

Junio 2006

Revista de Ciencia y Técnica N° 12

LA QUÍMICA INTERESTELAR

Eduardo A. Castro

Unidad Ejecutora: INIFTA, División Química Teórica, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP, Suc.4, C.C. 16, La Plata 1900, Buenos Aires.

e-mail: castro@quimica.unlp.edu.ar / jubert@arnet.com.ar

En el lejano espacio, en regiones que son increíblemente frías y oscuras, se están formando lentamente diversas clases de moléculas. Poco a poco, a través de billones de años, un manojito de gas que contiene más de 120 pequeñas moléculas diferentes así como algunas otras algo más complejas, se van desarrollando en torno a pequeñas partículas pulverulentas. Ocasionalmente, las moléculas gaseosas colisionan con granos pulverulentos. Algunas se congelan en el mismo sitio; otras se separan, pero no sin antes haber sufrido alguna clase de transformación en otras moléculas más complejas debido a ciertas interacciones superficiales. Eventualmente, en un tipo de proceso que aun no se conoce bien, una porción del gas pulverulento colapsa en sí mismo. Algunos cambios de temperatura, ciertas modificaciones químicas y, literalmente, nace una estrella !!

Esta clase de proceso continúa siempre, pero a tales distancias es difícil de ser observado y mucho menos factible resulta modelarlo o replicarlo con alguna certeza en el laboratorio químico. Sin embargo, a pesar de estos y otros obstáculos, los astrónomos, los físicos y los químicos están abocados a construir un proceso detallado de los cambios que se producen en estas regiones conocidas con el nombre de nubes interestelares.

Si la química es la ciencia de las transformaciones moleculares, es permisible afirmar que esta ciencia comienza en estas regiones frías y oscuras localizadas entre las estrellas. Al tiempo que las estrellas más viejas van terminando sus vidas, sea que exploten o que se rompan, la materia que las constituían se dispersan en el medio interestelar, donde pueden volver a reunirse bajo la acción gravitatoria para formar otras nubes. Una parte de esta materia se encuentra en la forma de partículas pulverulentas pequeñas, típicamente de dimensiones de una décima-ava parte de un

micrómetro. La evidencia espectroscópica ha revelado que estas harto pequeñas partículas son de dos tipos: algunas son silicatos metálicos y otras son de naturaleza carbonácea.

Pero la mayor parte de la materia emergente de esas explosiones estelares son de naturaleza atómica. Un 99% de la nube está constituida por átomos en fase gaseosa y 1% son partículas pulverulentas. El hidrógeno es el elemento más abundante que se encuentra en estas nubes, con una presencia minoritaria (concentraciones menores en cuatro órdenes de magnitud respecto del hidrógeno) de carbono, nitrógeno y oxígeno.

Estas nubes no son uniformes. Las regiones más pulverulentas son también las más frías y oscuras, porque las partículas de polvo absorben la luz estelar en las regiones visible y ultravioleta y la re-emiten en el ámbito infrarrojo como calor. Sorprendentemente, estas regiones frías y oscuras, dónde la temperatura media es de sólo 10 K, son también aquellas dónde existe la química más rica y variada. Esto es así porque la absorción de radiación ultravioleta hace que las partículas de polvo protejan a las moléculas recientemente formadas de su destrucción inmediata, brindando la posibilidad de desarrollarse reacciones posteriores conducentes a la formación de moléculas más complejas. Adicionalmente, las partículas suministran una superficie catalítica sobre las cuales pueden tener lugar las reacciones que serían menos probables, sino imposible, que se desarrollen en la fase gaseosa.

La característica clave de la química que tiene lugar en estas nubes es que ellas toman un largo tiempo para completarse. Las partes más densas de las nubes contienen algo así como unas 10.000 moléculas por centímetro cúbico, lo cual representa un estado de vacío que cualquier otro que pueda ser obtenido en un laboratorio. La consecuencia de esta baja densidad es que las colisiones entre moléculas y átomos en fase gaseosa sean muy raras. A modo de ejemplo, se puede decir que una colisión de un átomo con otro sucede una vez al día, en vez de los billones de colisiones por segundo que tienen lugar en un gas a presión atmosférica !!

Sin embargo, a lo largo de los billones de años de existencia de estas nubes, tienen lugar un número suficiente de colisiones como para que se formen las moléculas. La evidencia espectroscópica confirma la presencia de una amplia gama de moléculas, tanto en la fase gaseosa como en forma de mantos helados que recubren las superficies de los granos de polvo interestelar. Casi cada átomo en estas nubes está ligado a alguna clase de molécula. Se han identificado en la fase gaseosa más de 120 clases de moléculas, cuyas complejidades varían desde las diatómicas

hasta otras conteniendo hasta 13 átomos. Alrededor de la mitad de ellas son del tipo orgánico, incluyendo representantes de las clases familiares de aquellas encontradas en la tierra, tales como nitrilos, aldehídos, aminas, amidas, ácidos, éteres y cetonas, así como hidrocarburos de cadenas extensas. Además, las caracterizaciones espectrales realizadas sugieren que algunos hidrocarburos policíclicos aromáticos más grandes, conteniendo 100 o más átomos de carbono también se encuentran presentes en estas nubes.

Los datos espectroscópicos provenientes de la fase gaseosa de las nubes interestelares es más detallado y menos ambiguo que aquellos provenientes de los hielos. La información acerca de las moléculas en estado gaseoso proviene principalmente de la espectroscopia rotacional realizada en la región de las microondas, a la cual los astrónomos la denominan “radioastronomía”. Los hielos pueden ser estudiados solamente por medio de la espectroscopia de infrarrojo, la cual es más difícil de trabajar por la interferencia del agua, en forma de vapor, en la atmósfera terrestre. Los mejores datos los suministran los instrumentos localizados en satélites, especialmente uno de la Agencia Espacial Europea, llamado el Observatorio Espacial de Infrarrojo (ISO). Este satélite estuvo operando desde 1995 hasta el mes de mayo de 1998 y los datos registrados se continúan analizando, a fin de sumarlos a la información básica que los químicos y astrónomos poseen acerca de estas nubes.

Hace más de 30 años, Herbst y William Klemperer propusieron que la mayor parte de la química en fase gaseosa en las nubes interestelares podría estar asentada en las reacciones de iones moleculares. La radiación cósmica podría producir iones energizados para iniciar estas reacciones, las cuales, debido al hecho que ellas requieren poca o ninguna energía de activación, podrían llevarse a cabo aún a temperaturas tan bajas como 10 K. El modelo ofrece una explicación para la mezcla inusual, de acuerdo a los estándares terrestres, de moléculas localizadas en las nubes interestelares, y el mismo todavía constituye el núcleo central de la comprensión corriente de la química en fase gaseosa de las nubes.

Aunque la química en fase gaseosa es importante, las reacciones sobre las superficies de partículas así como las que tienen lugar en las capas de hielo que se forman alrededor de aquellas, también tiene su importancia. La molécula que registra mayor abundancia en el espacio interestelar, la molécula de hidrógeno, no podría tener esta clase de abundancia si ella fuera generada sólo mediante reacciones en fase gaseosa. Dos átomos de hidrógeno que colisionan llevan una cantidad

de energía tal que debe estar presente un tercer cuerpo, tal como una partícula de polvo, para absorber parte de esa energía pues en caso contrario esa molécula generada se disociaría.

Parece probable que la mezcla de moléculas formadas a través de las reacciones químicas superficiales es distinta a los productos generados en la fase gaseosa. Las moléculas que se forman por medio de la química superficial están más hidrogenadas, más saturadas en el sentido químico, que aquellas generadas en la fase gaseosa. Una de las características salientes de las moléculas interestelares en fase gaseosa es que ellas están altamente insaturadas, con muchos enlaces múltiples, especialmente entre los átomos de carbono.

Pero los procesos químicos se mezclan. Algunos de los hielos se pueden evaporar y pasar a la fase gaseosa, y naturalmente, las moléculas en fase gaseosa pueden condensarse y pasar a la fase sólida. Si se consideran a las regiones más cálidas, dónde las estrellas se están formando, la mezcla de moléculas en fase gaseosa llega a adquirir un carácter mucho más saturado. La correspondiente interpretación es que los mantos helados se funden y todas las moléculas ricas en hidrógeno que se forman en el hielo, ahora se encuentran en la fase gaseosa. Debe hacerse notar que la comprensión en detalles de la química en fase sólida y de superficie sucediendo en las nubes interestelares es un problema algo complicado de estudiar. Las partículas pulverulentas son generadas en los mantos helados compuestos principalmente de agua helada, y contienen dióxido de carbono, monóxido de carbono y pequeñas cantidades de otras moléculas tales como formaldehído y metanol. Los hielos no son uniformes tanto en el sentido de la composición química como en su estructura física.

Al no conocer exactamente qué es la superficie, entonces el conocimiento de los procesos es algo difícil. Ellos dependen fuertemente de la naturaleza exacta del material y los modelos que puedan formularse para comprender estos fenómenos están muy influenciados por la exacta naturaleza de los materiales y por ende, al carecer de la información precisa, hay que efectuar un buen número de suposiciones simplificadoras. Por ejemplo, se supone que la mayoría de los procesos químicos tiene lugar por medio de la difusión sobre la superficie. En otras palabras, si uno imagina a dos especies localizadas sobre esa superficie y están débilmente ligadas, ellas difunden hasta encontrarse. Esta es la interpretación gráfica y hay evidencia experimental de que la soporta. Pero es muy probable que esta representación sea hartó simplificada y hay otras posibilidades, tal como que las especies estén fuertemente ligadas, inmóviles y sufriendo el ataque de otras especies provenientes de la fase gaseosa.

Aunque las reacciones iónico-moleculares son muy importantes en la fase gaseosa, estas no son la única clase de reacciones químicas que pueden estar produciéndose. Un buen número de evidencias experimentales demuestran que las interacciones entre los átomos neutros o moléculas pueden tener lugar a muy bajas temperaturas como las encontradas en las nubes interestelares. Este tipo de reacciones posiblemente generen un grado adicional de complejidad en la química en fase gaseosa. En la década pasada, los fisicoquímicos Ian W. M. Smith y Bertrand Rowe han estado empleando una técnica desarrollada originalmente para el estudio de las reacciones iónico-moleculares a temperaturas extremadamente bajas para estudiar reacciones similares entre moléculas neutras. Algunas de estas reacciones, tal como las reacciones de los radicales CN con hidrocarburos no-saturados para formar ciano-polienos, tienen lugar a una velocidad grande a 10 K como para no ser incluidas en los modelos teóricos de la química en esas nubes.

Las reacciones que requieren una energía de activación significativa se desarrollan tan lentamente a los 10 K que ellas no tendrían mayores influencias en los procesos globales de esta clase de química interestelar. Pero no todas las reacciones entre dos radicales neutros o moléculas demandan activación. Los experimentos han identificado cerca de 50 de estas reacciones que se desarrollan más rápido cuando la temperatura es tan baja. Algunas de las velocidades medidas en estas reacciones a bajas temperaturas son tan rápidas que ellas se aproximan a las velocidades que uno esperaría si esencialmente cada colisión sea efectiva para producir la reacción. Esta velocidad es conveniente porque sólo se pueden medir reacciones rápidas con las técnicas disponibles.

La técnica usada es la denominada cinética de reacción en un flujo supersónico uniforme (CRESU). Las moléculas reactantes un gas transportador se enfrían a temperaturas muy bajas por medio de la expansión a través de una boquilla especialmente diseñada. La molécula cae a una temperatura tan baja como 7 K bajo condiciones que no son suficientemente uniformes como para estudiar las velocidades de reacción. Luego, los láseres pulsados se emplean para generar radicales libres y para observar la velocidad a la cual ellos son removidos. Si bien las temperaturas en estos experimentos son comparables a aquellas en las nubes interestelares, las densidades no lo son. Apelando a la ley de acción de masas se puede inferir que es posible escalar a las densidades que imperan en la nube interestelar.

La técnica es relativamente sencilla si al menos uno de los reactantes es de fácil disponibilidad como gas puro. Los experimentos son bastante más complejos si ambos reactantes son raros o inestables, de modo que ellos tienen que ser sintetizados justo antes de llevar a cabo un

experimento. Desafortunadamente, este no es el caso con muchas de las especies de interés en las nubes interestelares. Actualmente se está alcanzando el punto especialmente difícil porque ya se han casi agotado las reacciones que fáciles de estudiar con las técnicas disponibles. En este punto, la ayuda del trabajo teórico puede ser determinante para testear los modelos propuestos para la química interestelar. Esta tarea podría derivar en la predicción las velocidades de reacción que no pueden ser medidas con los recursos técnicos actuales. Como los experimentos han adquirido tal grado de dificultad, entonces es necesario ser más selectivo en la elección del sistema a estudiar, tratando de escoger aquellos que probablemente puedan brindar información relevante que tenga una fuerte significación en la astroquímica.

Uno de los experimentos corrientes se refiere a la reacción entre los átomos de oxígeno y radicales hidroxilo. Parece extraño interpretar el porqué no hay más dióxígeno en las nubes interestelares que aquellas concentraciones medidas. Una posibilidad sugerente es que la reacción que modela la predicción de la fuente de generación de O_2 en las nubes puede ser más lenta que la inferida a partir de los datos extraídos de los experimentos a más altas temperaturas. Sin embargo, esto no parece ser el caso para estos experimentos de Smith y col. En las medidas realizadas por debajo de los 38 K la velocidad de reacción no parece disminuir a temperaturas más bajas.

Otros investigadores están intentando replicar la química que tiene lugar en los granos pulverulentos de las nubes interestelares. Los esfuerzos iniciales se han focalizado en la formación del hidrógeno molecular, la molécula más sencilla que aparece en las nubes interestelares y también la más importante. El hidrógeno es la molécula más abundante en el universo. Este solo hecho la hace especialmente importante para comprender como se forma. En las nubes interestelares, donde su concentración es cinco órdenes de magnitud mayor que cualquier otra molécula, su presencia también determina fuertemente al resto de los procesos químicos que se desarrollan, al menos, en la fase gaseosa.

Los químicos teóricos han propuesto en 1960 que casi todo el hidrógeno molecular en las nubes interestelares se forman en la superficie de las partículas de los polvos. En el año 1997 se pudo concretar esta síntesis en el laboratorio bajo condiciones que se asemejan a aquellas imperantes en las nubes interestelares. En el experimento efectuado en condiciones de ultra-alto vacío, se dirige un haz de átomos de hidrógeno, enfriado a 150 a 200 K hacia una superficie de olivina enfriada a 5 – 15 K. La olivina es un mineral tipo silicato, escogido por su semejanza a las partículas de polvo silicato interestelar. En total acuerdo con lo predicho teóricamente, algunos de

los átomos se adhieren a la superficie y se difunden a través de ella hasta que encuentran otros átomos de hidrógeno. Cuando reaccionan ambos átomos, una fracción del exceso de energía era absorbida por el silicato estabilizando a la molécula recién formada, la cual luego se desorbe de la superficie, para ser detectada finalmente por medio de la espectrometría de masa.

Los investigadores también han realizado este experimento en otras dos superficies a temperaturas bajas: carbono amorfo y agua congelada. Con ello se han cubierto las tres clases de superficies que se creen estén presentes en el medio interestelar. La mayor diferencia entre el proceso que tiene lugar en el espacio y aquel que puede simularse en el laboratorio es que se emplean superficies en vez de granos separados. Esa diferencia es posible que cambie algunos de los detalles del proceso. Por ejemplo, la energía absorbida de la reacción puede aumentar la temperatura de un simple grano, aunque esto no sucede sobre una superficie macroscópica.

También se ha estudiado como el monóxido de carbono puede formarse en las nubes interestelares. El monóxido de carbono es una molécula interestelar inusual porque ella se observa solamente en los hielos que se forman bajo condiciones apropiadas en torno a los granos pulverulentos y esto no se encuentra presente en la fase gaseosa. Esto la hace constituirse como una muy buena prueba de las reacciones superficiales sobre los granos. En sus experimentos, los investigadores depositan monóxido de carbono y átomos de oxígeno sobre un sustrato y a temperaturas interestelares. Luego se cubren a estos reactantes con una capa de hielo y se calienta lentamente el sistema, alcanzando eventualmente temperaturas entre 140 a 150 K. Se encontró que el CO y los átomos de oxígeno se mueven a través de la capa de agua helada para combinarse y formar así dióxido de carbono. El dióxido recién formado permanece en el hielo hasta que se produce la sublimación de este último, que es el momento en que se detecta el CO₂ en la fase gaseosa. Este experimento es particularmente importante, porque hasta el momento que se concretó, se suponía que para formarse dióxido de carbono en los hielos, debería desarrollarse alguna clase de proceso energético por medio de partículas energizadas o por la acción de la luz ultravioleta.

Otro grupo de trabajo multidisciplinar localizado en el University College, London, también están investigando el papel de las superficies en la química interestelar. Se supone que la clave de la moderna astroquímica es aquello que sucede en las superficies y en este sentido la interacción entre la astronomía y la química es muy estrecha e importante. En particular, merece destacarse que la gravedad determina lo que sucede en la formación de las estrellas, aunque hay otros factores, tales como el magnetismo y la temperatura. Para comprender el papel del magnetismo en las nubes

formadoras de las estrellas, es necesario saber que iones están presentes. Pero para ello, hay que saber qué procesos químicos tienen lugar, ya que ellos están determinados en buena medida por las interacciones ión-molécula. Y las mismas moléculas se congelan sobre los granos para formar los hielos. El hecho de que algunas moléculas puedan adherirse a los granos y otras no lo hagan tiene influencia sobre los procesos químicos y ello, a su vez, afecta el nivel de ionización, lo cual influye la cantidad de soporte magnético que existe en el gas. Como puede verse, hay una buena cantidad de fenómenos e influencias que deben tenerse en cuenta para entender estos fenómenos astroquímicos. También se están empezando a desarrollar otros experimentos para investigar otras reacciones químicas, tal como la formación de hidruros, que se desarrollan sobre las partículas y al mismo tiempo se llevan a cabo estudios de tipo teórico para complementarlos.

Como puede constatarse a través de estos desarrollos, la química interestelar es un asunto bastante complejo, la cual demanda de un buen número de equipos multidisciplinarios y el empleo de diversas técnicas sofisticadas y una buena cantidad de imaginación para poder interpretar apropiadamente los fenómenos esenciales que están sucediendo de continuo en la formación incipiente de los cuerpos celestes. Es dable esperar, que estos avances continúen brindando nuevas y valiosas informaciones y al mismo tiempo impulsar la apertura de nuevas perspectivas acerca de cómo encarar esta clase de estudios.