en la banda 2100-2300 cm⁻¹ (4'76-4'35 µm) porque el cuarzo es opaco a números de onda más bajos.





Figura 4.1. Espectro de transmitancia IR (1800-2300cm⁻¹) (a) de varias muestras después de irradiación con 7'5x10¹⁶ H⁺ (1'5keV)/cm². (b) de olivino y moscovita después de la implantación de H⁺ (a 30 y I'5keV respectivamente) a las dosis dadas.

Estos resultados parecen ir en contra de la posibilidad de hallar bandas espectrales en asteroides (o cometas) debidas a grupos Si-H por implantación de los protones del viento solar en superficies formadas por silicatos.

A pesar de eso planeamos experimentos en distintas muestras de silicio (amorfo y policristalino) y silicatos en diferentes condiciones experimentales (temperatura,

rugosidad de la superficie y preirradiamiento con diferentes iones), para ver si diferentes condiciones pudiesen favorecer la aparición de dicha banda.

4.2.2. Implantación de C, N, O en silicio y silicatos

Algunos resultados experimentales de la implantación de iones de C de 40keV en granos de SiO₂ en películas delgadas muestran la formación de CO y CO₂ por enlaces formados por los proyectiles y los átomos de oxígeno lígados a la red. ⁽⁵⁴⁾⁽⁵⁸⁾



Figura 4.2. (a) Espectro IR de silicio implantado con: a) $75x10^{16}$ H⁺ (30keV)/cm²; b) $1^{1}x10^{17}$ C⁺ (30keV)/cm²; c) $2^{2}2x10^{16}$ N⁺ (14keV)/cm²; d) $1^{7}x10^{17}$ O⁺ (30keV)/cm²; e) $15x10^{16}$ Ar⁺ (100keV)/cm²; f) $15x10^{16}$ Ar²⁺ (60keV)/cm². (b) Espectro de transmitancia IR (2100-2400cm⁻¹) de cuarzo antes y después de la implantación de C⁺ (30keV) a las dosis dadas.

61

Estas moléculas son identificadas por la aparición en el espectro de IR de unas bandas situadas en 2143 cm⁻¹ (CO) y ~ 2350 cm⁻¹ (CO₂).

En principio, los experimentos estaban pensados para implantar iones de C, N, O en silicio y silicatos. En la figura 4.2a se muestran los resultados obtenidos en silicio. Se observa que los iones implantados pueden formar enlaces con el Si que hay en la muestra. Para ver que la aparición de la banda no es debida a que la muestra ha deshecho parte de su estructura, también bombardeamos la muestra con iones no reactivos de Ar (las curvas de la parte inferior en la figura 4.2a).

Respecto a los silicatos, en la figura 4.2b presentamos los resultados obtenidos por la implantación de C⁺ de 30 keV en cuarzo: se ve la formación de CO y CO₂ por la aparición de bandas situadas en ~ 2140 cm⁻¹ (CO) y en ~ 2350 cm⁻¹ (CO₂). El C⁺ implantado utiliza la energía disponible no sólo para destruir el enlace sino también para formar los compuestos con el oxígeno.

4.2.3. Implantación de iones en hielos

Strazzulla et al.⁽⁵⁹⁾ presentaron algunos resultados de la implantación de iones de nitrógeno en hidrocarburos congelados mezclados con agua. Observaron la formación de una banda ancha cerca de 2130 cm⁻¹ tanto para la mezcla aceite (hidrocarburos alifáticos)- agua como para la de benceno (hidrocarburo aromático)agua. La atribución de la banda no está clara porque en esa región absorben, tanto el estiramiento X-C=N y el X-C=C-H, como el CO congelado.⁽²⁸⁾

Para ver si se trata de estos componentes nada más y no del CO, se podría calentar la muestra para sublimar el CO, ya que tiene una temperatura de sublimación mucho más pequeña, pero esta prueba no es definitiva porque el CO puede quedar

puede quedar atrapado en la matriz y evaporar a una temperatura más alta de la que le corresponde, por tanto esta prueba no permite separar las contribuciones.

Para intentar separarlas se podrían irradiar hidrocarburos puros. De hecho cuando se irradia benceno con iones de helio aparece una banda a 2113 cm⁻¹ que es atribuida a acetilenos monosustituidos (X-C=C-H),⁽⁵⁰⁾ y que también aparece en las pruebas hechas por Strazzulla et al.⁽⁵⁹⁾ como uno de los dos picos a 2113 cm⁻¹ y 2140 cm⁻¹.





En otro grupo de experimentos irradiamos CO_2 y mezcla de $H_2O:CO_2$ (1:1). En la figura 4.3 se muestra el espectro de esta mezcla no irradiada, junto a la obtenida
después de la irradiación con iones de helio (3keV) a dos dosis diferentes: se ve claramente la aparición, después de la irradiación, de nuevas bandas que evidencian la formación de nuevas especies. El CO se detecta fácilmente a partir de la banda de 2140 cm⁻¹. El resto de las nuevas bandas están cerca de la misma posición que detectaron Moore y Khanna,⁽⁶⁰⁾ cuando irradiaron la mezcla $H_2O:CO_2$ (1:1) con protones de 700 keV. En su experimento, el espesor de las capas bombardeadas era del orden de las 4 µm, más pequeño que el rango de penetración de los iones utilizados.

Como el poder de frenado (stopping power) de los protones de 700 keV en la mezcla es del orden de 30 eV cm² 10^{-15} moleculas⁻¹ y como que el experimento ha sido llevado a término con un flujo total de 1'5x 10^{15} protones cm⁻², tenemos que la dosis que utilizaron era ~12 eV/16amu.

Después de la irradiación observaron nuevas bandas: el monóxido de carbono se identificó juntamente con algunos radicales y ácido carbónico (H_2CO_3). Ésta es una de las moléculas de las que no se conocía su espectro IR antes de este trabajo.

Con nuestros experimentos se demuestra que los iones con los que bombardeamos, proporcionan la energía de activación necesaria (~ 50 kcal mol⁻¹) para que se pueda formar el ácido a baja temperatura. Éste puede permanecer como tal aún después de calentar la muestra irradiada a 215-250K, pudiéndose obtener un film residual, cuyas bandas de IR se piensa que corresponden al ácido carbónico. Recientemente se ha confirmado esta atribución⁽⁶¹⁾ a partir de la protonación del bicarbonato e identificado su espectro por espectroscopía FTIR.

Las similitudes del espectro que nosotros mostramos en la figura 4.3 con el que aparece en la referencia⁽⁶⁰⁾ se muestran en la tabla 4.1. En ella se presentan las

posiciones de los picos (a baja temperatura) de las nuevas bandas que se han formado (primera columna), junto a las observadas en nuestros experimentos con helio (columna 2). Las columnas 3 y 4 contienen los datos obtenidos por irradiación con protones como discutiremos posteriormente. En la última columna se muestran las especies que se piensa que son responsables de estas bandas.

Tabla 4.1. Posición de pico (cm⁻¹) de nuevas bandas formadas en mezclas $H_2O:CO_2$ (1:1) irradiadas con iones energéticos (T=10-20K).

700keV H ^{+a} 12eV/16amu	3keV He ⁺ 12eV/16amu	1'5keV H ⁺ 13eV/16amu	1'5keV H ^{+b} 19eV/16amu	Asignación
Wing	2842	2850	2900-2600	H ₂ CO ₃
2599	2576	2580		H ₂ CO ₃
2237				C ₃ O ₂ ?
2143	2141	2142	2142	со
2094	muy débil	muy débil	muy débil	¹³ CO
2044	2043	2044	2044	CO3
1943			débil	?
1879		débil		HCO?
1714	1710	1701	1736	H ₂ CO ₃
1482	1484	1500	1490	H ₂ CO ₃
1357	1384	1380		?
1294	1297	1303	1302	H ₂ CO ₃
1038	1040	1040	1040	H ₂ CO ₃ ;O ₃ ?
1015				?
811	811	811		H ₂ CO ₃

^a[60]

^bEn CO₂ puro

Para verificar los efectos inducidos por implantación de iones reactivos nosotros irradiamos una capa de CO_2 puro con protones de 1'5 keV. De esta forma

garantizamos que no hay otros átomos de hidrógeno en la muestra que no sean aquellos que nosotros hemos implantado. En la figura 4.4 mostramos el espectro del CO_2 irradiado con protones donde se observa la aparición de bandas nuevas que son iguales a las observadas para la mezcla de H₂O:CO₂ irradiada con iones no reactivos (comparar columnas 2 y 4, tabla 4.1). Este resultado implica que los protones que nosotros implantamos están enlazados con los átomos de la muestra formando ácido carbónico. Mediante la implantación de iones reactivos es posible formar especies nuevas que incluyen átomos que inicialmente no estaban presentes en la muestra.⁽⁶²⁾



Figura 4.4. Espectro IR (a 10K) de CO_2 congelado después de irradiación con protones de l'5keV.

5.3. Aplicaciones astrofísicas

La población de iones en el medio interplanetario es debida esencialmente al viento solar y a los iones de las protuberancias (flare ions). El viento solar es debido a la expansión del plasma con velocidades que, a distancias de pocos radios solares, vienen a ser supersónicas, del orden de 400km/s (por ejemplo son expulsados iones a energías de ~1keV). A 1AU el viento tiene una densidad del orden de 5 protones cm⁻³ correspondientes a un flujo de ~ $2x10^8$ protones cm⁻² s⁻¹. El flujo varía como el inverso del cuadrado de la distancia desde el Sol. De forma que, por ejemplo, a la distancia de 3AU el número de protones que golpeen una hipotética superficie de un asteroide es del orden de 10^{17} cm⁻² en tan sólo 100 años. Es de esperar, según esto, que se produzcan númerosos efectos como el sputtering⁽⁶³⁾ y la implantación de iones.

Según hemos visto en el capítulo, los iones reactivos emitidos por el Sol pueden implantarse en la superficie helada de numerosos cuerpos del SS. La energía que estos iones aportan puede hacer que los compuestos que forman dichas superficies reaccionen entre sí formando otros distintos. Pero según acabamos de ver el ion que transporta la energía podría también formar parte de los nuevos compuestos. Esto implica la formación de moléculas nuevas con componentes que originalmente no se encontraban en ese objeto cuando se formó.

Como hemos visto en el capítulo, sólo podemos afirmar que la irradiación con iones sólo afecta en la composición a los hielos y no a las superficies de silicatos, excepción hecha de que dicha superficie estuviese compuesta por silicio. Aunque, como ya hemos dicho, se deben llevar a cabo otros experimentos para concluir que las superficies de silicatos no se ven alteradas de manera significativa por la irradiación con iones.

Según esto la banda Si-H no serviría para comprobar la implantación de protones en silicatos en el espacio.

Los datos presentados en este capítulo se han publicado en el artículo "Implantation of reactive and unreactive ions in silicates and ices", publicado en la revista Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 116 (1996), 289-293; con los siguientes autores G. Strazzulla, J.R. Brucato, M.E. Palumbo y M.A. Satorre. Los tres primeros pertenecientes al Osservatorio Astrofísico i Istituto di Astronomía, Università di Catania. ¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

5. ¿ES POSIBLE DETECTAR O₂ Y N₂ EN LOS GRANOS INTERESTELARES?

5.1. Introducción

Numerosos objetos estelares muestran espectros de IR con una banda cerca de 2140 cm⁻¹ que es atribuida a CO sólido (congelado) en los mantos helados de los granos interestelares o circumestelares. Estos objetos son tanto estrellas jóvenes, todavía envueltas ("embedded") por la nube que los ha formado, como estrellas de campo, localizadas detrás de una nube oscura. En muchos casos es posible separar dos componentes de absorción independientes⁽³⁷⁾⁽⁶⁴⁾⁽²⁷⁾⁽⁴⁵⁾⁽³⁰⁾ denominados banda estrecha ($\Delta v = 3-9$ cm⁻¹), cerca de 2140 cm⁻¹, y banda ancha ($\Delta v \sim 10$ cm⁻¹), generalmente más débil, cerca de 2136 cm⁻¹.

Esas bandas se atribuyen al CO. Su banda estrecha se ha identificado (mediante pruebas de laboratorio) con dicha molécula mezclada con otras no polares como el CO_2 , N_2 o O_2 , aunque también se han hecho intentos de ajustarla con matrices de CO puro,⁽³⁹⁾ y la banda ancha a la forma sólida del CO mezclada con moléculas polares como el H₂O.

Palumbo & Strazzulla (1993)⁽²⁸⁾ presentan un modelo en el cual se ajustan los datos experimentales a los de las observaciones, tanto de estrellas de campo como de aquellas "embebidas" en la nube.

Para estrellas de campo el ajuste de la componente ancha es bueno con CO producido por la irradiación de hielos de $H_2O:CH_3OH$ (10 K) mientras que por la componente estrecha se ajusta bien con CO puro irradiado (10K).

¿Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

Podemos comparar la forma de la banda del CO, como hemos medido en el laboratorio después de la irradiación, con las observadas en fuentes astrofísicas. Para ello tendremos en cuenta que después de la irradiación de CO, su abundancia para dosis del orden de 12 eV/16amu, se hace cercana al 30%, debida a la formación de CO₂ y otras especies que denominaremos subóxidos. Teniendo esto en cuenta, no es necesario hacer cálculos específicos de la forma de la banda.⁽³⁹⁾⁽²⁸⁾

Para las estrellas embebidas la banda observada se ajusta bien para la misma mezcla, pero la parte responsable de la componente ancha tenemos que calentarla hasta cerca de 67K. Como muestran Palumbo & Strazzulla (1993)⁽²⁸⁾ esta temperatura debe ser considerada como una media ya que, cerca de estas estrellas la radiación de campo aumenta la temperatura del grano; como en estas condiciones todo el manto de hielo sublima, a una cierta distancia tan sólo sobrevivirán los mantos de agua, mientras que a mayores distancias los granos permanecen inalterados; esta es la situación que se da en las estrellas de campo.

Chiar et al. $(1995)^{(30)}$ han comparado observaciones de fuentes de la Nube Oscura de Tauro con los espectros de laboratorio. Ellos encontraron que las fuentes embebidas ajustan bien para la componente ancha con CO producido por radiación iónica de la mezcla H₂O:CH₃OH.

Todos los modelos que hemos expuesto son compatibles con la presencia de monóxido de carbono y agua en dos situaciones distintas:

En la primera, los mantos ricos en agua se forman cuando la densidad del gas es más baja y cuando se espera que crezcan las capas pobres en CO, por ejemplo durante la contracción de la nube. Cuando la densidad se hace bastante alta ($n_o \ge 10^4$ cm⁻³) pueden crecer los mantos ricos en CO sobre los mantos que ya existían.

Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

En la segunda, se supone que existen dos poblaciones diferentes: una con mantos ricos en CO, posiblemente mezclada con especies apolares, en la parte interior y más densa de la nube; otra donde dominan los mantos ricos en agua, que forma la parte externa de la nube.

En cualquier caso, podemos esperar que existan granos o mantos ricos en CO mezclado con O_2 y N_2 . Por tanto, es interesante estudiar las propiedades espectrales de las mezclas y las alteraciones producidas por la irradiación iónica.

Bergin et al. $(1995)^{(65)}$ estudian la química de la fase gaseosa en nubes interestelares densas incluyendo aquellas especies que provienen de la expulsión y de la desorción de los granos de la superficie. Entre sus datos conviene resaltar, para este trabajo, que para tiempos relevantes en escala astrofísica ($t \ge 10^4$ años) y para las temperaturas del polvo menores de 20 K, el CO es el principal constituyente de los mantos helados. Asumiendo que el oxígeno se presenta en una cantidad comparable a la del CO si estamos en el interior de la nube y después de un tiempo cerca de 10⁶ años, mientras que el nitrógeno molecular y el hielo de agua tienen, como mucho, una abundancia del 0'1 respecto al CO, en este mismo escenario.

En este trabajo presentamos resultados obtenidos irradiando mezclas congeladas de CO, CO:O₂ y CO:N₂ con iones de helio y de argón con energías entre 3 y 60 keV. La relevancia astrofísica de estos experimentos, proviene del hecho de que las bandas IR del O₂ y del N₂ son muy difíciles de observar, aunque sí es posible detectar este tipo de moléculas homonucleares como han hecho, por ejemplo, Ehrenfreund et al. $(1992)^{(66)}$ que han visto que en una matriz sólida la transición de las moléculas de oxígeno se ve débilmente en el infrarrojo debido a la perturbación de las moléculas que lo envuelven. Además, Sandford et al. $(1993)^{(31)}$ atribuyeron una

¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

absorción débil cerca de 4141 cm⁻¹ en el espectro de WL5, correspondiente al hidrógeno molecular sólido. Por tanto, una manera de ponerlas de manifiesto sería viendo como modifican (después de la irradiación) las bandas de especies como el CO que también se encuentra presente en el hielo y/o por la presencia de nuevas especies formadas por el procesado energético.

5.2. Resultados

5.2.1. CO puro

En este punto resumiremos los resultados y presentaremos nuevos datos sobre el hielo de monóxido de carbono que ya ha sido estudiado por nuestro grupo anteriormente.⁽²⁸⁾ El hielo de CO puro a 10 K muestra una banda de absorción cerca de 2138 cm⁻¹ debido al modo vibracional fundamental C=O, con una (anchura a mitad altura) FWHM ~ 4 cm⁻¹ medida en profundidad óptica y con una inclinación de 45° (tabla 5.1). El espectro del CO puro ha sido comparado con el de CO irradiado con iones de He⁺ 3 keV de energía.⁽²⁸⁾ La posición del pico tal y como lo depositamos es diferente del de 2140 cm⁻¹ que aparece en Palumbo & Strazzulla (1993);⁽²⁸⁾ además, la FWHM es más grande que el valor (2'5 cm⁻¹) que presentaron Sandford et al. (1988).⁽⁶⁷⁾

Los motivos de estas discrepancias quedan claros en un trabajo que nuestro grupo está llevando a cabo en el que se pretenden medir las constantes ópticas del hielo (Baratta et al., en preparación). En él se ven diferencias sustanciales entre la parte real del índice de refracción a lo largo de la banda, cuya forma depende mucho del ángulo entre el rayo IR y la muestra. A 45° la FWHM es 4 cm⁻¹ mientras que a 0° (con el haz IR perpendicular al plano del sustrato) es menor. Sobre este particular

¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

cabe señalar que, para mezclas que contienen menos del 30% de CO, o bien después de la irradiación de CO puro, las propiedades ópticas de la muestra cambian y las diferencias debidas al ángulo de inclinación son despreciables. De hecho las posiciones del pico y la FWHM de $CO:O_2$ (1:1) que se muestra en la tabla 5.1 son idénticas, con la limitación de las diferentes resoluciones de los espectros, a las observadas a cero grados (Ehrenfreund, comunicación privada).





Figura 5.1. Espectro IR de CO puro antes y después de irradiarlo con 60 keV de Ar^{++} (8eV/16amu), en tres rangos espectrales.

En la figura 5.1 se muestra el espectro debido al CO puro tal y como lo hemos depositado y después de la irradiación con 60 keV de Ar⁺⁺ (8eV/16amu). Después de la irradiación aparecen nuevas bandas cerca de 2340 cm⁻¹ y la doble estructura 2214 y

¿Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

2242 cm⁻¹. La primera es fácilmente atribuible al estiramiento asimétrico de O=C=O en el CO₂ (también se observa la banda debida al doblamiento de esta molécula cerca de 660 cm⁻¹). Nosotros atribuimos las otras dos bandas a la presencia de subóxidos (C₃O₂ y/o C₃O y/o C₂O). Alrededor de las longitudes de onda mencionadas se han observado bandas de este tipo. Por ejemplo, a 2242 cm⁻¹ y a 1989 cm⁻¹ para las mezclas de H₂O:CO,⁽⁶⁸⁾ en ese trabajo fueron atribuidas a C₃O₂ y C₂O respectivamente, mientras que Gerakines et al. (1996)⁽⁶⁹⁾ atribuye estas bandas a C₃O y C₃O₂. Después de la irradiación de mezclas de hielos de H₂O:CO₂,⁽⁶⁰⁾⁽⁶²⁾ también se ha observado una banda a 2237 cm⁻¹⁽⁶⁸⁾ que se ha atribuido a C₃O₂.

De forma que no se puede identificar un subóxido de carbono específico. En hielos de CO irradiados, además de detectar por espectrometría de masas y análisis elemental especies volátiles como CO₂ y O₂, ha sido detectada la formación de materia refractaria (materiales similares a polímeros constituidos por subunidades de varios monómeros) que identificamos como subóxidos de carbono.⁽⁷⁰⁾⁽⁷¹⁾

Nosotros hemos calculado un límite superior para la producción de subóxidos (a partir de las bandas a 2142 cm⁻¹ atribuidas a C₃O₂). El valor más bajo de la dosis utilizada (1'8eV/16amu) con 60 keV Ar⁴⁻⁴, correspondiente a un flujo de iones de ~1'5x10¹³ iones/cm² y con los efectos del sputtering despreciables (Johnson 1990).⁽⁷²⁾ Nosotros asumimos por tanto que todos los átomos que provienen del CO que no forman CO₂ están formando subóxidos. De esta manera se ha estimado la absorbancia integrada para la banda del C₃O₂ un valor de $\approx 5x10^{-17}$ cm/molécula.

Es interesante remarcar que, excepto por el experimento de menor dosis, la suma de los átomos de carbono de CO, CO₂ y subóxidos, es menor que la cantidad inicial de carbono, y disminuye al aumentar la dosis. De la misma forma que se había

¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

encontrado para los experimentos con hidrocarburos (Strazzulla & Baratta 1992)⁽⁷³⁾ donde se piensa que ha tenido lugar una deshidrogenación progresiva (o, equivalentemente, una carbonización). Nosotros pensamos que en el caso que nos ocupa, una continua perdida de oxígeno produce una progresiva carbonización de los subóxidos que sintetizamos. De forma que si paramos el experimento a diferentes dosis, podemos obtener materiales con diferentes estados de oxidación.



Figura 5.2. Espectro IR, en el rango 2400-550cm⁻¹, de la mezcla $CO:O_2$ antes y después de la irradiación con 3 keV He⁺ (11eV/16amu). El espectro está normalizado al máximo de la banda del CO.

5.2.2. Mezclas de CO:O₂ (1:1) y CO:N₂

En la figura 5.2 se muestra el espectro, normalizado al pico del CO, debido a CO:O₂ depositado a (10K) y después de irradiación con iones de helio a 3 keV

¿Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

(11eV/16amu). También en este caso es evidente la formación de nuevas bandas a 2340 cm⁻¹ y 660 cm⁻¹ que son fácilmente atribuibles al CO₂. Una intensa banda a 1039 cm⁻¹ y otra más débil a 706 cm⁻¹ es debida al ozono (Diem y Lee 1982),⁽⁷⁴⁾ cuya formación también se puede dar a partir de la fotólisis del oxígeno molecular tal y como ha sido comprobado.⁽⁷⁵⁾ Las bandas que aparecen cerca de 2230 cm⁻¹, que nosotros atribuimos a subóxidos, no aparecen.



CO:O2 irradiado con iones de Ar de 60 keV

Figura 5.3. Espectro IR de una mezcla $CO:O_2$ (1:1), en tres rangos espectrales, antes y después de la irradiación con 60 keV Ar⁺⁺ (10eV/16amu).

Esto se ve mucho mejor a la figura 5.3 donde se presenta el espectro, debido al $CO:O_2$ (1:1) tal y como se ha depositado y después de la irradiación con iones de 60

 λ Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

keV de Ar⁺⁺ (10 eV/16amu). La explicación de la ausencia de la banda de los subóxidos está en que después de la rotura del enlace del C=O, el átomo de carbono tiene una probabilidad más alta de enlazarse con el oxígeno molecular de la mezcla, produciendo dióxido de carbono a velocidades más altas, ver figuras 5.1 y 5.3.

CO:N2 irradiado con iones de Ar de 60 keV



Figura 5.4. Espectro IR de una mezcla $CO:N_2$ (1:1), en tres rangos espectrales, antes y después de irradiación con 60 keV Ar⁺⁺ (13eV/16amu).

La figura 5.4 muestra el espectro en la mezcla $CO:N_2$ (1:1), tal y como se ha depositado (10K) y después de irradiarlo con iones de 60keV de Ar⁺⁺ (13 eV/16amu). En este caso hay una banda cerca de 2340 cm⁻¹, atribuida al CO₂, y otra ancha cerca de 2250 cm⁻¹ después de la irradiación. Nosotros consideramos que esta nueva banda

77

 δEs posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

es debida otra vez a los subóxidos, aunque su forma, posición e intensidad son diferentes a la que hemos obtenido para CO puro (ver la siguiente sección).

5.2.3. Resumen de los resultados experimentales

En la tabla 5.1 resumimos los resultados presentados, para cada muestra irradiada, la posición del pico y la FWHM de las bandas de CO, CO₂, O₃ y de los subóxidos. La posición del pico no cambia mucho con la mezcla y la dosis de irradiación; la FWHM aumenta con la dosis, excepto cuando el CO está con N₂. La posición del pico para CO₂ varía entre 2343 y 2346 cm⁻¹, su FWHM varía entre 4 y 22 cm⁻¹, haciéndose más ancha al aumentar la dosis.

Tabla 5.1. Propiedades espectrales de CO, CO₂, O₃ y subóxido en muestras tal y como se han depositado y después de irradiación con iones de 60keV Ar^{++} para las dosis dadas.

Composición	CO		CO ₂		03		Subóxido	
del hielo	Pico	FWHM	Pico J	FWHM	Pico	FWHM	Pico	FWHM
	C	m ⁻¹	cm	-1	c	m ⁻¹	cm ⁻¹	
ĊO	2138	4	. –	-	-	-	-	-
+2eV/16amu	2138	5	2346	4	-		2214, 2242	10
+8eV/16amu	2138	4	2346	5	-	-	2214, 2242	10
+12eV/16amu	2139	7	2346	7	-	-	2213, 2244	10
+21eV/16amu	2139	8	2347	9	-	-	2211, 2242	10
+43eV/16amu	2138	8	2345	15	-	-	_	-
+71eV/16amu	2138	8	2345	17	-	-	-	-
				[
CO:O ₂ (1:1)	2139	5	-	-	-	-	-	-
+4eV/16amu	2138	7	2345	6	1040	8	-	-
+10eV/16amu	2138	8	2344	10	1040	8	-	-
+11eV/16amu	2139	8	2344	12	1040	10	-) -
+23eV/16amu	2138	8	2344	16	1040	10	-	-
+59eV/16*mu	2139	8	2343	22	-	-	-	-
		ļ						
CO:N ₂ (1:1)	2139	4	-	-	-	-	-	-
+1eV/16amu	2139	4	2347	5	-	-	2247	ancho
+5eV/16amu	2139	4	2346	6	-	-	2235, 2247, 2263	≥40
+13eV/16°mu	2139	4	2346	8	-	-	2235, 2247, 2263	≥40
+26eV/16°mu	2139	5	2346	9	-	-	2234, 2247, 2262	≥40
+66eV/16*mu	2139	5	2343	14] _	-	2235, 2247, 2259	>40
CO ₂	-	-	2343	12	-	-	-	-

(a) 3 keV He⁺;⁽²⁸⁾ (b) 3keV He⁺.

E_2 Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

Como hemos dicho antes el principal distintivo entre las diferentes muestras estudiadas son los cambios que se producen en las bandas de CO, CO₂ y en la de los subóxidos. La forma de identificar cuándo el oxígeno está presente en forma molecular es la ausencia de subóxidos, mientras que lo que distingue si tenemos CO puro o bíen mezclado con nitrógeno es la variación en la posición y en la FWHM para el pico de dichos subóxidos. En el caso de la mezcla con nitrógeno, existe la posibilidad de que el nitrógeno forme compuestos que contienen el grupo ciano que aparecen en la misma región espectral que los subóxidos, aunque no tenemos ninguna prueba de este hecho.

En la figura 5.5 presentamos los porcentajes de las principales especies que se han formado respecto al monóxido de carbono que inicialmente hemos depositado, en función de la dosis de irradiación. Los datos se refieren a la irradiación de CO puro y a las mezclas (1:1) del CO con N₂ y O₂. Los valores han sido obtenidos utilizando los valores de absorbancia integrada dados por Gerakines et al. $(1996)^{(69)}$ para todas las especies excepto para los subóxidos. Para estos hemos utilizado los valores que hemos estimado anteriormente.

Como hemos dicho antes, excepto para el experimento a dosis más bajas, la suma de los átomos de carbono de CO, CO₂ y subóxidos es menor que la cantidad inicial de carbono y se hace más pequeña según aumenta la dosis, porque se forma un residuo rico en carbono. Los resultados que mostramos en la figura 5.5 pueden ser comparados con los de Gerakines et al (1996),⁽⁶⁹⁾ donde se muestra que tras una hora de irradiación UV (equivalente a la dosis máxima que sufren los mantos helados en las nubes interestelares) casi todo el CO está todavía en la muestra. Esto significa que

¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

la radiación UV altera muy poco el CO, mientras que el bombardeo con iones es mucho más eficiente.



Figura 5.5. Porcentajes de las especies mayoritarias, con respecto al CO inicialmente depositado, representado frente a la dosis de irradiación. Los datos se refieren a la irradiación de CO puro, y de mezclas (I:1) con N_2 y O_2 . Las líneas sólo se muestran para guiar la vista.

80

 E_2 Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

5.3. Aplicaciones astrofísicas

En esta sección discutiremos las posibles aplicaciones de nuestros resultados experimentales a la física de los hielos en nubes interestelares densas y, en particular, a la posibilidad de detectar la presencia de oxígeno y nitrógeno molecular a partir de las observaciones en el IR en la región de 2400-2100 cm⁻¹. Esta región ha sido totalmente cubierta por las observaciones de ISO y puede proporcionar mucha información nueva para la interpretación de la cual se necesitarán resultados experimentales de laboratorio como los que aquí presentamos.

5.3.1. Dosis de iones en las nubes interestelares

Se ha evaluado que los mantos helados en las nubes densas sufren irradiación iónica durante 10^{5} - 10^{8} años. La primera estimación se refiere al caso de los mantos helados los cuales se evaporan inmediatamente después de su formación, mientras que los últimos se refieren al caso en que los mantos helados de los granos (o al menos una parte de ellos) sobreviven todo el tiempo de vida de la nube.⁽²⁸⁾ Una posible estimación para el flujo de protones cósmicos es J(E=1 MeV) = 3 cm⁻² s⁻¹.⁽⁶⁾ La pérdida específica de energía de un protón de un MeV de un grano típico que contiene átomos pesados (C, N, O, Si) es S $\approx 5x10^{15}$ eV cm²/átomo. Entonces después de un tiempo de $3x10^{12}$ - $3x10^{15}$ s la energía depositada en un grano (dosis) es dada por S x J x tiempo y se obtienen valores entre 0³05-50 eV/átomo (C, N, O, Si), que es el rango de dosis que nosotros utilizamos en la mayoría de nuestros experimentos.

Tanto los rayos cósmicos como los ultravioleta pueden provocar un procesado de la superficie de los granos interestelares. La comparación entre los dos procesos no es el propósito de este trabajo, pero los efectos de los dos procesos son los mismos y

¿Es posible detectar O₂ y N₂ en los granos interestelares?

podemos, por tanto, sumar sus contribuciones. Los resultados que aquí hemos presentado corresponden sólo a la irradiación.

5.3.2. La banda del CO

La posición del pico de la banda del CO permanece inalterada tanto por el efecto de la mezcla con nitrógeno y oxígeno moleculares como por el efecto de la irradiación. Tal y como aumentamos la irradiación la FWHM aumenta desde 4 a 8 cm⁻¹ mientras que en el caso de la mezcla con nitrógeno permanece prácticamente inalterada con valores comprendidos entre 4 y 5 cm⁻¹.

En el perfil de la banda de CO en las nubes moleculares densas, se puede observar una componente que se denomina estrecha ($\Delta v = 3.9 \text{ cm}^{-1}$), atribuida a la población de granos cuyos mantos contienen CO mezclado, principalmente, con especies no polares y sometidas, seguramente, a un fuerte procesado energético.

A partir de nuestros experimentos podemos decir que en el caso del FWHM más pequeño observado (3-5 cm⁻¹), estaríamos observando mantos helados que no han sido procesados o mantos procesados sólo si están mezclados con nitrógeno molecular.

5.3.3. La banda del CO₂

No se prevé que el dióxido de carbono tenga una gran abundancia en la fase gaseosa de las nubes densas de forma que la condensación en los granos debe ser despreciable mientras que su presencia en los mantos podría ser debida al procesado de la superficie por parte de los rayos UV, por la irradiación de los rayos cósmicos⁽⁷⁶⁾⁽²⁸⁾ o debido a la reacción de O y CO en la superficie de los granos.⁽²⁷⁾ De ¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

hecho el CO_2 ha sido observado por parte del IRAS y del ISO a lo largo de la línea de observación de protoestrellas.⁽⁷⁷⁾

Los datos de laboratorio ponen de manifiesto la formación de CO_2 después de la irradiación de hielo de CO (tanto puro como mezclado con N_2 ó O_2), metanol, mezclas $H_2O:CH_3OH^{(78)}$ De forma que se espera que el CO_2 esté presente en diferentes poblaciones de granos.

Nosotros creemos que la posición del pico de la banda que debe ser observada cerca de 2340 cm⁻¹ no puede ser utilizada para distinguir los diferentes modelos de formación. Se espera que el FWHM para el dióxido de carbono formado por el procesado energético de mantos ricos en CO sea grande (15-20 cm⁻¹). Por el contrario, también en este caso, la presencia de nitrógeno mezclado con CO puede dar lugar, por irradiación iónica, a una FWHM más estrecha (5-10 cm⁻¹). Sin embargo, es importante hacer notar que la banda del CO₂ es ancha tanto cuando está formada por irradiación de mezclas de hielos polares con iones⁽⁷⁸⁾ o con radiación UV. Esta banda puede ser muy estrecha (~ 4 cm⁻¹) cuando el CO puro, o su mezcla con O₂, contiene una pequeña proporción de agua y es irradiado con radiación UV (Ehrenfreund, comunicación privada). Por tanto, cualquier conclusión que extraigamos basada sólo en la forma de la banda tiene que ser hecha con mucho cuidado.

Para obtener más información podemos recurrir a la relación CO/CO_2 de las observaciones y compararla con los datos del laboratorio.

5.3.4. Búsqueda de subóxidos de carbono

Las bandas que encontramos experimentalmente, y que son atribuidas a subóxidos, no aparecen cuando irradiamos CO:O₂ y tienen posiciones y anchuras (FWHM) diferentes cuando hemos irradiado CO puro o mezclado con N₂. Estos

Es posible detectar O_2 y N_2 en los granos interestelares?

resultados pueden ser utilizados como una traza de la historia de irradiación de las especies no polares en los mantos helados en los cuales el CO es una especie abundante, probablemente por condensación directa de la fase gaseosa.

Nosotros hemos evaluado la absorbancia integrada de las bandas más intensas atribuidas a los subóxidos y hemos encontrado que es posible detectarlas. Esto también puede verse en las figuras 5.1 y 5.4, donde tenemos un cociente CO/subóxidos en valores de profundidad óptica que es del orden de 30. En los espectros astronómicos la profundidad óptica de la banda del CO varía en un gran rango, en algunas fuentes toma valores más grandes que 1.⁽³⁹⁾ Por ejemplo en NGC 7538 IRS 9 se ha medido una profundidad óptica de 2'6. En esta fuente se espera una profundidad óptica del orden de 0'09 para la banda de los subóxidos.

Los subóxidos (C₂O y C₃O) se han detectado, en la fase gaseosa, en las nubes oscuras con unas abundancias del orden de 10^{-5} - 10^{-6} respecto al CO.⁽¹⁰⁸⁾ Gerakines et al. (1996),⁽⁶⁹⁾ basándose en datos del fotoprocesado del CO puro, proponen que la desorción desde el hielo de los mantos, podría ser una fuente importante para observar esta abundancia en la fase gaseosa. En cualquier caso, no parece posible que su condensación desde la fase gaseosa pueda explicar su presencia en los mantos helados. De forma que si se detectan en fase sólida esto querría decir que se forman por procesado energético.

A partir de nuestros resultados podemos deducir la presencia de oxígeno y/o nitrógeno en los mantos. La detección de bandas debidas a subóxidos podría esclarecer, a partir de la posición de su pico y de su forma, si se trata de mantos en los cuales el CO es predominante y aquellos en los cuales el nitrógeno es un componente importante. La ausencia de subóxidos y la presencia de ozono podría indicar unos

¿Es posible detectar O2 y N2 en los granos interestelares?

mantos ricos en oxígeno. Sin embargo, la detección de la banda más intensa del ozono cerca de 1040 cm⁻¹ es difícil debido a la fuerte banda de absorción de los silicatos. Además, las deducciones podrían ser contrastadas por la observación directa de oxígeno molecular, tal y como propone Ehrenfreund et al. (1992).⁽⁶⁶⁾

Los resultados que aparecen en este capítulo se han publicado en el artículo "Is it possible to detect frozen O_2 and N_2 on interstellar grains?", publicado en la revista Astronomy and Astrophysics, 321 (1997), 618-624; con los siguientes autores G. Strazzulla, J.R. Brucato, M.E. Palumbo y M.A. Satorre. Los tres primeros pertenecientes al Osservatorio Astrofísico i Istituto di Astronomía, Università di Catania.

6. IRRADIACIÓN IÓNICA Y EMISIÓN EXTENDIDA DEL CO EN EL COMA DE LOS COMETAS

6. 1. Introducción

Sabemos que los iones producen efectos químicos y físicos cuando colisionan (con energías en el rango de los keV-MeV) con materiales sólidos. Por tanto, cuando un objeto sólido se pone dentro de un campo de radiación de partículas sufre un cambio en su composición. Puede formar nuevas moléculas, puede cambiar la estructura y, si el material original es volátil, puede transformarse en otro menos volátil y permanecer a temperaturas más altas en estado sólido. En el espacio hay muchos lugares donde es posible encontrar sólidos que están sometidos al bombardeo de partículas. Por ejemplo, hay interacciones dinámicas entre los vientos solares intensos de nebulosas planetarias y las envolturas de las nubes;⁽⁸⁵⁾ los granos interestelares pueden sufrir modificaciones de los rayos cósmicos de baja energía;⁽¹⁹⁾ la superficie lunar se modifica por el bombardeo iónico del viento solar;⁽⁸⁶⁾ los objetos en la parte exterior del SS son irradiados por iones cósmicos componentes de los rayos cósmicos galácticos, iones solares o los de sus magnetosferas.⁽⁷²⁾

Generalmente, se considera que los cometas han nacido en la parte exterior de la nebulosa solar y son uno de los cuerpos más antiguos en el SS. Se encuentran almacenados cerca de 4'6 x 10^9 años en la región de la nube de Oort (o en el cinturón de Kuiper) y han experimentado un flujo de partículas debido a los rayos cósmicos y un flujo de fotones UV.

Donn (1976)⁽⁸⁷⁾ sugirió, por primera vez, que la acumulación de dosis en la capa externa de los cometas podría llevar a la muestra hacia la polimerización del

hielo que al principio es simple y volátil. También se ha sugerido⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾ que un cometa expuesto a la radiación de partículas en la nube de Oort forma una parte externa de material no volátil que podría constituir una corteza sustancial. Por debajo de esta corteza, el material del cometa podría reflejar, al menos en parte, la composición de los granos interestelares previos a la formación de los cometas.⁽³⁾

En las nubes moleculares interestelares, los mantos helados de los granos se piensa que son un importante constituyente del polvo. Se cree que después del crecimiento y reacción de las especies que se encuentran en fase gaseosa en la superficie de los granos⁽⁸⁸⁾⁽⁸⁹⁾⁽⁹⁰⁾ se forman hielos de moléculas sencillas como H₂O, CO, CH₃OH. A lo largo de su vida, estos mantos de hielos volátiles sufren la radiación de rayos UV y cósmicos transformándose parcialmente en mantos orgánicos refractarios, consistentes en moléculas más complejas que probablemente pueden subsistir en el medio interestelar difuso.⁽³⁾⁽⁷³⁾ A partir de los resultados experimentales se demuestra que después de irradiar muestras de hielo, con iones o rayos UV, se forman nuevas moléculas; éstas pueden ser más volátiles que las que había antes de la irradiación o por el contrario formar otras menos volátiles.⁽⁵⁰⁾⁽⁹¹⁾

En la bibliografía se encuentra que no sólo los volátiles (hielos) del polvo interestelar están relacionados con el coma del cometa sino que también lo están los componentes orgánicos refractarios.⁽⁹²⁾ Las medidas *in situ* de la composición del polvo del cometa Halley por las misiones VEGA y GIOTTO han mostrado que los granos que contienen materiales orgánicos son más abundantes cerca del núcleo que en las regiones externas del coma del cometa.⁽⁹³⁾

Si suponemos que la síntesis en el laboratorio de residuos orgánicos simula bastante bien ciertas clases de procesado por irradiación pre- y post- crecimiento en

los hielos cometarios, entonces una vez que estos compuestos han sido expulsados del núcleo, se podrían ir disociando en materiales que cada vez tienen menor volatilidad, tanto térmicamente como por fotones UV, a distancias cada vez mayores del núcleo y podrían ser una fuente de distribución de algunas moléculas simples en fase gaseosa.

Los datos de las observaciones obtenidos durante la aparición del cometa Halley han planteado la cuestión sobre la naturaleza y distribución del carbón fundamental y el material carbonoso entre el núcleo y el coma del cometa. Huntress et al. $(1991)^{(94)}$ sugieren que el subóxido de carbono C₃O₂ podría ser responsable de una fuente distribuida de carbono atómico y monóxido de carbono en el coma del Halley. En este sentido Crovisier et al. $(1991)^{(95)}$ han medido el espectro del Halley en la región de 2'5-5'0 µm (4000-2000 cm⁻¹) con el experimento IKS a bordo del VEGA 1 para tratar de detectar los subóxidos. Ellos detectaron una banda muy débil a 4'43µm (~2257 cm⁻¹) que no se puede asignar sin más a los subóxidos, no sólo por la debilidad de la banda, sino porque en esta región espectral pueden aparecer bandas debidas a otras moléculas, como por ejemplo la de los grupos C=N, que se podrían haber formado por procesado de hielos, como hemos visto en el capítulo anterior.

En este capítulo se presentan resultados de laboratorio sobre la síntesis de nuevas especies por irradiación con iones de CO puro y mezclas $CO:O_2$ y $CO:N_2$ congeladas. Estos resultados se acompañan con datos más recientes referidos a experimentos con CO_2 y $CO_2:H_2O$ que también producen nuevas especies moleculares. Se sugiere que las nuevas especies que se forman, una vez disociadas, podrían ser fuentes potenciales de moléculas de CO. La importancia de estos experimentos es que, si los hielos cometarios se forman a partir de material en la nube interestelar, un protonúcleo del cometa podría estar constituido en gran parte por CO

y CO₂ mezclado con moléculas polares, como el agua, y no polares, como el nitrógeno y el oxígeno molecular.⁽⁹⁶⁾ También se exponen una serie de experimentos de irradiación utilizando distintos iones a diferentes energías. La investigación de laboratorio se ha llevado a cabo con espectroscopia infrarroja y se han estudiado las variaciones de las bandas de los subóxidos de carbono con la temperatura. Finalmente se presenta una discusión sobre la emisión del CO en el coma de los cometas.

6.2. Resultados

6.2.1. Nuevos experimentos: CO

El CO presenta sólo un modo vibracional fundamental, el estiramiento C=O, el cual da lugar a una banda de absorción en el espectro IR medio, cerca de 2140 cm⁻¹ con un FWHM de ~4 cm⁻¹ medidos en una escala de profundidad óptica. Cuando irradiamos el CO sólido, el espectro de IR cambia y es posible detectar la aparición de nuevas moléculas como el CO₂.⁽²⁸⁾

La figura 6.1a muestra el espectro IR en el rango de 2300-2180 cm⁻¹ de hielo de CO puro, tal y como lo hemos depositado, y después de irradiarlo con iones de H⁺ (1'5 keV), N⁺ (1'5 keV), y He⁺ (3 keV) con una dosis de 23 eV/16amu a 10K.

Podemos ver que, después de la irradiación, se forman una serie de bandas complejas en este rango espectral cuya distinta intensidad responde al distinto espesor de las muestras. Se observan bandas en 2280 cm⁻¹, fácilmente atribuible al estiramiento asimétrico del O=C=O en $^{13}CO_2$, y en 2262 (tan sólo un hombro en el caso del He), 2247 (2241 en el caso del He), 2234, 2214 cm⁻¹.

En un trabajo reciente Strazzulla et al. $(1997)^{(96)}$ observaron bandas a 2242 y 2214 cm⁻¹, después de irradiación de CO congelado con iones de 60 keV de Ar⁺⁺ y

de 3 keV de He⁺ y las atribuyeron a subóxidos de carbono (C_3O_2 y/o C_3O y/o C_2O). De hecho, las bandas a 2242 y 1989 cm⁻¹ han sido observadas en mezclas de hielos de H₂O:CO⁽⁶⁸⁾ y atribuidas a C₃O₂ y C₂O, respectivamente. Una banda a 2237 cm⁻¹ ha sido observada después de irradiación de mezclas de H₂O:CO₂⁽⁶⁰⁾⁽⁶²⁾ y atribuida a C₃O₂.⁽⁶⁸⁾ Gerakines et al (1996)⁽⁶⁹⁾ observaron picos en 2243 y 2248 cm⁻¹ después de la irradiación UV de CO, CO₂ y H₂CO y atribuyen estas bandas a la formación de C₃O y C₃O₂ respectivamente. De forma que no es posible identificar un subóxido de carbono específico.



Figura 6.1. (a) Espectro IR de CO puro depositado a 10K después de irradiación con protones de l'5keV, iones N^+ de l'5keV e iones He⁺ de 3keV a 10K. (b) Efecto de la temperatura de la muestra irradiada con protones.

Actualmente los resultados experimentales indican que la posición del pico y la forma de la banda podrían depender del ion utilizado. En particular con iones reactivos (H y N) parece que dan lugar a bandas más estructuradas que con iones que no lo son (He y Ar).

La figura 6.1b muestra los cambios en los perfiles de las bandas obtenidas después de la irradiación del hielo de CO puro a 10K con iones de hidrógeno, después de calentar a 27, 97 y 127 K. Es evidente que el perfil de la banda de los subóxidos de carbono cambia, debido probablemente a la sublimación de las especies (radicales) menos estables como el C₃O y el C₂O que posiblemente reaccionan debido al calentamiento para dar C₃O₂.

La temperatura de sublimación del C_3O_2 es mayor tanto del CO_2 depositado como del producido por el bombardeo con iones a partir del CO. De forma que el subóxido de carbono sintetizado puede aguantar temperaturas superiores (127K) a las que soporta el CO del que se ha formado (30K). Esto puede ser debido a la aparición de una sustancia refractaria, parecida a un polímero, constituida por subunidades como, por ejemplo, O=C=C=C=O. Probablemente estas cadenas lineales tienen diferentes longitudes y además no deben estar constituidas por un subóxido de carbono que actúe como monómero. Estos materiales se han detectado por espectroscopía de masas y análisis elemental en CO irradiado con iones.⁽⁹⁷⁾⁽⁷¹⁾

En otro experimento, nosotros hemos bombardeado la mezcla de CO y N_2 (1:1) (10K) con iones de Ar⁺ 30 keV (20eV/16amu). Estos resultados se muestran en la figura 6.2, en la que se ve que también en este caso se forman nuevas bandas a baja temperatura. Éstas son atribuidas de nuevo a subóxidos de carbono, aunque la

variación en el perfil respecto a las anteriores nos pueda indicar la presencia de nitrógeno en la matriz.⁽⁹⁶⁾ Es interesante que la forma de la banda de los subóxidos formados después de irradiar CO:N₂ es similar a la observada al bombardear CO puro con iones de N (ver la figura 6.1a). Esto soporta la idea de que algo del nitrógeno atómico, formado por irradiación puede reaccionar con los grupos que tienen C y formar compuestos de tipo ciano. En resumen, utilizando iones no reactivos, la forma de la banda depende de la naturaleza de la muestra inicial (presencia o ausencia de nitrógeno). Utilizando especies reactivas la forma depende de la naturaleza del proyectil. Además, la irradiación de CO puro con nitrógeno produce una banda que tiene una forma similar a la banda por iones no reactivos en la mezcla de CO:N₂.

La figura 6.2 muestra también el espectro obtenido después de calentar a 170K. Al igual que al irradiar muestras de CO puro, aquí también es posible obtener un residuo de subóxido de carbono que es menos volátil que el material original y que es capaz de resistir un considerable aumento de temperatura.

El comportamiento es diferente cuando irradiamos la mezcla sólida CO:O₂ (1:1) con iones energéticos (p.e. 60 keV Ar^{++}); en este caso no aparecen bandas correspondientes a subóxidos.⁽⁹⁶⁾ Los átomos de carbono obtenidos por ruptura del enlace C=O tienen una alta probabilidad de formar,⁽⁹⁶⁾ en un ambiente rico en oxígeno, especies oxidadas como el dióxido de carbono impidiendo que se formen los subóxidos. Moore et al. (1991)⁽⁶⁸⁾ en una serie de experimentos en los que irradiaron la mezcla H₂O:CO a 20K con protones, obtuvieron un espectro IR que muestra diferentes bandas, algunas de las cuales se han atribuido a C₃O₂ y C₂O. Durante el calentamiento, de esa muestra irradiada, desde 40K hasta 200K, los autores

detectaron, con un espectrómetro de masas de quadrupolo, un pico de 68 amu que





Figura 6.2. Espectro IR de la mezcla CO:N₂ (1:1) después de irradiación con iones Ar^+ de 30keV (20eV/16amu) a 10K y posterior calentamiento a 170K.

6.3. Aplicaciones astrofísicas

6.3.1. Resumen de resultados previos

Se han hecho algunos experimentos irradiando dióxido de carbono y diferentes mezclas con agua. Moore and Khanna (1991)⁽⁶⁰⁾ después de la irradiación con

protones de 0'7MeV de CO₂ mezclado con H₂O, obtuvieron como producto mayoritario el ácido carbónico (H₂CO₃). Ellos demostraron que el ácido carbónico puede ser estabilizado a baja temperatura (10K). A alta temperatura (~ 250 K) y baja presión (~ 10^{-8} mbar) la mezcla agua:dióxido de carbono forma una película casi de ácido carbónico puro. Moore y Khanna (1991)⁽⁶⁰⁾ presentaron el espectro de masa de las especies sublimadas de H₂CO₃ y de H₂¹³CO₃ a 250K. De la primera detectaron los picos de masa: 16 (O), 17 (OH), 18 (H₂O), 28(CO), 29 (HCO), 44 (CO₂). De la segunda, 29(¹³CO), 30 (H¹³CO), 31 (H₂¹³CO), 45 (¹³CO₂).

Nuestro grupo⁽⁶²⁾ ha llevado a término experimentos similares en los cuales han sido irradiados con iones reactivos (H⁺) y no reactivos (He⁺) dióxido de carbono puro y mezclado con agua con energías de pocos keV. Nosotros hemos encontrado que la formación de ácido carbónico es el efecto químico que más se ve.

6.3.2. Discusión

Hay sobradas evidencias que la velocidad de producción de algunas especies volátiles (p.e. CO, CN, C₂, etc.) observadas en el coma de los cometas, no puede ser explicada directamente por la sublimación de estos productos directamente del núcleo del cometa sino que precisa de una contribución de otras fuentes distribuidas en un margen más amplio de zonas. El ejemplo más reciente proviene de la observación del cometa C/1996 B2 Hyakutake. Las observaciones UV indican una velocidad de producción cercana a $7x10^{27}$ moléculas s⁻¹ (⁹⁸) de acuerdo con los valores estimados de observaciones en el IR.⁽⁹⁹⁾ Tanto el UV como el IR son muy sensibles a la emisión de CO desde el núcleo, pero la velocidad de producción es del orden de 4 a 5 veces

más pequeña que la detectada por las observaciones de radio⁽⁹⁹⁾ que es muy sensible a la emisión total (del núcleo más la extendida).

Nosotros hemos presentado evidencias experimentales de la producción, por irradiación con iones de hielos simples, de materiales (subóxidos de carbono y ácido carbónico) que sobreviven en el substrato a temperaturas más altas que la de las moléculas a partir de las cuales se han formado. Las dos nuevas moléculas sintetizadas, una vez abandonan el substrato, se pueden descomponer fácilmente en moléculas más simples como el CO. Esto puede ayudar a explicar la emisión extendida del CO en el coma de los cometas. Como hemos dicho antes, la descomposición del ácido carbónico seguida de la ionización de las especies sublimadas, produce entre otros, CO.⁽⁶⁰⁾ El C₃O₂ se disocia después de la absorción de fotones UV de longitud de onda \leq 450 nm y produce CO+C₂O. C₂O se fotodisocia rápidamente en C+CO. La fotólisis por parte de fotones más energéticos (longitud de onda \leq 206 nm) de C₃O₂ lleva directamente a la formación de C+2CO.⁽⁹⁴⁾

La importancia experimental de los resultados presentados aquí, está relacionada con el hecho de que es posible que la radiación con iones y/o con fotones UV juegue un papel importante en la modificación tanto de los hielos precometarios como de los cometas mismos en las diferentes etapas de su evolución⁽⁹⁾⁽¹⁰⁰⁾⁽¹⁰¹⁾ y produzca especies menos volátiles que aquellas de las que se han formado, tal y como acabamos de discutir.

De los datos de las observaciones no se puede excluir la posibilidad de que los subóxidos de carbono estén presentes en los cometas. Fomenkova et al. (1994)⁽⁹³⁾ han encontrado, por medio de los análisis de cúmulos, que numerosos granos presentes en ellos muestran una relación O/C en el rango que se da en polímeros de subóxidos de

carbono. Crovisier et al. $(1991)^{(95)}$ ha deducido de los espectros de VEGA 1 IKS IR que la abundancia del subóxido de carbono en los hielos del cometa Halley es bajo $([C_3O_2]/[H_2O] = 0'0011)$ comparado con el nivel que proponía Huntress et al. $(1991)^{(94)}$ $([C_3O_2]/[H_2O] \sim 0'03$ ó 0'04). La dificultad estriba en que aunque realmente el C₃O₂ provenga de los granos del coma, es muy dificil de detectar a partir de aparatos remotos debido a la gran área sobre la que se extiende la fase gaseosa.⁽¹⁰⁷⁾

En el medio interestelar se ha detectado el radical C₂O, que es un miembro de los compuestos que forman las cadenas lineales de carbones.⁽¹⁰⁸⁾ A pesar de que la fracción relativa al hidrógeno es muy baja (~ $6x10^{-11}$, Ohisi et al (1991)),⁽¹⁰⁸⁾ su condensación en granos interestelares seguido por reacciones de superficie con moléculas de CO puede ser una fuente alternativa para el subóxido de carbono a la sugerida por radiación UV (Gerakines et al., 1996)⁽⁶⁹⁾ y por el procesado de los hielos interestelares (Strazzulla et al., 1997).⁽⁹⁶⁾

Los resultados de este capítulo aparecen en el artículo "Ion irradiation and extended CO emission in cometary comae", publicado en la revista Planetary Space Science, 45, N° 7 (1997), 835-840; con los siguientes autores G. Strazzulla, J.R. Brucato, M.E. Palumbo, A.C. Castorina y M.A. Satorre. Los cuatro primeros pertenecientes al Osservatorio Astrofísico i Istituto di Astronomía, Università di Catania.

Conclusiones

7. CONCLUSIONES

A continuación se presentan las principales conclusiones a las que se ha llegado en los experimentos expuestos:

- La irradiación con iones afecta la composición de hielos, tanto cuando irradiamos con iones reactivos (H⁺, N⁺, O⁺...) como cuando lo hacemos con no reactivos (Ar⁺⁺, He⁺). Por tanto, los átomos y moléculas que componen cuerpos en el espacio pueden reaccionar entre sí, formando nuevas moléculas que pueden contener al propio ion que ha provocado el cambio.
- Dado que las superficies de silicatos no se ven afectados por la irradiación (sólo lo hace cuando bombardeamos con protones la superficie de silicio), la banda de Si-H no serviría para comprobar la implantación de protones en superficies compuestas por silicatos en el espacio.
- El oxígeno y nitrógeno moleculares son imposibles de detectar de forma directa de las observaciones en el IR, pero es posible detectarlos de forma indirecta a partir de la influencia sobre la banda de algunas moléculas que se depositan con ellas en los mantos helados.
- La aparición de bandas correspondientes a subóxidos y el mantenimiento de la FWHM de la banda del CO puede indicar la presencia de nitrógeno molecular en las superficies heladas y de un fuerte procesado energético en los granos de la nube.
- Si no aparecen las bandas de subóxidos puede indicar la presencia de oxígeno molecular en el escenario que se esté estudiando. La presencia de oxígeno se ve acompañada, debido a la irradiación, con la de ozono. Así,

Conclusiones

esta banda confirma la presencia de oxígeno detectada por la ausencia de la banda correspondiente a los subóxidos.

- Si los mantos helados no han sido procesados por irradiación no se podría
 detectar ni el oxígeno ni el nitrógeno porque su mezcla con CO y CO₂ no
 altera su banda de absorción.
- La irradiación del material que compone los cometas hace que el cociente entre C/O aumente con la cantidad de irradiación formándose, entre otros compuestos, los subóxidos.
- La expulsión por parte de los cometas de este material y la posterior descomposición en CO debido a la radiación UV, puede explicar la emisión extendida de CO en el coma de los cometas.

Bibliografía

BIBLIOGRAFÍA

- (1) Vanysec, M.K. and Wickramasinghe, N.C., Astrophysics Space Science, 33, L19 (1975).
- (2) Hoyle, F. and Wickramasinghe, N.C., *Living Comets*. University College Press, London (1985).
- (3) Greenberg, J.M., Comets. L.L. Wilkening, University of Arizona Press, Tucson. (1982).
- (4) Strazzulla, G., Icarus, 67, 63 (1986).
- (5) Hanner, M.S.; Knacke, R.; Sekanina, Z. and Tokunaga, A. T., Astronomy & Astrophysics, 152, 177 (1985).
- (6) Jenniskens P.; Baratta, G.A.; Kouchi, A.; de Groot, M.; Greenberg, J.M.; Strazzulla, G., Astronomy & Astrophysics, 273, 583 (1993).
- (7) Ziegler, J.F., Pergamon Press. (1980).
- (8) Yamamoto, T., Comets in the Post-Halley Era. Kluwer, Dordrecht. (1991).
- (9)Strazzulla, G.; Johnson, R.E., Comets in the Post-Halley Era. Kluwer, Dordrecht. (1991).
- (10) Johnson, R.E.; Cooper, J.F.; Lanzerotti, L.J.; Strazzulla, G., Astronomy & Astrophysics, 187, 889 (1987).
- (11) Strazzulla, G.; Baratta, G.A.; Johnson, R.E.; Donn, B., Icarus, 91, 101 (1991a).
- (12) Spinella, F.; Baratta, G.A. and Strazzulla, G., Reviev Science Instruments, 62, 1743 (1991).
- (13) Strazzulla, G.; Baratta, G.A; Magazzú, A., Solid State Astrophysics. North-Holland, Amsterdam. (1991b).
(14) Encrenaz, T.; Bibring, J.P. and Blanc, M., *The Solar System*. InterEditions et Editions du CNRS. París (1987).

- (15) Evans, A., The Dusty Universe. Ellis Horwood. (1993). CLOLLOL ULFILLOL
- (16) Borhen, C.F. & Huffman, D.R., Absortion and Scattering of Light by Small Particles. New York: Wiley. (1983).
- (17) Tielens, A.G.G.M. & Allamandola, L.J., Physical Processes in Interstellar
- Clouds. G.E. Morfill & M. Schoeler (eds.) (Dordrecht: Reidel). (1987a)
- (18) Westley, M.S.; Baragiola, R.A.; Johnson, R.E. and Baratta, G.A., *Nature*, **373**, 405 (1995).
- (19) Strazzulla, G.; Calcagno, L. and Foti, G., MNRAS, 204, 59 (1983).
- (20) Mathis, J.S.; Rumpl, W. and Nordsieck, K. ApJ., 217, 425.
- (21) Palumbo, M.E., Tesi di Dottorato. Università di Catania. (1996).
- (22) Greenberg, J.M. & Chlewicki, G., ApJ., 272, 563 (1983).
- (23) Larson, H.P.; Davis, D.S., Black, J.H. & Fink, U., ApJ., 299, 873 (1985).
- (24) Geballe, T.R.; Bass, F.; Greenberg, J.M. and Schutte, W., Astronomy & Astrophysics, 146, L6 (1995).
- (25) Allamandola, L.J.; Sandford, S.A.; Tielens, A.G.G.M. and Herbst, T.M., *ApJ.*, 399, 134 (1992).
- (26) Skinner, C.J.; Tielens, A.G.G.M.; Barlow, M.J. and Justtanout, K., ApJ., 399, L79 (1992).
- (27) Tielens, A.G.G.M. & Allamandola, L.J., Interstellar Processes. D.J.
 Hollenbach & H.A. Thronson (eds) (Dordrecht: Reidel). (1987b).
- (28) Palumbo, M.A. and Strazzulla, G., Astronomy & Astrophysics, 269, 568 (1993).

(29) Tegler, S.C.; Weintraub, D.A.; Rettig, T.W.; Pendleton, Y.J.; Whittet, D.C.B. and Kulesa, C., *ApJ*, **439**, 279 (1995).

- (30) Chiar, J.E.; Adamson, A.J.; Kerr, T.H. and Whittet, D.C.B., *ApJ.*, **455**, 234 (1995).
- (31) Sandford, S.A.; Allamandola, L.J. and Geballe, T.R., Science, 262, 400 (1993).
- (32) Merrill, K.M.; Russell, R.W. and Soifer, B.T., ApJ., 207, 763 (1976).
- (33) Smith, R.J., Sellegren, K and Tokunaga, A.T., ApJ., 344, 413 (1989).
- (34) Willner, S.P.; Guillet, F.C.; Herter, T.L.; Jones, B.; Krassner, J.; Merrill, K.M.;

Pipher, J.L.; Puetter, R.C.; Rudy, R.J.; Russell, R.W. and Soifer, B.T., *ApJ.*, **253**, 174 (1982).

(35) Grim, R.J.M.; Baas, F.; Geballe, T.R.; Greenberg, J.M. and Schutte, W., Astronomy & Astrophysics, 243, 473 (1991).

(36) Schutte, W., International School of Space Chenistry: The Cosmic Dust Connection, 3rd course. (1994).

(37) Lacy, J.H.; Baas, F.; Allamandola, L.J.; Persson, S.E.; McGregor, P.J.; Lonsdale, C.J.; Geballe, T.R. and van de Bult, C.E.P., *ApJ.*, **276**, 533 (1984).

(38) Grim, R.J.M. and Greenberg, J.M., ApJ., 321, L91 (1987)

(39) Tielens, A.G.G.M.; Tokunaga, A.T.; Geballe, T.R. and Baas, F., *ApJ.*, **381**, 181 (1991).

(40) Palumbo, M.A.; Tielens, A.G.G.M. and Tokunaga, A.T., ApJ., 449, 674 (1995).

(41) Th. de Graauw; Whittet, D.C.B.; Gerakines, P.A.; Bauer, O.H.; Beintema, D.A.; Boogert, A.C.A.; Boxhoorn, D.R.; Chiar, J.E.; Ehrenfreund, P.; Feuchtgruber, H.; Helmich, F.P.; Heras, A.M.; Huygen, R.; Kester, D.J.M.; Kunze, D.; Lahuis, F.; Leech, K.J.; Lutz, D.; Morris, P.W.; Prusti, T.; Roelfsema, P.R.; Salama, A.;

Schaeidt, S.G.; Schutte, W.A.; Spoon, H.W.W.; Tielens, A.G.G.M.; Valentijn, E.A.;

Vandenbusshe, B.; van Dishoeck, E.F.; Wesselius, P.R.; Wieprecht, E. and Wrigth,

- C.M., Astronomy & Astrophysics, 315, L345 (1996).
- (42) Gürtler, J.; Henning, Th.; Kömpe, C.; Pfau, W.; Krätschmer, W. and Lemke, D. Astronomy & Astrophysics, 315, L189 (1996).
- (43) Cox, P. (1989). Astronomy & Astrophysics, 223, L5 (1989).
- (44) Whittet, D.C.B., I.O.P.: Publishing, Bristol. (1992).
- (45) Chiar, J.E.; Adamson, A.J.; Kerr, T.H. and Whittet, D.C.B., ApJ., 426, 240 (1994).
- (46) Palumbo, M.E.; Geballe, T.R. and Tielens, A.G.G.M., ApJ., 479, 839 (1997)
- (47) Tielens, A.G.G.M., R. Wolstencroft and J.M. Greenberg (eds.), Occ. Rep. Royal Obs., Edinburgh. (1984).
- (48) Tielens, A.G.G.M., IAU Symposium 135, Interstellar Dust, L.J. Allamandola and A.G.G.M. Tielens (Dordrecht:Reidel). (1989).
- (49) Allamandola, L.J. and Sandford, S.A., Dust in the Universe, M.E. Bailey and
- D.A. Williams (eds.), Cambridge University Press. (1988).
- (50) Strazzulla, G and Baratta, G.A., Astronomy & Astrophysics, 241, 310 (1991).
- (51) Spinella, F.; Baratta, G.A.; Strazzulla, G. and Torrisi, L., Radiation Effects and Defects in Solids, 115, 307 (1991).
- (52) Palumbo, M.E., Tesi di Laurea, Università di Catania. (1992).
- (53) Strazzulla, G., B. Schimitt, C. de Berg and M. Festou (eds.) (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht) in press. (1996).
- (54) Bibring, J.P. and Rocard, F., Adv. Space Res., 4, 103 (1984).
- (55) Nuth, J.A.; Moore, M.H. and Tanabé, T., Icarus, 98, 207 (1992).

- (56) Moore, M.H.; Tanabé, T. and Nuth, J.A., ApJ. Lett., 373, L31 (1991).
- (57) Buemi, A.; Cimino, G.; Leto, G. and Strazzulla, G., Icarus, 108, 169 (1994).
- (58) Bibring, J.P. and Rocard, F., Radiation Effects and Defects in Solids., 65, 159 (1982).
- (59) Strazzulla, G.; Brucato, J.R.; Cimino, G.; Leto, G. and Spinella, F., *Adv. Space Sci.*, **15(10)**, 13 (1995).
- (60) Moore, M.H. and Khanna, R.H., Spectrochim. Acta, 47, 255 (1991).
- (61) Hage, W.; Hallbrucker, A. and Mayer, E., J. Am. Chem. Soc., 115, 8427 (1993).
- (62) Brucato, J.R.; Palumbo, M.A. and Strazzulla, G., Icarus, 125, 135 (1997).
- (63) Thiel, K.; Sassmannshausen, U.; Kulzer, H. and Herr, W., Radiation Effects and Defects in Solids, 64, 83 (1982).
- (64) Whittet, D.C.B.; Adamson, A.J.; Duley, W.W.; Geballe, T.R. and McFadzean,A.D., MNRAS, 241, 707 (1989).
- (65) Bergin, E.A.; Langer, W.D. and Goldsmith, P.F., ApJ., 441, 222 (1995).
- (66) Ehrenfreund, P.; Breukers, R.; d'Hendecourt, L. and Greenberg, J.M., Astronomy & Astrophysics, 260, 431 (1992).
- (67) Sandford, S.A.; Allamandola, L.J.; Tielens, A.G.G.M. and Valero, G.J., ApJ.,
 329, 498 (1988).
- (68) Moore, M.H.; Khanna, R.K.; Donn, B., J. Geophys. Res., 96, 17.541 (1991).
- (69) Gerakines, P.A.; Schutte, W. and Ehrenfreund, P., Astronomy & Astrophysics, 312, 289 (1996).
- (70) Haring, R., Chemical sputtering induced by keV ion bombardment, PhD Thesis,Univ. of Leiden, Holland. (1984).

- (71) Chrisey, D.B.; Boring, J.W.; Phipps, J.A. and Johnson, R.E., Nuclear Instruments Methods in Physics Research B, 13, 360 (1985).
- (72) Johnson, R.E., Energetic Charged Particle Interactions with Atmospheres and Surfaces, L.J. Lanceroti (ed.). Springer Verlag Press, Berlín. (1990).
- (73) Strazzulla, G. and Baratta, G.A., Astronomy & Astrophysics, 266, 434 (1992).
- (74) Diem, M. and Lee, E.K.C., J. Phys. Chem., 86, 4507 (1982).
- (75) Grim, R.J.A. and d'Hendecourt, L., Astronomy & Astrophysics, 167, 161 (1986).
- (76) Whittet, D.C.B. and Walker, H.J., *Molecular Clouds*. R.A. James and T.J.Millar (eds.). Cambridge Univ. Press, Cambridge. (1991).
- (77) d'Hendecourt, L. and de Muizon, J., Astronomy & Astrophysics, 223, L5 (1989).
- (78) Palumbo, M.E., Adv. Space Res., 20, (8), 1637 (1997).
- (79) Whittet, D.C.B. and Chiar, J.E., Astronomy & Astrophysics Rev., 5,1 (1993).
- (80) Watson, W.D., Atomic and molecular physics and the interstellar matter, R.Balian et al. (eds.), North Holand Publ. Co., Amsterdam. (1975).
- (81) Spitzer, L., Physical processes in the Interstellar Medium, John Willey & Sons, New York. (1978).
- (82) Trimble, V., Astronomy & Astrophysics Rev., 3, 1 (1991).
- (83) Iben, I. and Renzini, A., ARAA., 21, 271 (1983).
- (84) McKee, C.F., IAU Symp. No.135. Interstellar Dust, L.J. Allamandola and
- A.G.G.M. Tielens (eds.), Kluwer, Dordrecht. (1989).
- (85) Grewing, M., Planetary Nebulae, IAU Symp. 131, 241 (1989).

- (86) Jull, A.J.T. an Pillinger, C.T., Radiation Effects and Defects in Solids, 48, 69 (1980).
- (87) Donn, B., The Study of Comets, de. B. Donn, NASA SP-393, 611 (1976).
- (88) Tielens, A.G.G.M. and Hagen, W., Astronomy & Astrophysics, 114, 245 (1982).
- (89) d'Endecourt, L.B.; Allamandola, L.J. and Greenberg, J.M., Astronomy & Astrophysics, 152, 130 (1985).
- (90) Brown, P.D.; Millar, T.J. and Charnley, S.B., Mon. Not. R. Astron. Soc., 231, 409 (1988).
- (91) Allamandola, L.J.; Sandford, S.A. and Valero, G.J., Icarus, 76, 225 (1988).
- (92) Greenberg, M.J. and Shalabiea, O. M., Asteroids, Comets, Meteors, A. Milani et al. (eds.). IAU, The Netherlands. (1993).
- (93) Fomenkova, M.N.; Chang. S. and Mukhin, L.M., Geochim. Cosmochim. Acta, 58, 4503 (1994).
- (94) Huntress Jr, W.T.; Allen, M. and Delitsky, M., Nature, 352, 316 (1991).
- (95) Crovisier, J.; Encrenaz, T. and Combes, M., Nature, 353, 610 (1991).
- (96) Strazzulla, G.; Brucato, J.R.; Palumbo, M.E. and Satorre, M.A., Astronomy & Astrophysics, **321**, 618 (1997).
- (97) Haring, R.A.; Pedris, R.; Oostra, D.J.; Haring, A. and de Vries, A.E., Nuclear Instruments Methods in physics Research B, 2, 544. (1984).
- (98) Rodriguez-Pascual, P.M. and Gonzales-Riestra, R., ESA Astronews, Newslett. Astrophys. Div., 29, 3 (1996).
- (99) Mumma, M.J.; DiSanti, M.A.; Dello Russo, N.; Fomenkova, M.; Magee-Sauer,
 K.; Kaminski, C.D. and Xie, D.X., Science, 272, 1310 (1996).

(100) Weaver, H.A.; Feldman, P.D.; McPhate, J.B.; A'Hearn, M.F.; Arpigny, C. and Smith, T.E., *Ap.I.*, **422**, 374 (1994).

(101) Strazzulla, G., From Stardust to Planetesimals, Y.J. Pendleton and A.G.G.M.

Tielens (eds.), ASP Conference Series. 122, 423 (1997).

(102) Lanzerotti, L.J.; Brown, W.L.; Poate, J.M. and Augustiniak. W.M., Geophys.

Res. Lett. 5, #2, 155 (1978).

(103) Johnson, R.E., Icarus, 62, 344 (1985).

(104) Johnson, R.E.; Lanzerotti, L.J. and Brown, W.L., Nuclear Instruments Methods

in Physics Research, 198, 147 (1982).

(105) Eviatar, A.; Bar-nun, A. and Podolak, M., 61, 185 (1985).

(106) Cruikshank, D.P., (1992) comunicación privada.

(107) Allen, M., Nature, 354, 272 (1991).

(108) Ohishi, M.; Ishikawa, S.I.; Yamada, C.; Kanamori, H.; Irvine, W.M.; Brown,

R.D.; Godfrey, P.D.; Kaifu, N. and Suzuki, H., Ap.J., 380, L39 (1991).

(109) Hudgis, D.M.; Sandford, S.A.; Allamandola, L.J. and Tielens, A.G.G.M., ApJSS., 86, 713 (1993).

(110) Encrenaz, T., *The New Solar System*. J. Kelly Beatty and Andrew Chaikin (eds.). Cambridge (Massachusetts) (1990).

(111) Boland, W. and de Jong, T., Ap.J., 261, 110 (1982).

(112) Willner, S.P., Pnetter, R.C., Russell, R.W. and Soifer, B.T., Astrophys. Sp. Sci.,
65, 95 (1979).

(113) Anders, E. and Grevesse, N., Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 19 (1989).