La Química del Cosmos

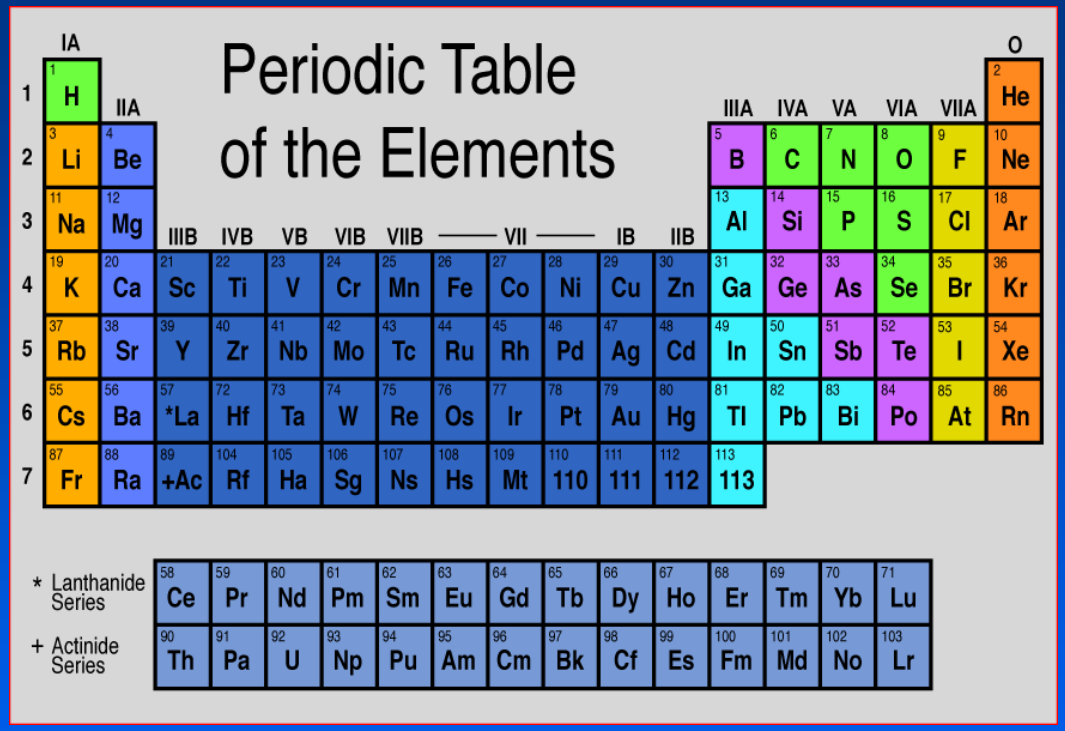
Víctor J. Herrero.

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

v.herrero@csic.es

http://hdl.handle.net/10261/42362

Elementos y compuestos



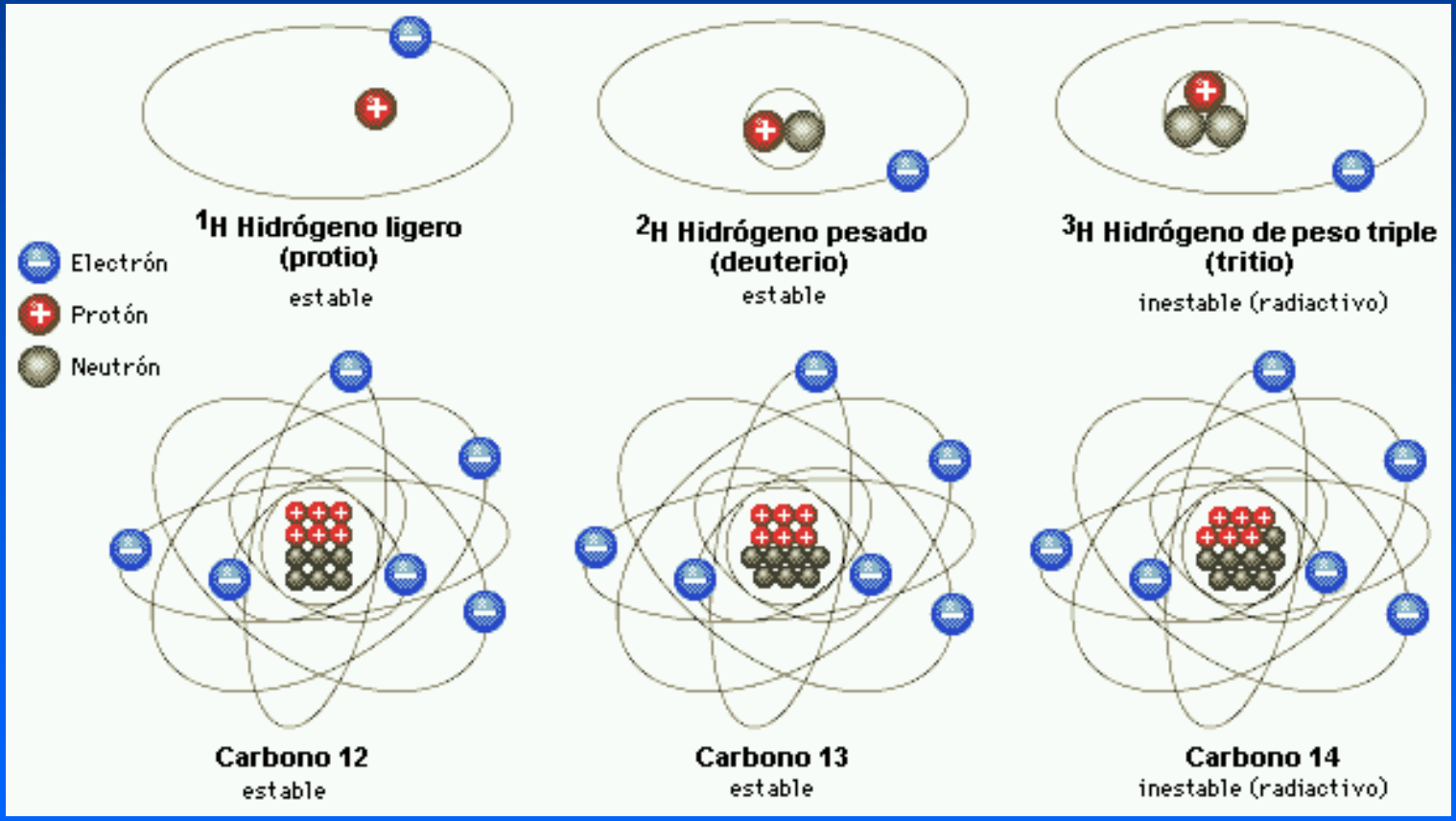
$C_{12}H_{22}O_{11}$

Au

H_2O

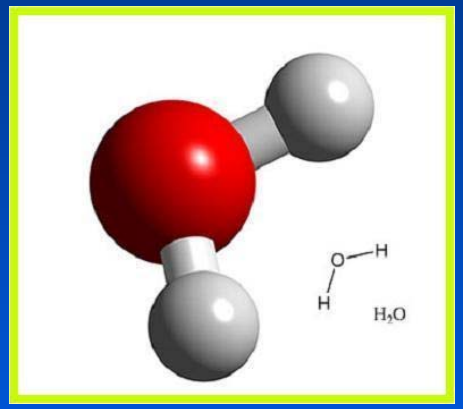
NO_2

Átomos e isótopos

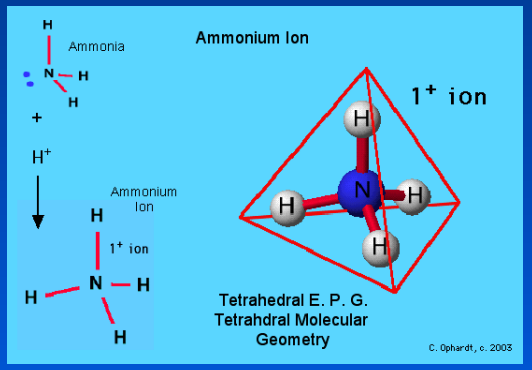


Moléculas y iones

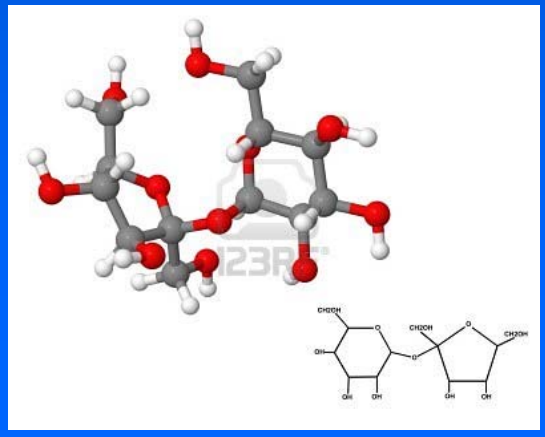
H_2O



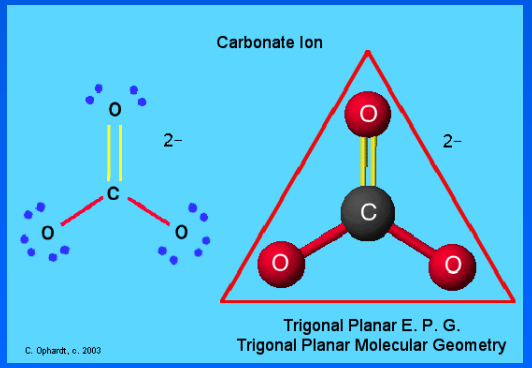
NH_4^+



$C_{12}H_{22}O_{11}$



CO_3^{2-}

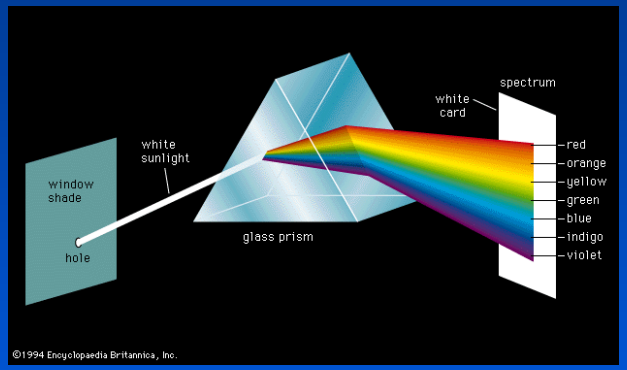


“Nunca sabremos de qué están hechas las estrellas”

A. Compte, hacia 1850

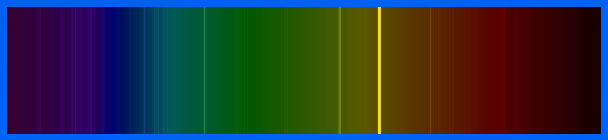
Análisis espectral

hacia 1850

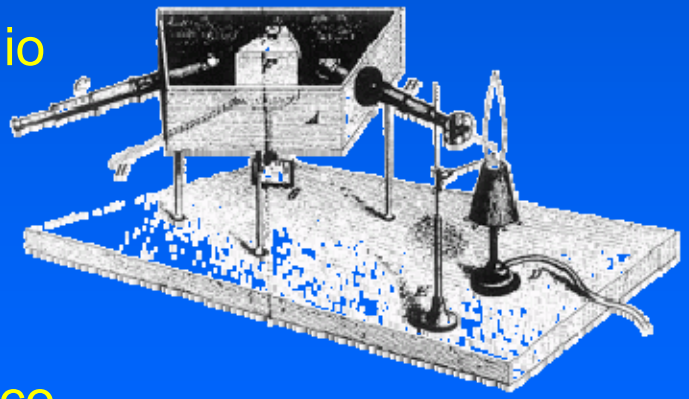


G. Kirchhoff y
R. Bunsen

Espectro de emisión del sodio



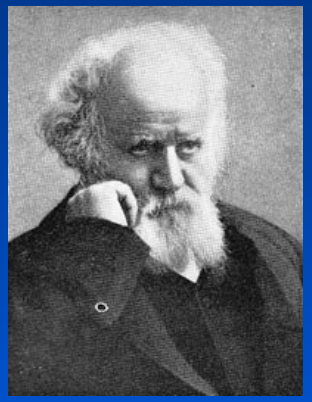
Patrón de líneas característico



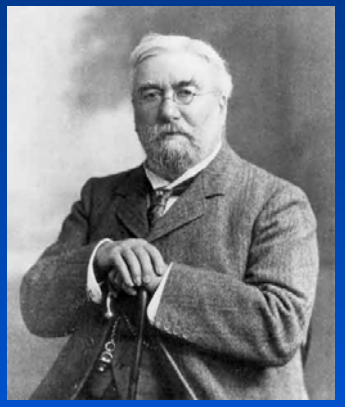
Descubrimiento del helio

1868

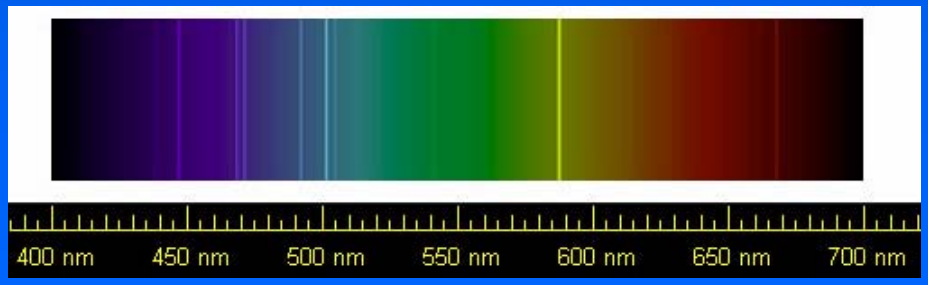
Espectro durante eclipse solar



P. J. Janssen



N. Lockyer



Líneas características del He

- En la Tierra el He es raro y no se aisló hasta 1895

A&A 525, A44 (2011)
DOI: 10.1051/0004-6361/201015006
© ESO 2010

Astronomy & Astrophysics

Infrared Mn I laboratory oscillator strengths for the study of late type stars and ultracool dwarfs

R. Blackwell-Whitehead[1,2], Y. V. Pavlenko[3,4], G. Nave[5], J. C. Pickering[2], H. R. A. Jones[3], Y. Lyubchik[4], and H. Nilsson[1]

3. Laboratory oscillator strengths

Table 1 presents the *BF*s, transition probabilities and oscillator strengths. The oscillator strengths were obtained by combining the *BF*s with the published radiative lifetimes of Kronfeldt et al. (1985) and Schnabel et al. (1995). The Mn I Ritz wavenumbers in Table 1 are determined from the upper and lower energy level values from the NIST atomic Spectra Database (Ralchenko et al. 2009), which are taken from the term analysis of Catalán et al. (1964). The air wavelengths in Table 1 have been determined with the Edlén (1966) equation, and include the more recent update for the refractive index of air, Eq. (3) in Birch & Downs (1994). All lines measured in this work have a peak signal to noise ratio of more than 100, and the *BF* uncertainties are dominated by the tungsten lamp calibration uncertainty and the uncertainty in the intensity calibration "cross-over" between the two spectral regions. The uncertainty in the oscillator strength is determined from the *BF* and lifetime uncertainty using the criteria discussed by Sikström et al. (2002) and follows the NIST guidelines for evaluating and expressing uncertainty (Taylor & Kuyatt 1994).

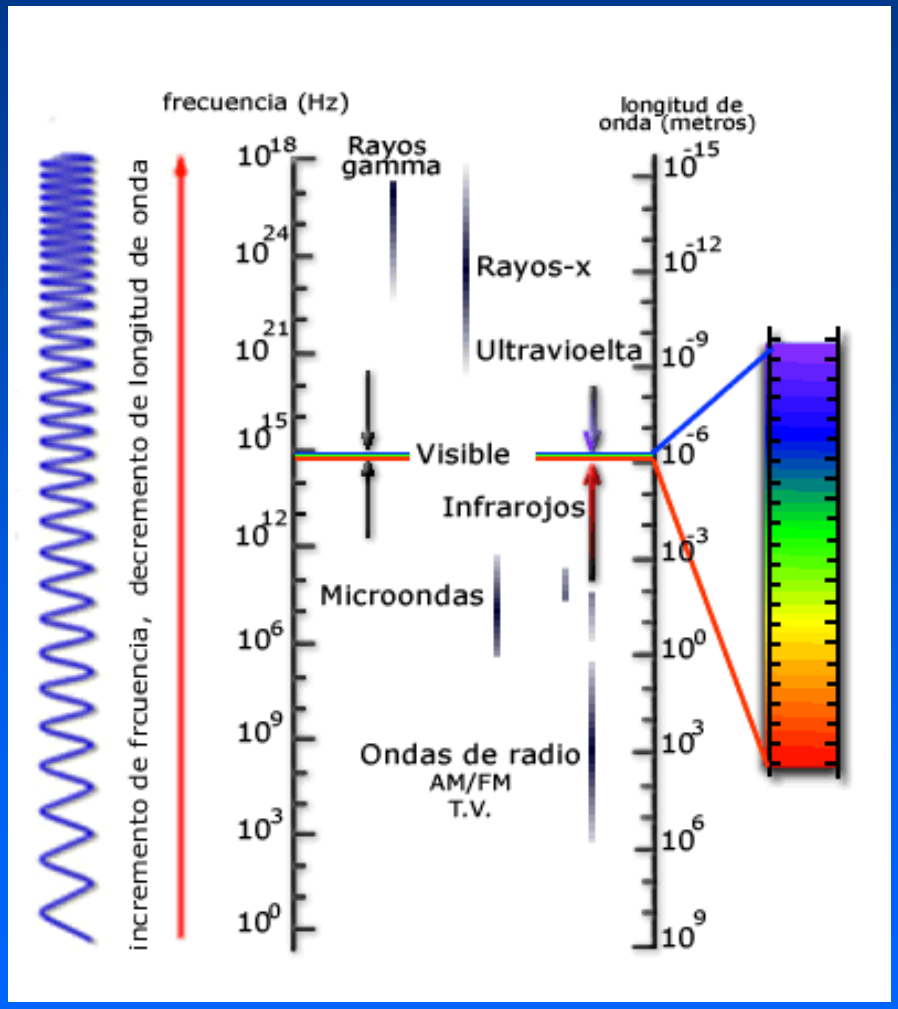
It can be seen that our oscillator strengths for the transitions

. . . estrellas de tipo tardío y enanas ultrafrías

M. A. Catalán
(1894-1957)

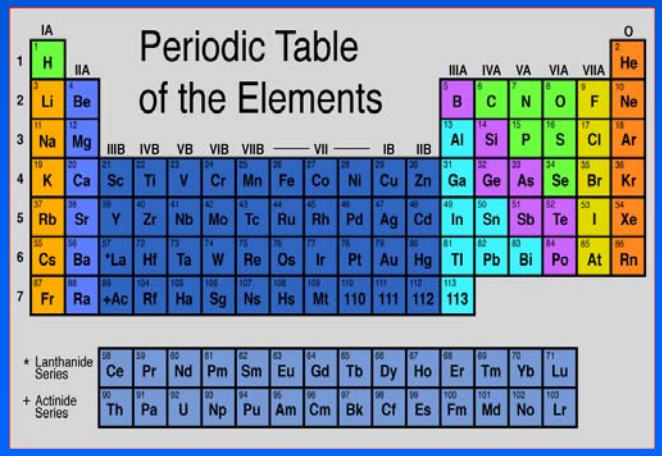
Espectro electromagnético

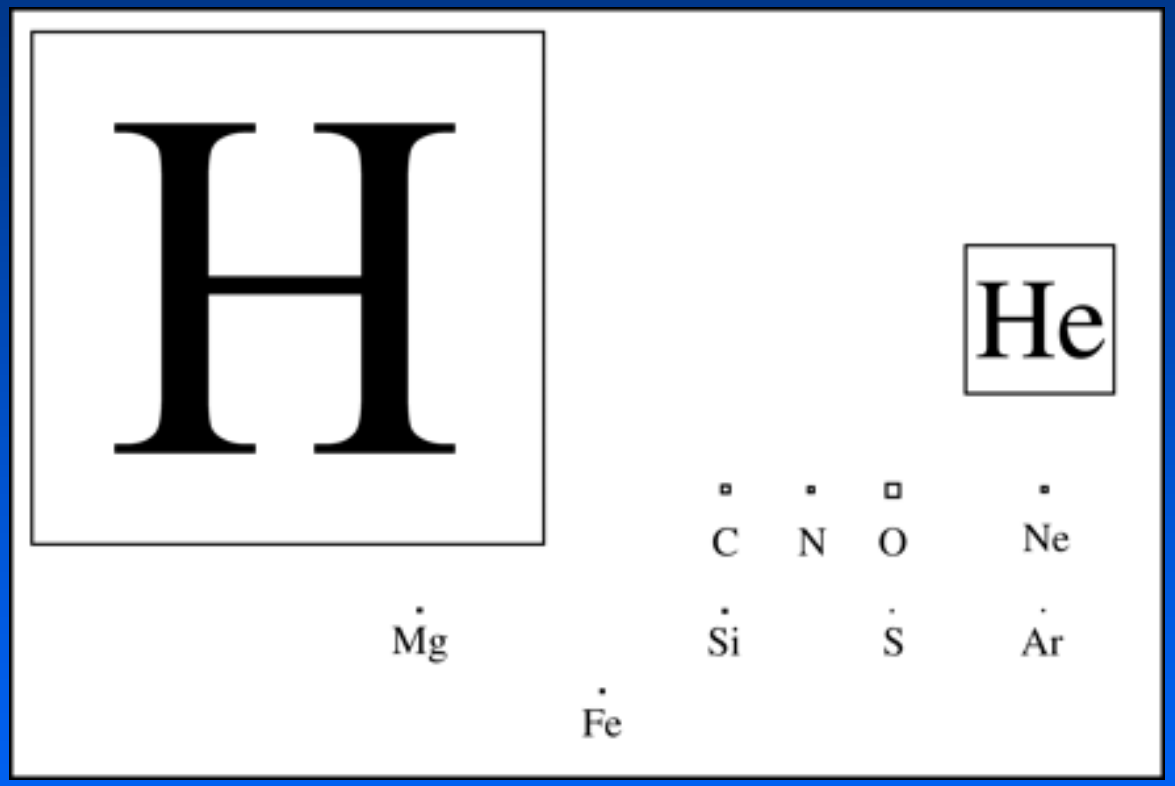
- Niveles electrónicos →
- Vibraciones moleculares →
- Rotaciones moleculares →



Nota: 10^{3} =1000 ; 10^{-3}=0,001

Sistema periodico “astronómico”

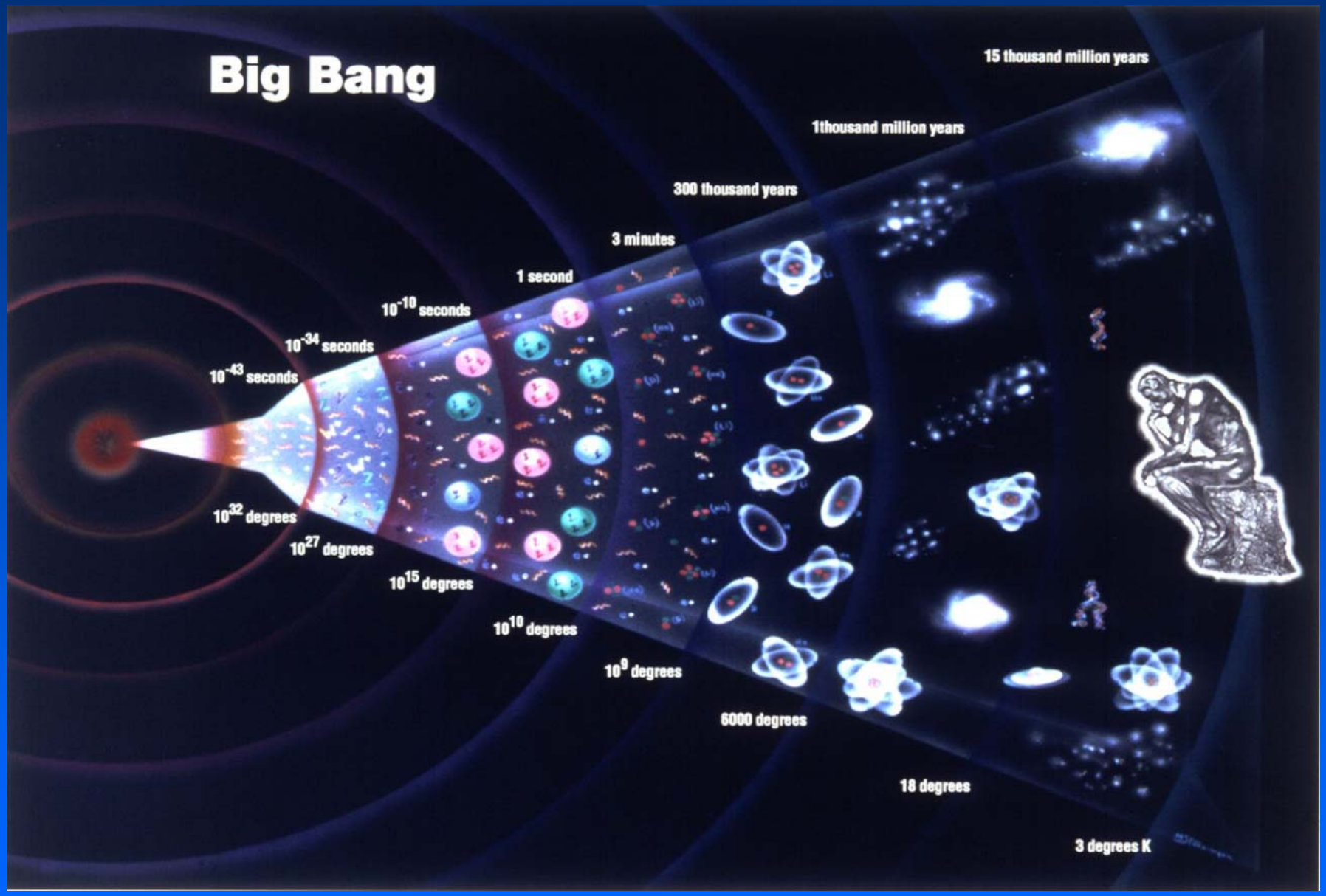




Elementos más abundantes

Origen de los elementos

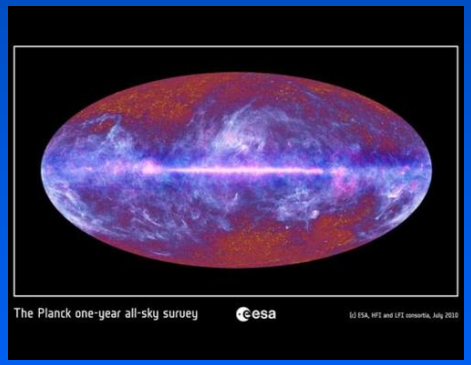
- Nucleosíntesis primordial
- Nucleosíntesis estelar


Big Bang
15 thousand million years
1thousand million years
300 thousand years
3 minutes
1 second
10^{-10} seconds
10^{-34} seconds
10^{-43} seconds
10^{32} degrees
10^{27} degrees
10^{15} degrees
10^{10} degrees
10^{9} degrees
6000 degrees
18 degrees
3 degrees K

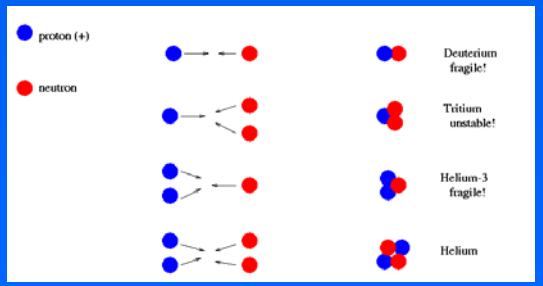
Química

Justificación del modelo del Big Bang

- Expansión del Universo
  - Corrimiento al rojo
  - Constante de Hubble



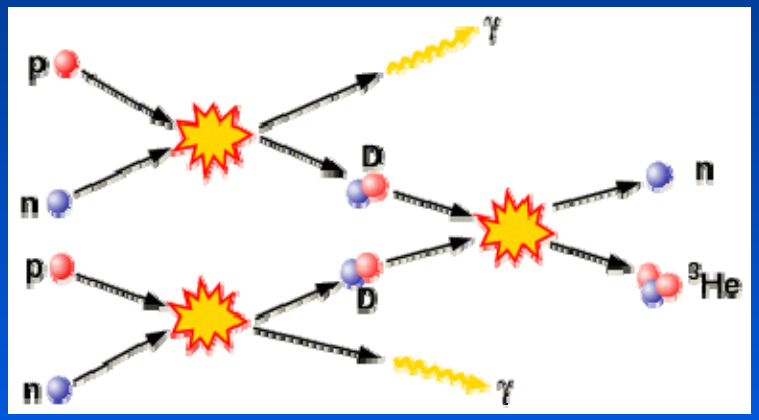
- Radiación de fondo
  - Microondas 2.7 K (-270,3 ºC)
  - Muy homogénea



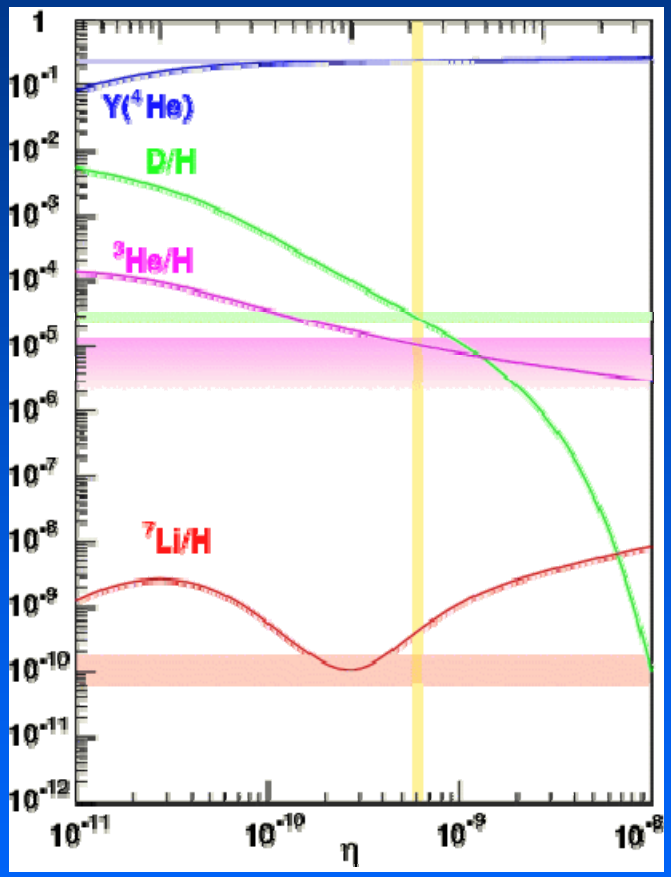
- Proporción de elementos ligeros
  - Nucleosíntesis primordial

Nucleosíntesis primordial

Ejemplo de reacciones

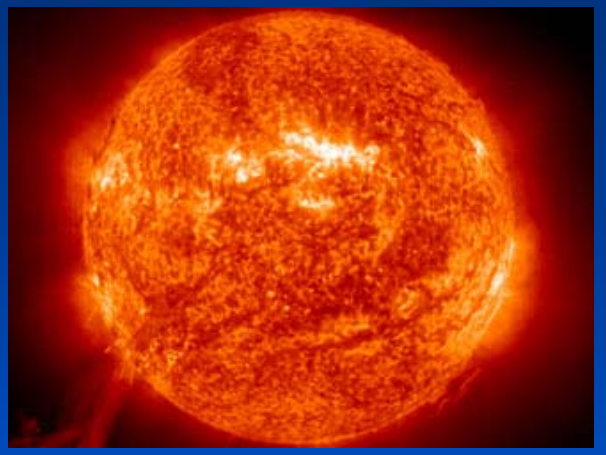


- Expansión y enfriamiento detienen el proceso
- Solo se forman elementos ligeros: H (D), He, trazas de Li, Be



Modelo y observaciones

Nucleosíntesis estelar

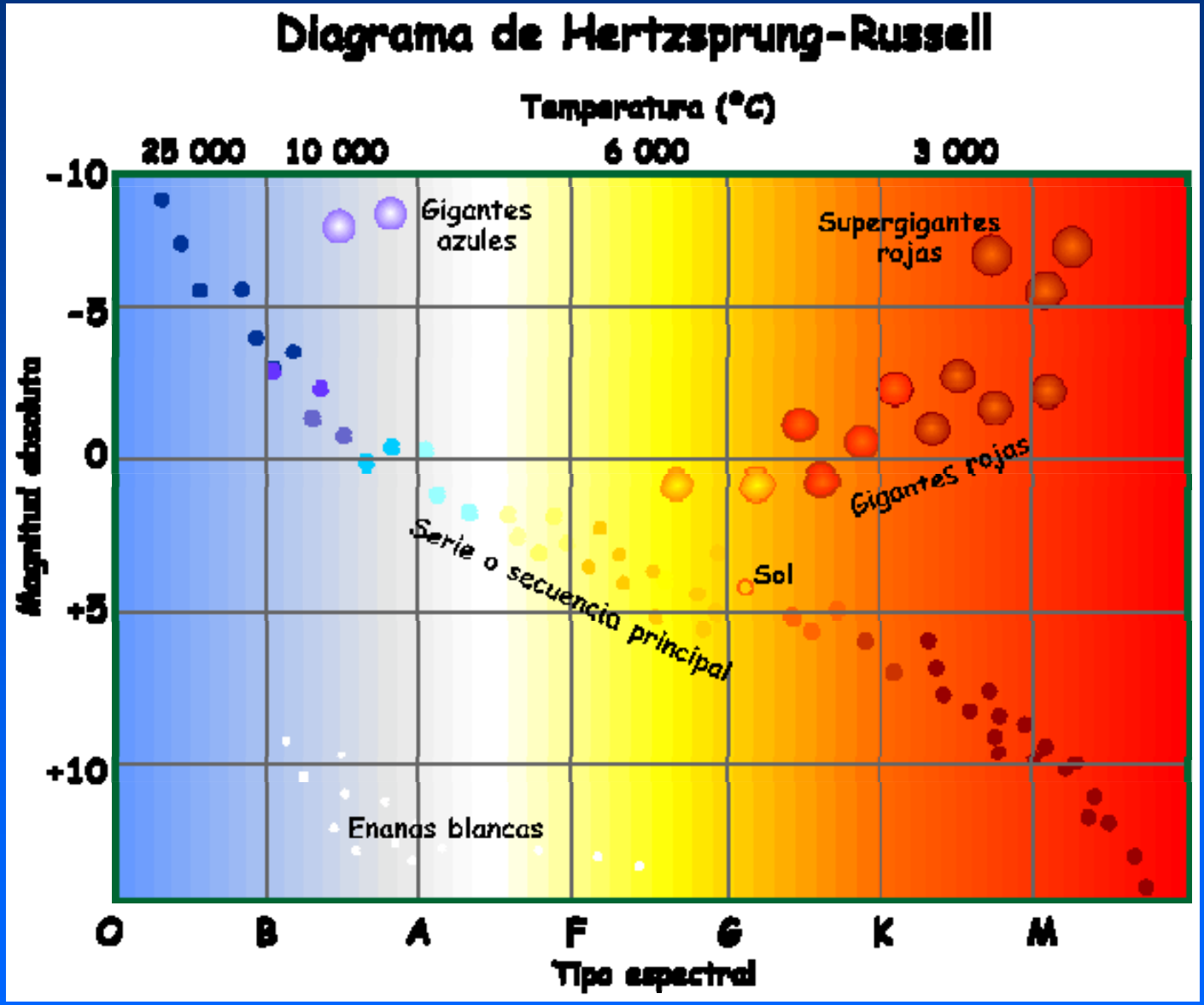


- Atracción gravitatoria <—> fusión nuclear
- Fusión nuclear: elementos ligeros producen elementos mas pesados

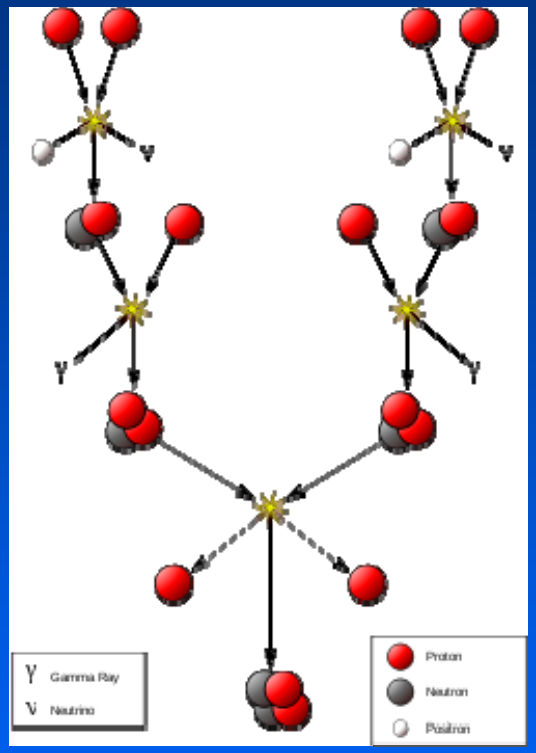
- El proceso continúa en varias fases hasta que se consume el combustible nuclear.
- La primera generación de estrellas tras el Big Bang sólo debió contener inicialmente H y He
- Las generaciónes posteriores de estrellas incorporan ya otros átomos ("metales") desde el principio

Nota: en astronomía se llaman "metales" a los átomos distintos de H y He

Tipos de estrellas

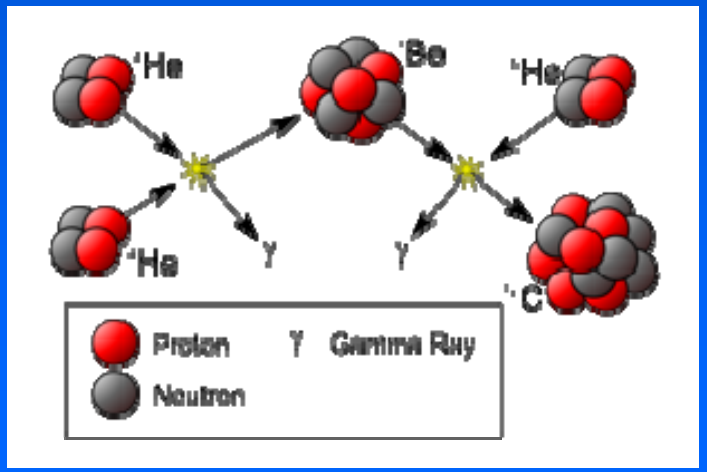


Nucleosíntesis estelar

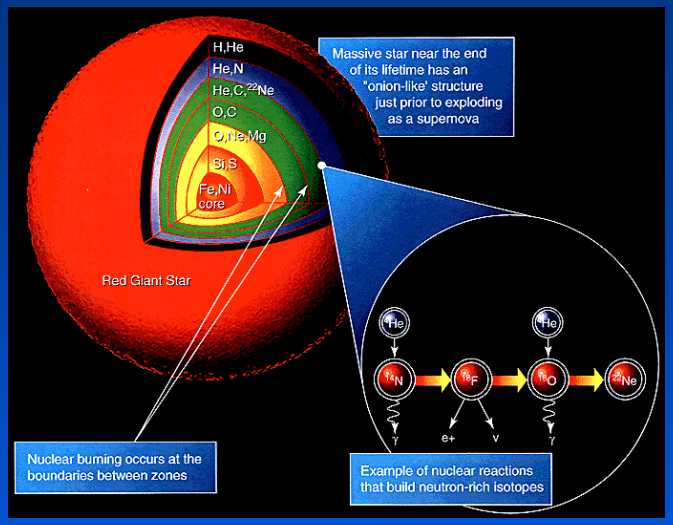


- Cadena protón-protón
  - H → He
  - Secuencia principal

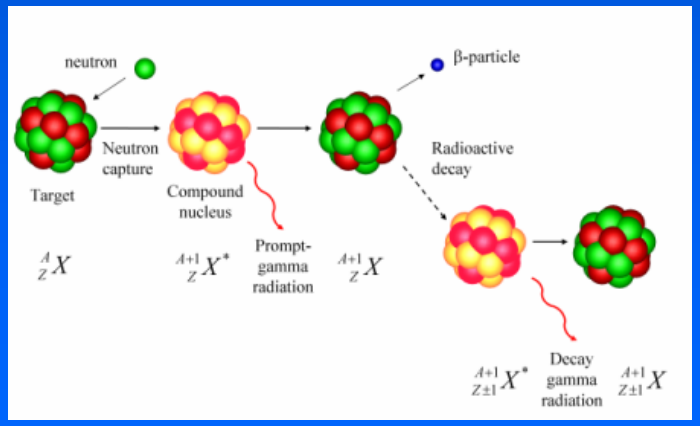
- Cadena triple α
  - He → C



Nucleosíntesis estelar

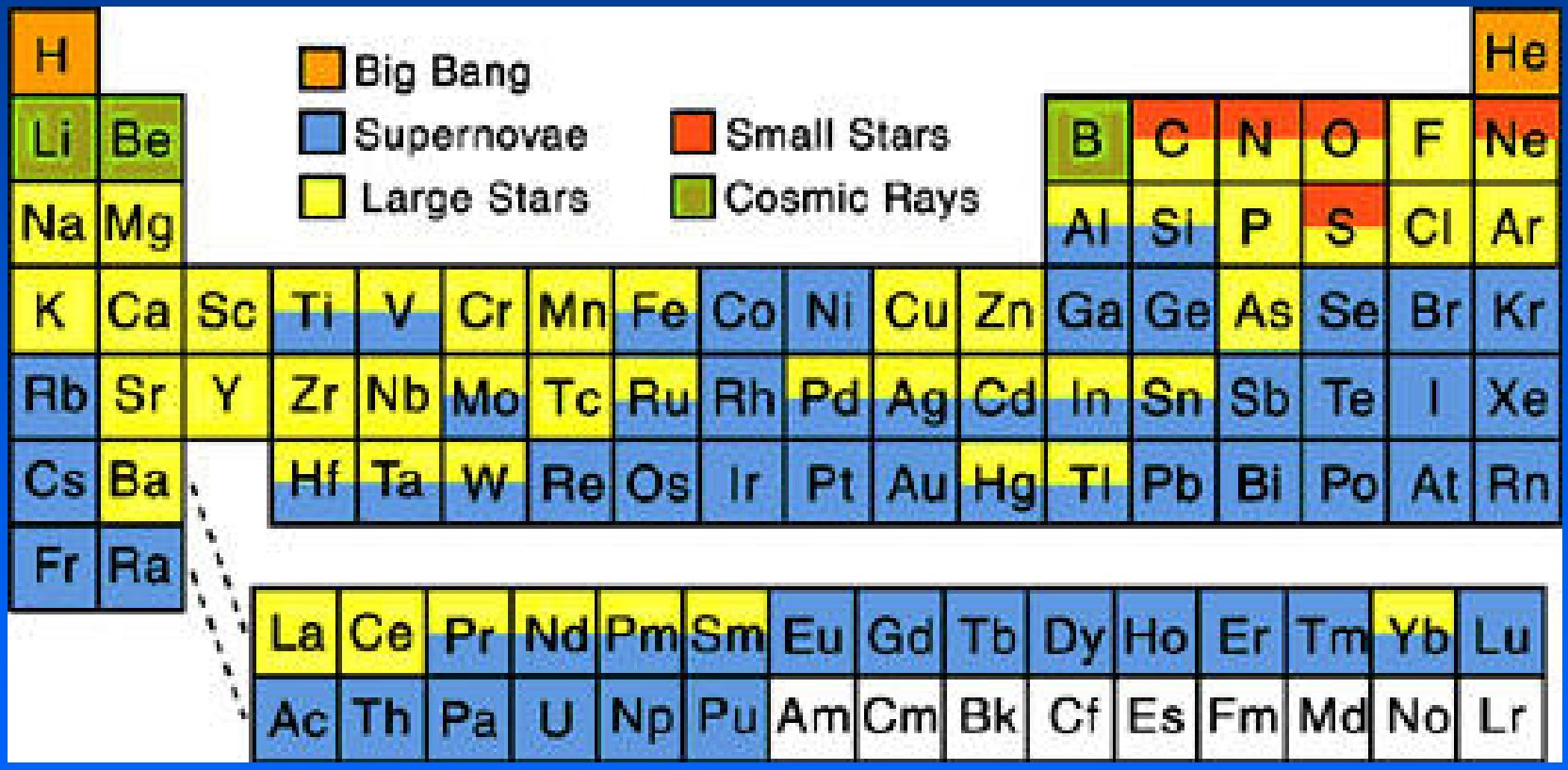


Estrella masiva (capas)



- En estrellas grandes, la fusión de elementos cada vez mas pesados da lugar a una estructura en capas
- A partir del hierro la fusión no es efectiva y los elementos se forman por captura de neutrones
- En las explosiones de supernovas se producen flujos muy altos de neutrones que forman muchos elementos pesados

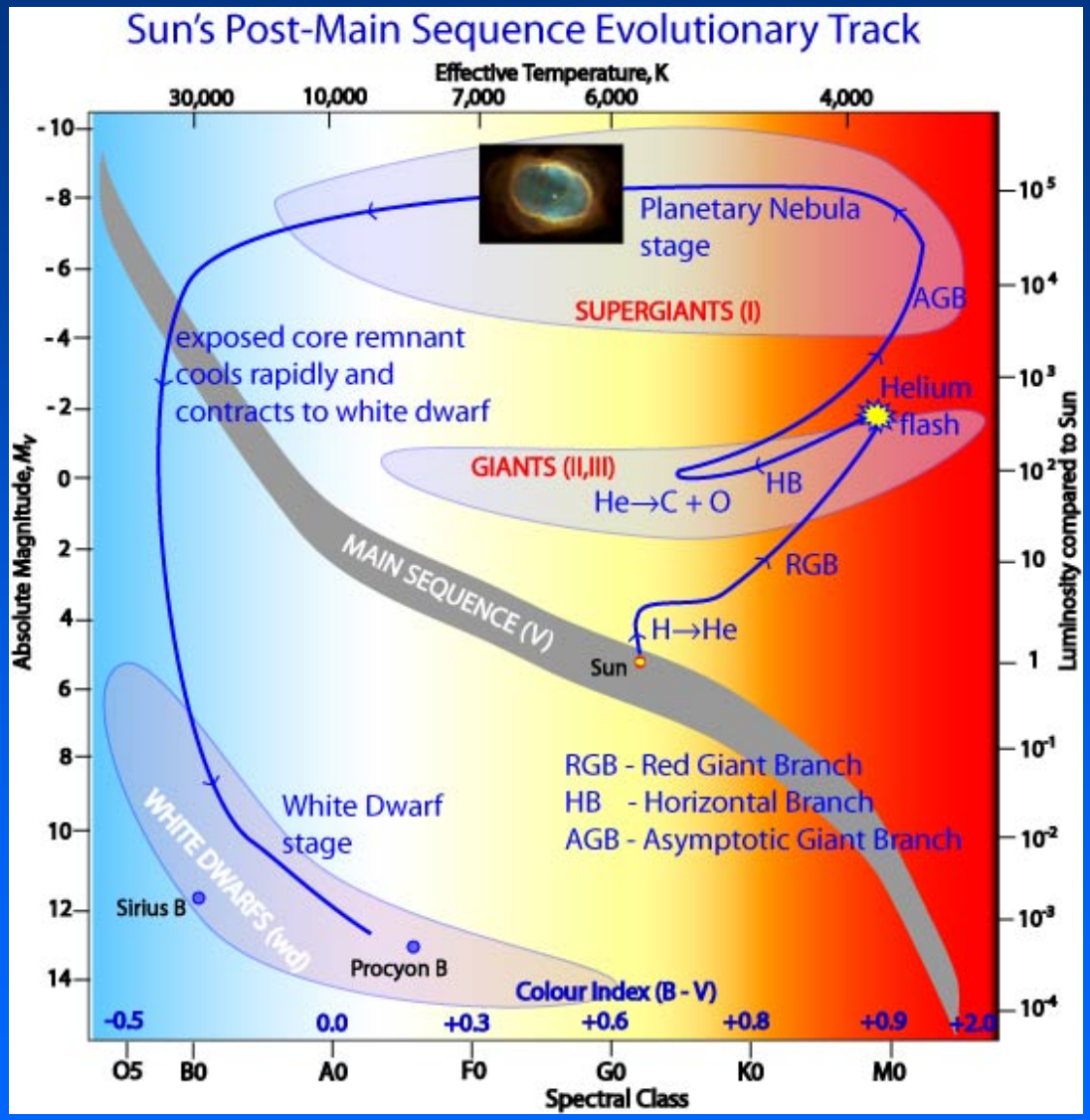
Resumen de nucleosíntesis



Producción de moléculas

- Envoltorios de estrellas evolucionadas
- Regiones de formación estelar

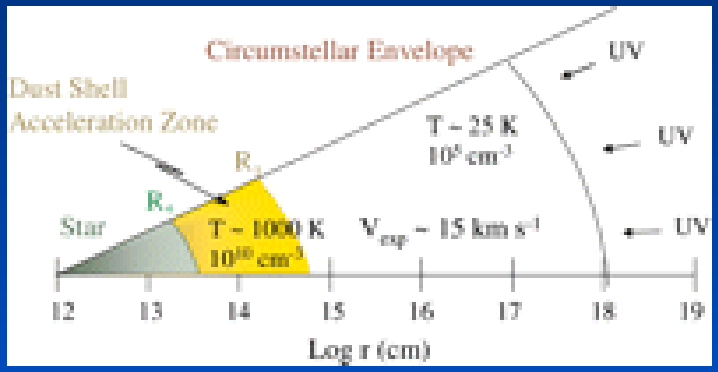
Evolución estelar



Expulsión de las capas externas (Envoltorio estelar)

Estrellas RAG y supergigantes rojas

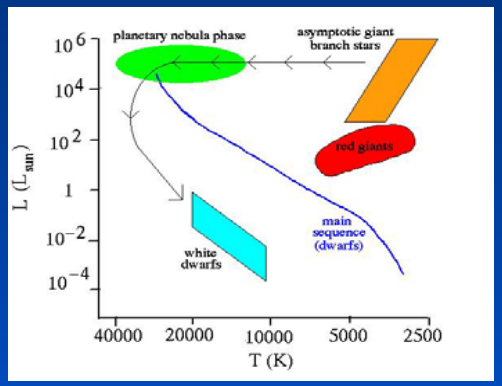
Supergigante roja V838 Mon



Granos de polvo

- Decenas de moléculas identificadas
- Envoltorios enriquecidos en C (mayor riqueza química)
  - CO, CS, CN, HCN, CH_4, C_2H_2, C_nH, HC_nN, NH_3, SiCN, NaCl….
  - Polvo: SiC
- Envoltorios ricos en O
  - CO, SiO, SO, H_2O, SO_2, HCN….
  - Polvo: Silicatos, óxidos

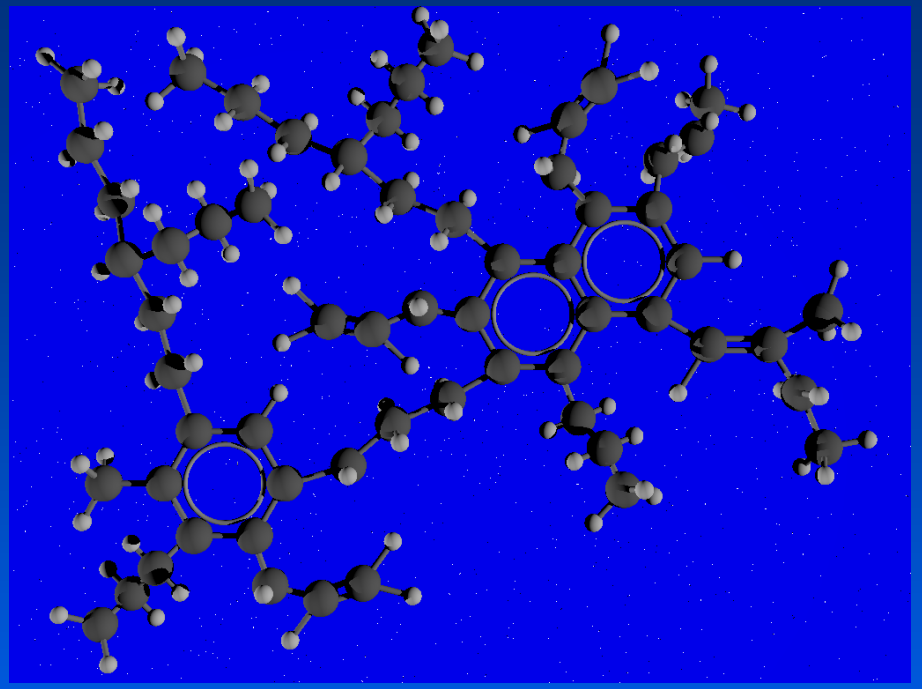
Nebulosas planetarias



Nebulosa planetaria "Ojo de gato"

- La estrella central emite radiación UV que ioniza y excita el envoltorio circundante
- Gas: Aparecen mas radicales y iones
  - CO, CN, OH, CH, HCO^+, CO^+,CH^+,N_2H^+…
- Sólido
  - Cadenas carbonadas aromáticas y alifáticas

Grandes estructuras carbonáceas



- Mas de la mitad del carbono interestelar está en forma macromolecular.
- Principales especies
  - Hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs)
  - Carbono amorfo hidrogenado (HAC)
  - Fullerenos, diamantes, grafito ?…
- Son responsables de bandas espectrales entre UV y microondas, pero no siempre fáciles de asignar

Supernovas

Supernova 1987a

- Producción de los elementos mas pesados
- Formación de polvo
- Ondas de choque en el medio interestelar

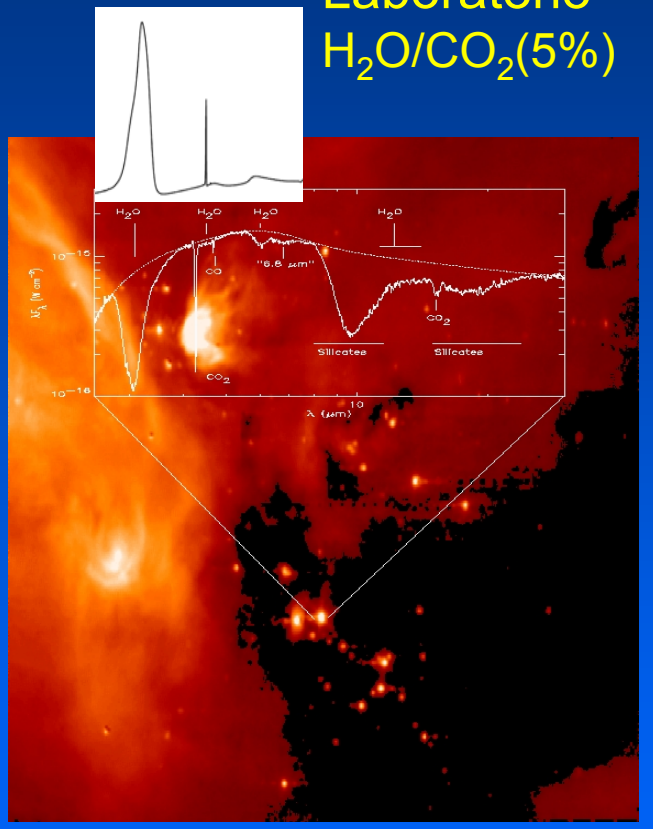
Regiones de formación estelar

LH95 en la Gran Nube de Magallanes

- El material liberado por las estrellas evolucionadas queda en el medio interestelar
- Muchas moléculas se disocian por la intensa radiación UV en este entorno
- Sobreviven especialmente los granos de polvo y las moléculas más grandes
- Se originan nubes tenues de gas y polvo a partir de las cuales se forman nuevas estrellas

Nubes moleculares densas

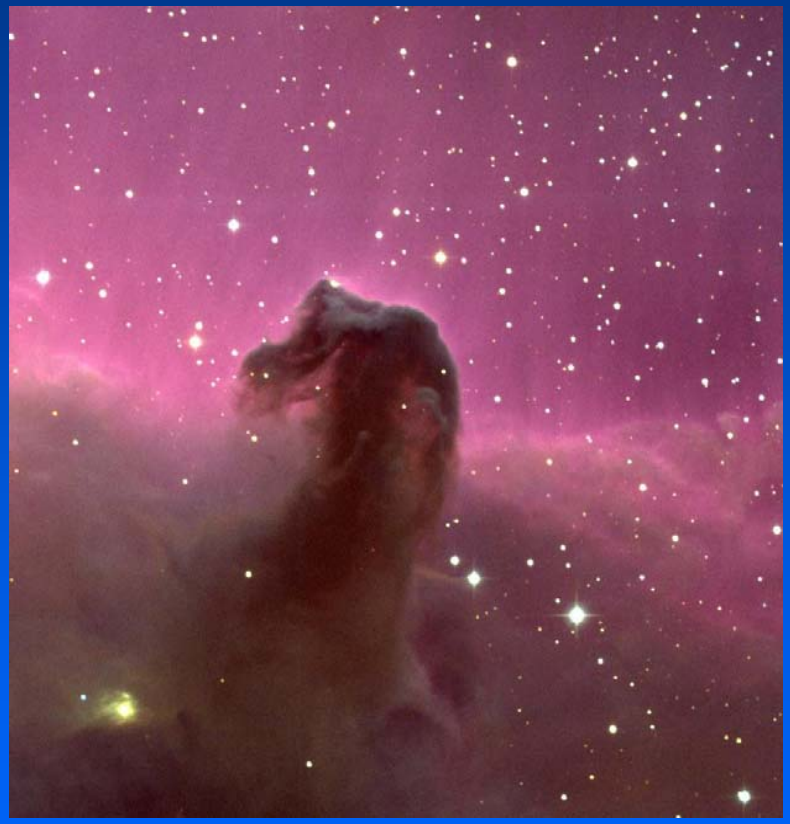
- Densidad “alta” (10^4- 10^6 cm^{-3}) y temperatura baja (10-50 K)
- Apantallan la radiación UV y permiten la pervivencia de moléculas
- Las moléculas más abundantes son H_2 y CO
  - $(CO/H_2) = 0.0001$
- Los granos de polvo (refractarios) se recubren de capas de “hielos” (volátiles)



Espectro IR hacia Elias 29 en ρ Ophiuchi

Nota: en la superficie terrestre la densidad es 10^{19} cm^{-3}

nubes moleculares densas



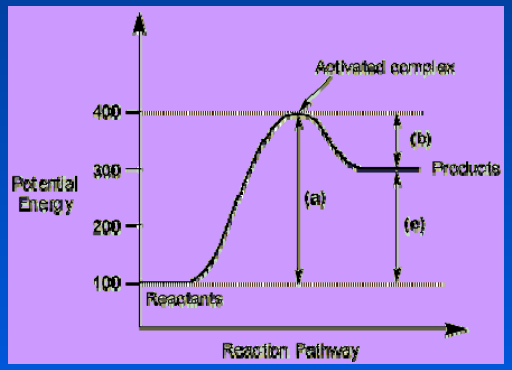
Nebulosa “cabeza de caballo” en Orión

Nebulosa del águila (M 16)

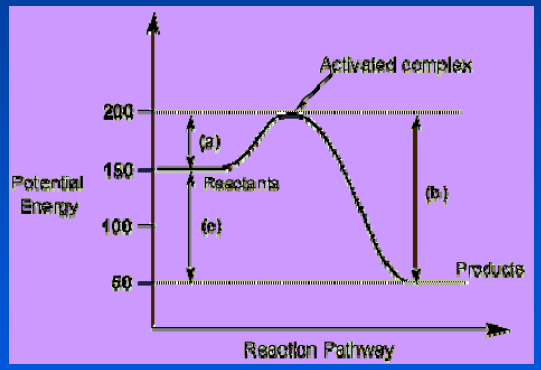
Química en las nubes moleculares

Perfil energético de las reacciones químicas

Endotérmica



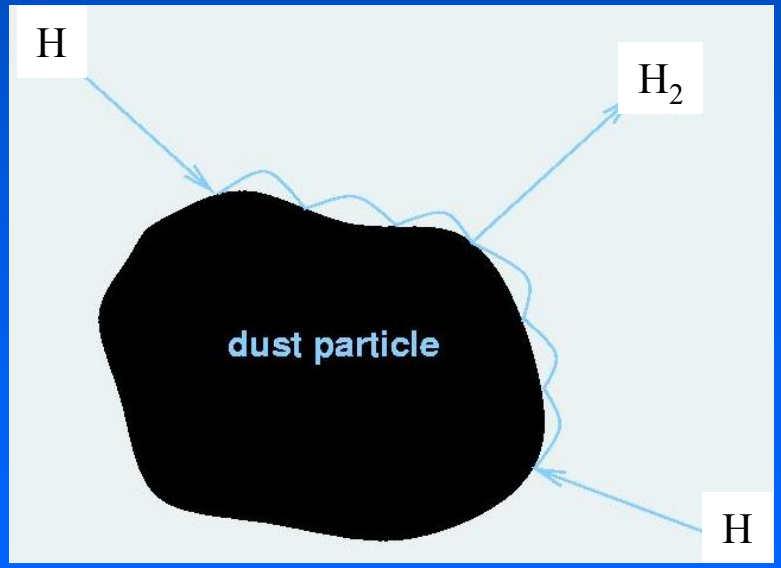
Exotérmica



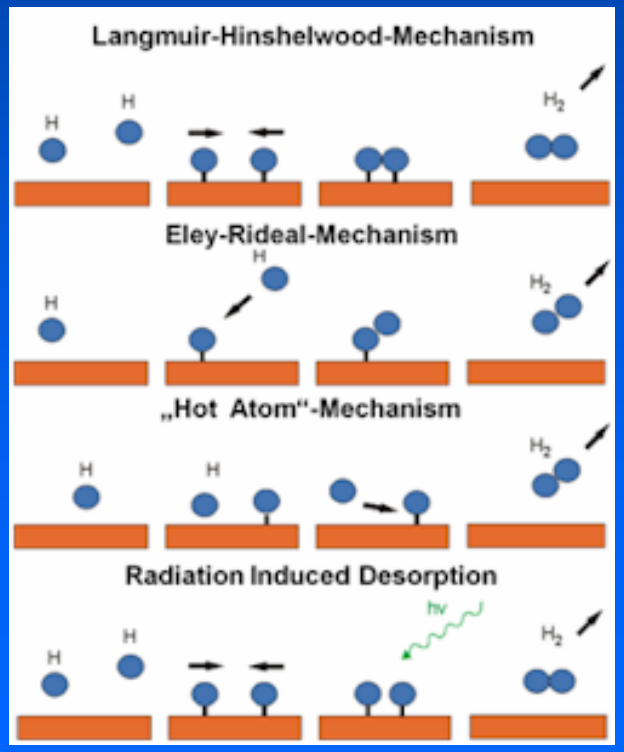
- A las muy bajas temperaturas de las nubes moleculares solo son posibles reacciones exotérmicas sin barrera
  - Reacciones ion-molécula (también radical-molécula)
  - Reacciones en superficies (efecto catalítico)

Síntesis de moléculas de hidrógeno

- H_2 es la molécula mas abundante
- En su mayor parte se se forma en la superficie de los granos de las nubes moleculares densas



Mecanismos



El ion H_3^+

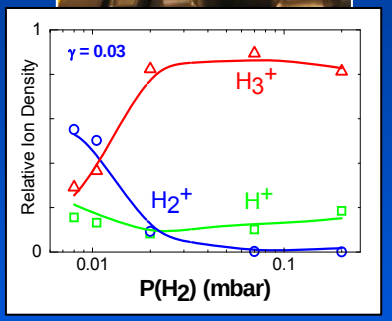
- Es la segunda especie molecular por frecuencia de producción (después del H_2)
- Mecanismo de producción:

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

- Inicia una cadena de reacciones de protonación:

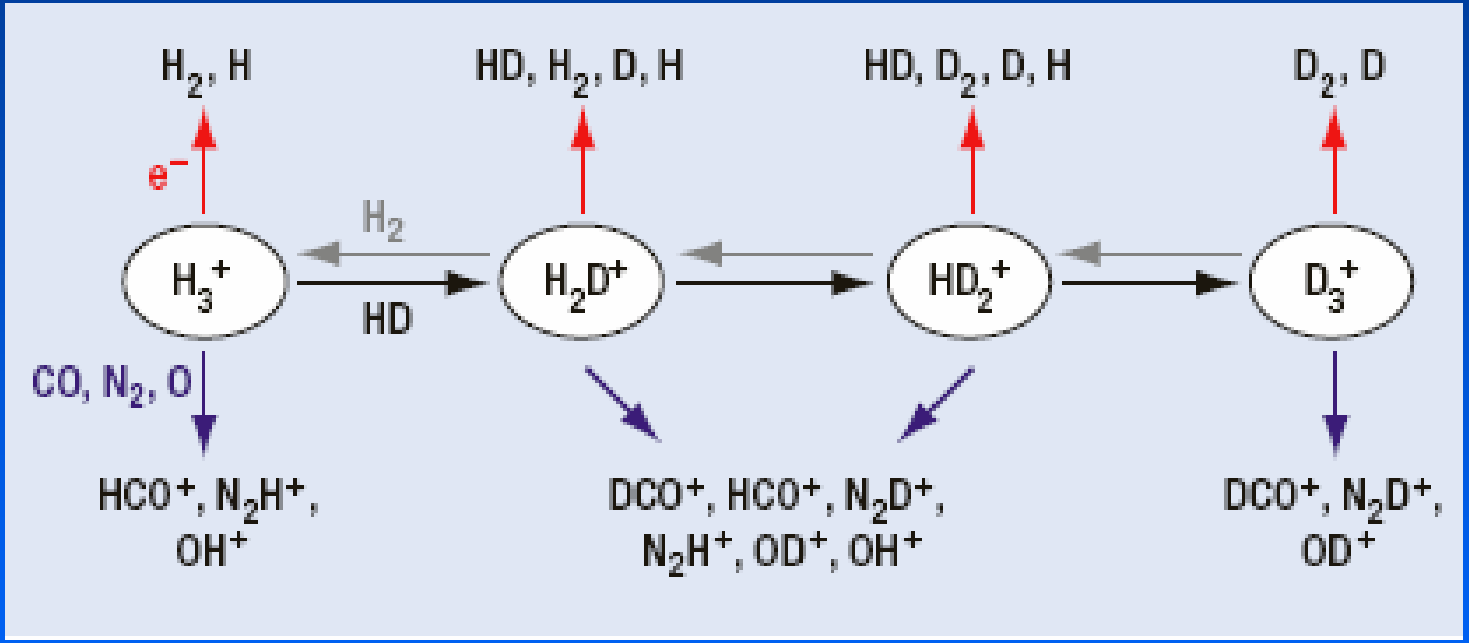
  $H_3^+ + X \rightarrow XH^+ + H_2$

- El XH^+ formado es más reactivo que el X neutro y propaga la cadena de reacciones ion molécula



Laboratorio

Reacciones de H_3^+ y enriquecimiento en deuterio



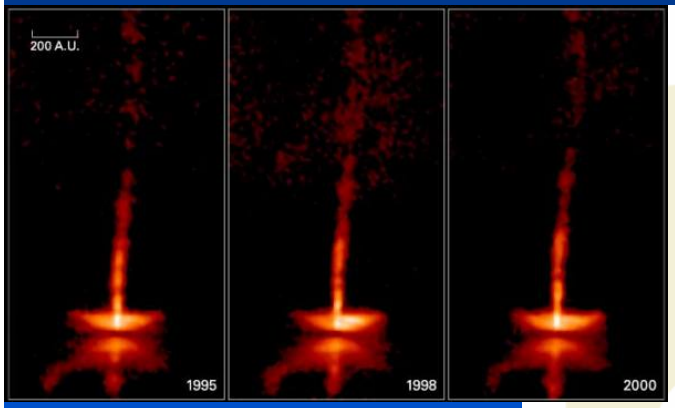
A tempearturas muy bajas se favorece la dormación de moléculas con isótopos mas pesados (deuterio)

Formación estelar

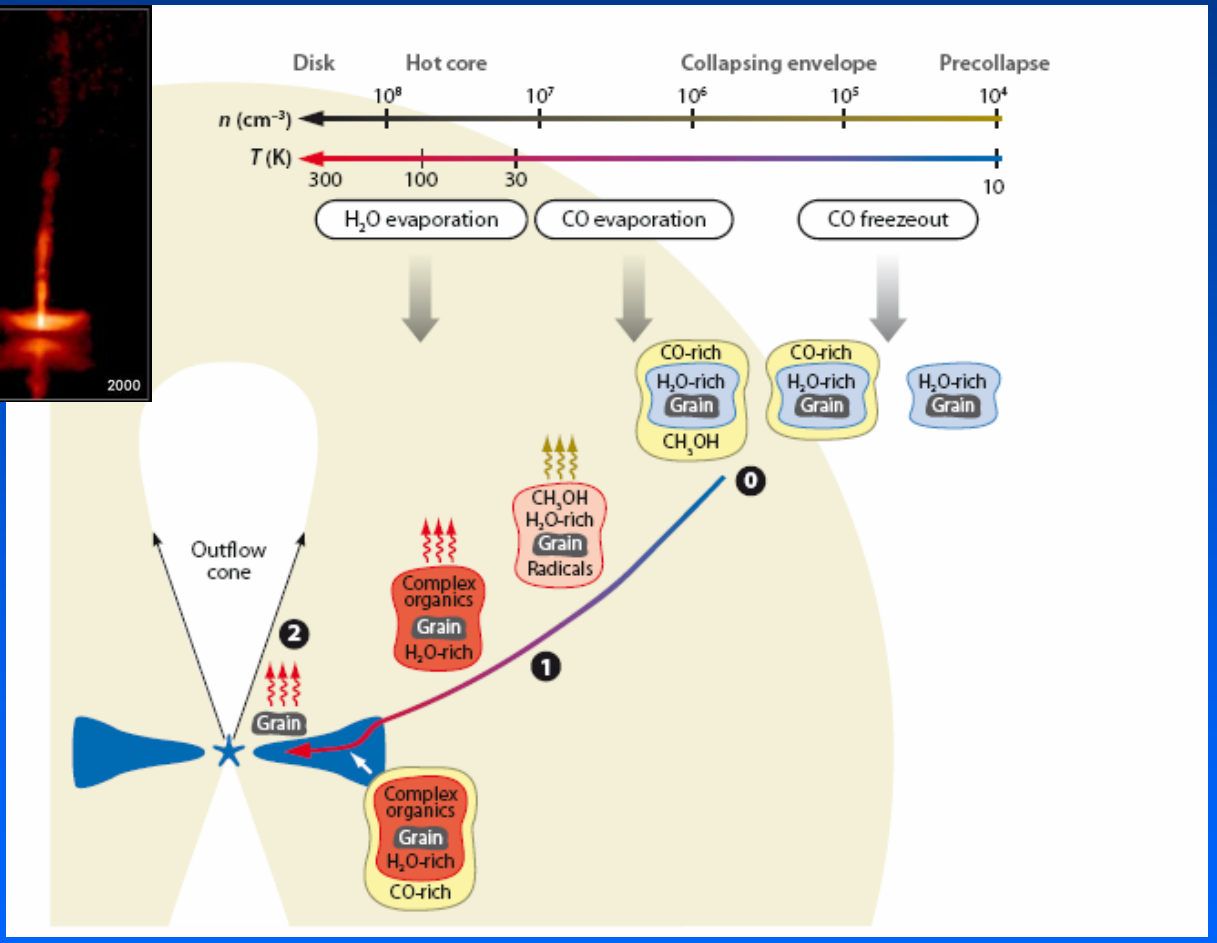
N90 en la pequeña nube de Magallanes

- Dentro de las nubes densas se forma un núcleo que comienza a colapsar por atracción gravitatoria.
- A medida que el colapso progresa aumentan la densidad y la temperatura hacia el centro del núcleo.
- Se incrementa la complejidad de la química tanto en superficie como en fase gas.
- Las moléculas se van desorbiendo de la superficie de los granos en función de su volatilidad

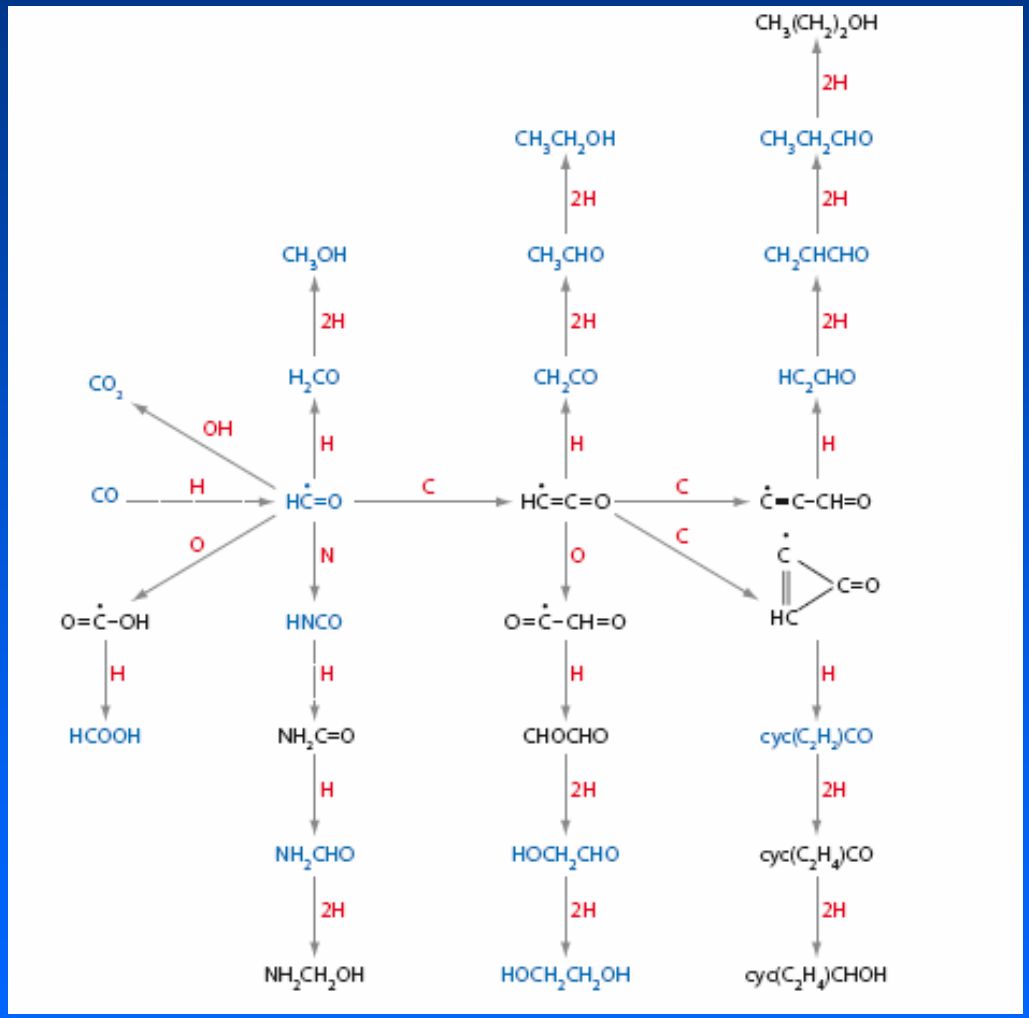
Colapso de un núcleo pre-estelar



Protoestrella HH30



Química orgánica en granos interestelares (esquema)



Las moléculas en azul se han detectado en regiones de formación estelar

E. Herbst and E. v. Dishoeck ARAA ,2009

Moléculas gaseosas interestelares y circunestelares

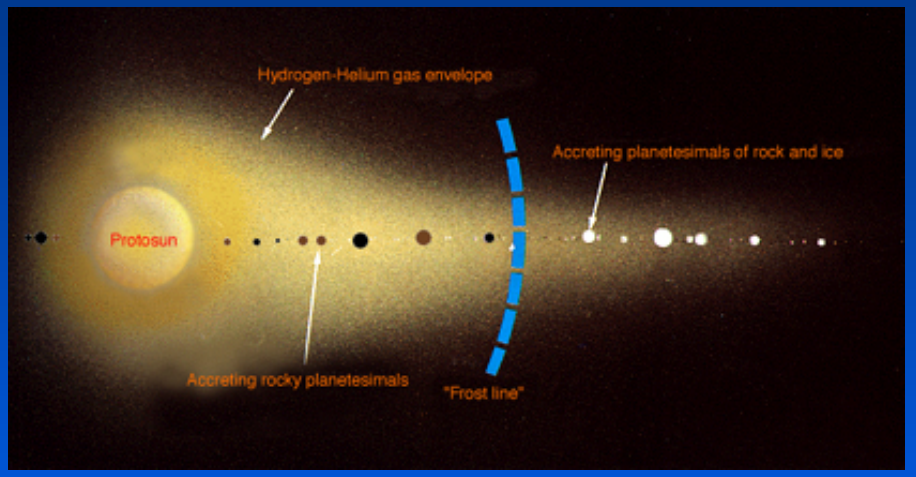
Gaseous interstellar and circumstellar molecules (149)

N=2		N=3		N=4	N = 5	N = 6	N = 7	N = 8	N = 9	N = 10
H_2	AlCl	CH_2	C_2S	NH_3	CH_4	CH_3OH	CH_3NH_2	$HCOOCH_3$	$(CH_3)_2O$	$(CH_3)_2CO$
CH	PN	H_2S	OCS	H_2CO	SiH_4	CH_3SH	CH_3CCH	CH_3C_2CN	C_2H_5OH	CH_3C_4CN
NH	SiN	NH_2	MgCN	H_2CS	CH_2NH	C_2H_4	CH_3CHO	HC_6H	C_2H_5CN	CH_3CH_2CHO
OH	SiO	H_2O	MgNC	H_2CN	C_5	H_2C_4	c-CH_2OCH_2	C_7H	CH_3C_4H	$(CH_2OH)_2$
O_2(?)	SiS	HNO	NaCN	*l*-C_3H	*l*-C_3H_2	CH_3CN	CH_2CHCN	$HOCH_2CHO$	C_6H	
HF	PO	C_2H	SO_2	c-C_3H	c-C_3H_2	CH_3NC	HC_4CN	CH_3COOH	HC_6CN	
C_2	SH	HCN	N_2O	HCCH	H_2CCN	NH_2CHO	C_6H	$H_2CCCHCN$	CH_3CONH_2	N = 11
CN	AlF	HNC	SiCN	HNCO	H_2NCN	H_2CCHO	H_2CCHOH	H_2C_6	CH_2CHCH_3	HC_9CN
CO	FeO	HCO	SiNC	HNCS	CH_2CO	C_5H		CH_2CHCHO		CH_3C_6H
CS	SiC	c-SiC_2		HCCN	HCOOH	C_5N		C_2H_6		
CP		MgCN		C_2CN	C_4H	HC_4N				
NO		MgNC		C_3O	HC_2CN	C_5S(?)				N = 12
NS		AlNC		C_3S	HC_2NC	HC_4H				C_6H_6
SO		HCP	H_3^+	c-SiC_3	C_4Si	CH_2CNH				
HCl	CH^+	C_3	HCO^+	C_3N^-	HNCCC	HC_2CHO				
NaCl	CO^+	C_2O	HOC^+	H_3O^+		c-C_3H_2O				N = 13
KCl	SO^+	CO_2	N_2H^+	$HCNH^+$	H_2COH^+					$HC_{10}CN$
N_2(?)	CF^+		HCS+	$HOCO^+$	C_4H^-	HC_3NH^+	C_6H^-		C_8H^-	

Table VB.1-1: Molecules detected in the interstellar medium.

Formación del Sistema Solar

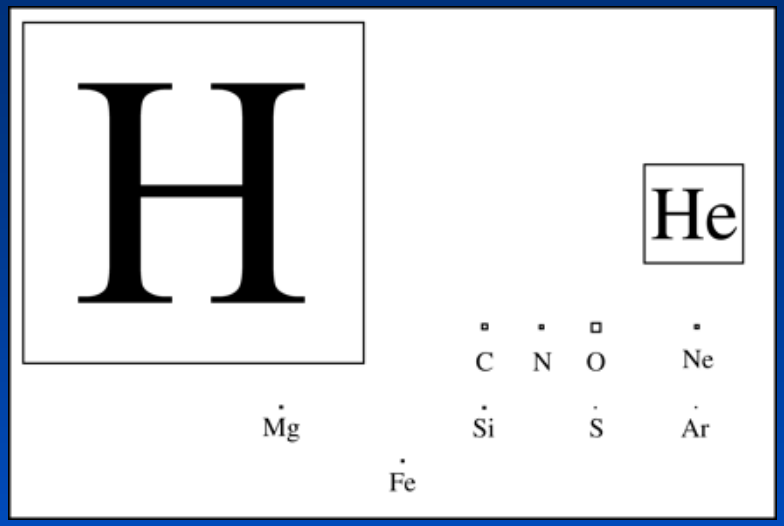
Línea del hielo
~ 3 UA, 150 K

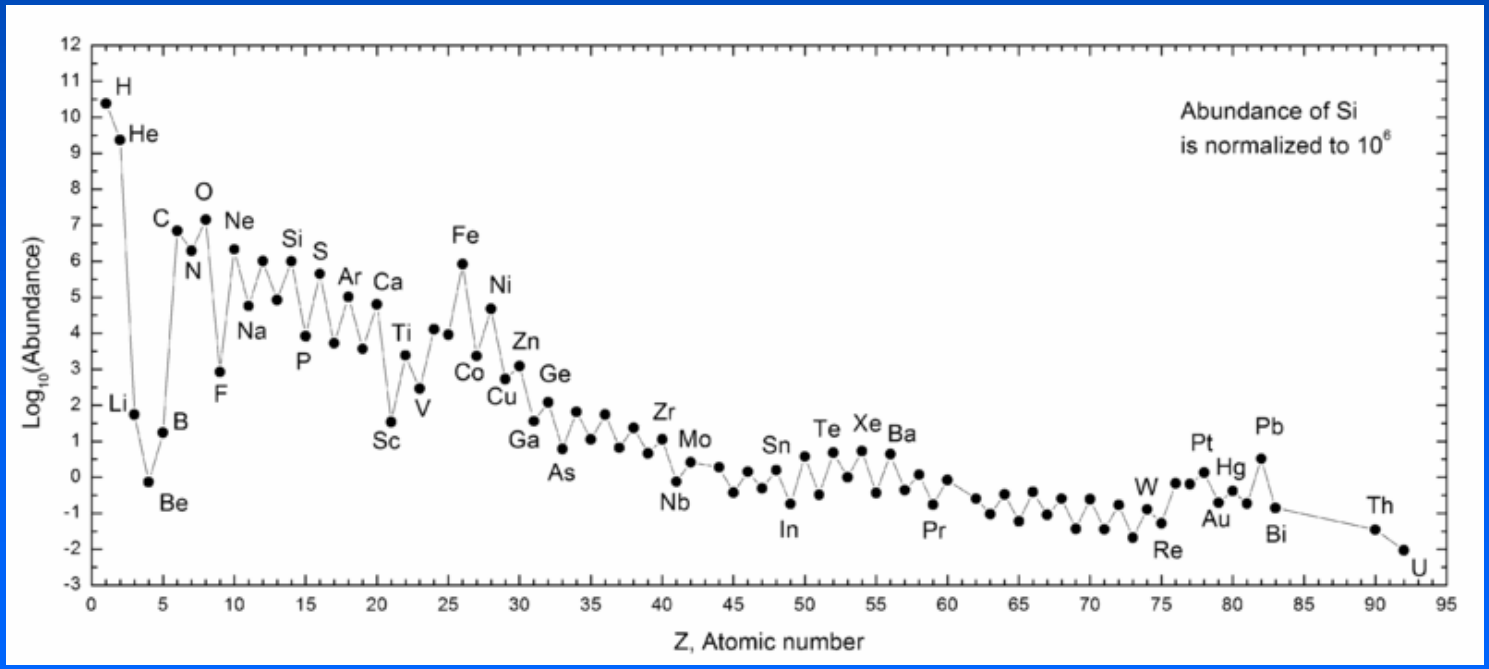


- Hace unos 4600 millones de años
- Colapso parcial de una nube de gas y polvo ("nebulosa solar")
- Casi toda la masa (99,9%) se concentró en el Sol.
- Material original de múltiples estrellas previas
- El 98% de la masa corresponde a los elementos más ligeros : H y He

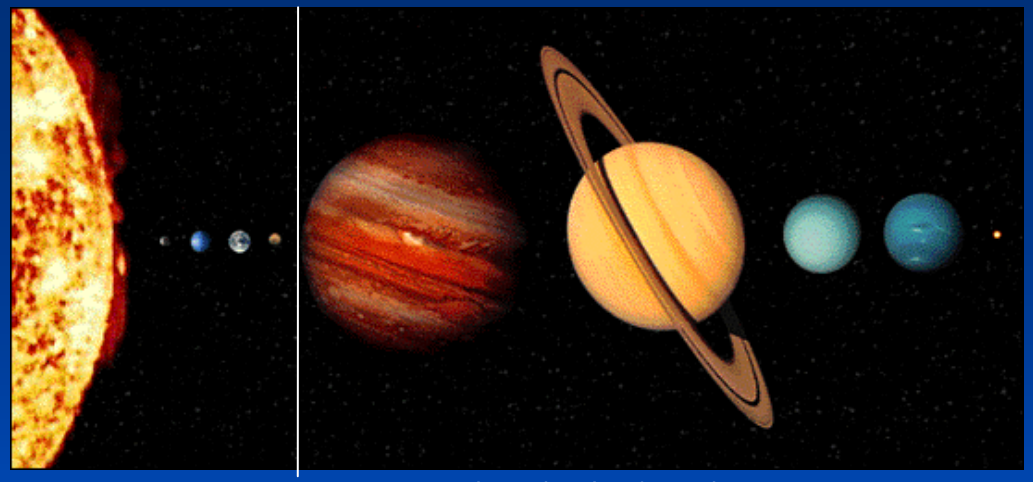
Nota : Unidad astronómica (UA) = $1{,}5 \times 10^8$ km
(Distancia media Tierra-Sol)

Abundancia de los elementos en el Sistema Solar





Planetas



- **Planetas rocosos**
  - Formados entre el Sol y la línea del hielo
  - Ricos en metales (Fe, Mg, Al) y silicatos. Pequeño tamaño
  - In capaces de retener H_2 o He. **Atmósferas tenues**
- **Planetas gaseosos**
  - Formados mas allá de la línea del hielo
  - Condensation de especies volátiles. Tamaño grande
  - **Grandes atmósferas de H_2 and He**

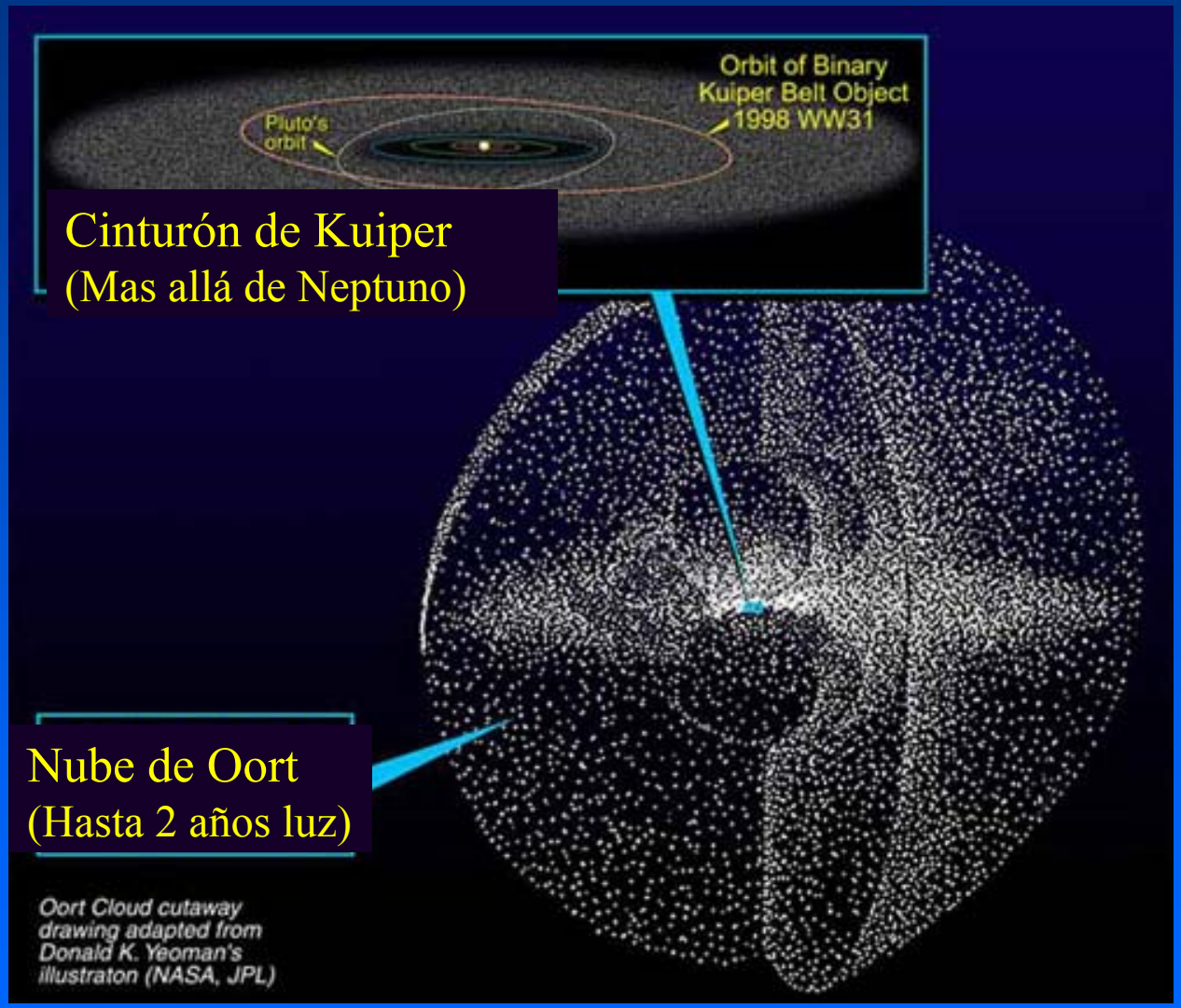
Meteoritos

- La mayoría (86 %) de los meteoritos son rocas primitivas (condritas) compuestas por fragmentos indiferenciados que no llegaron a formar planetas
- Las condritas provienen del cinturón de asteroides entre Marte y Jupiter

Meteorito Gao

- Las condritas carbonáceas contienen abundantes compuestos orgánicos
- Se encentran entre los objetos mas antiguos del Sistema Solar (> 4500 millones de años)
- Las mas antiguas (tipo CI) tienen una composición elemental muy similar a la del SoL

Sistema Solar



Cometas

Cometa Halley

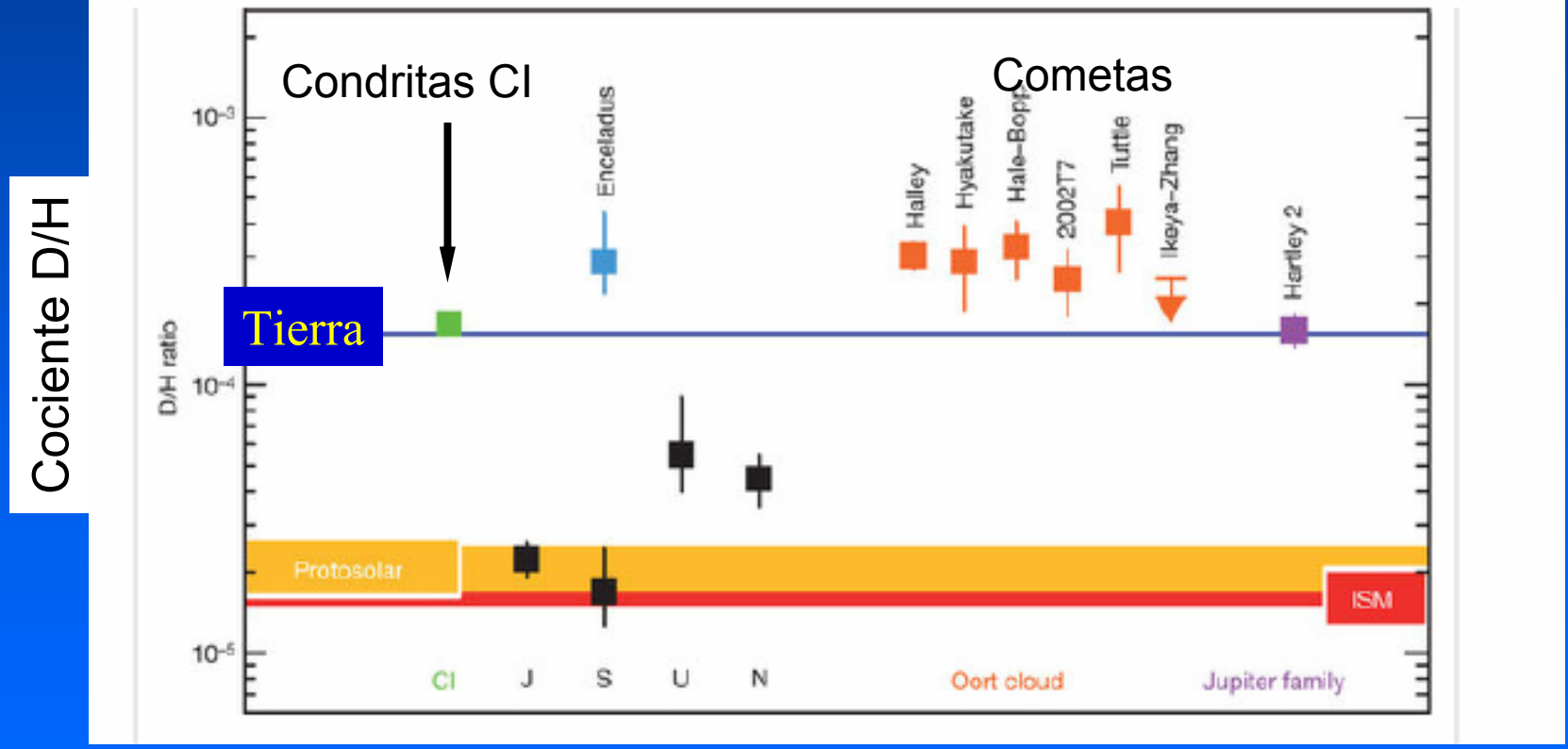
- Pequeños cuerpos de las regiones exteriores del Sistema Solar
  - Periodo Largo (nube de Oort)
  - Período corto (cinturón de Kuiper)
- Objetos muy antiguos en el Sistema Solar
- Formados por materia rocosa y hielos de sustancias volátiles.
- La composición de los hielos es similar a la de los hielos interestelares (H_2O, CO_2, CO....)
- También contienen materia orgánica

Superficie de los planetas rocosos

	Presión **bar**	**Temp.** **ºC**	**Principales componentes atmosféricos**	**Observaciones**
Venus	92	460	CO_2(96 %) N_2 (3 %)	Trazas de agua en fase vapor
Tierra	1	18	N_2 (78 %) O_2 (21 %)	Agua líquida en superficie
Marte	0.006	-60	CO_2 (96 %) N_2 (3 %)	Casquetes de hielo polares

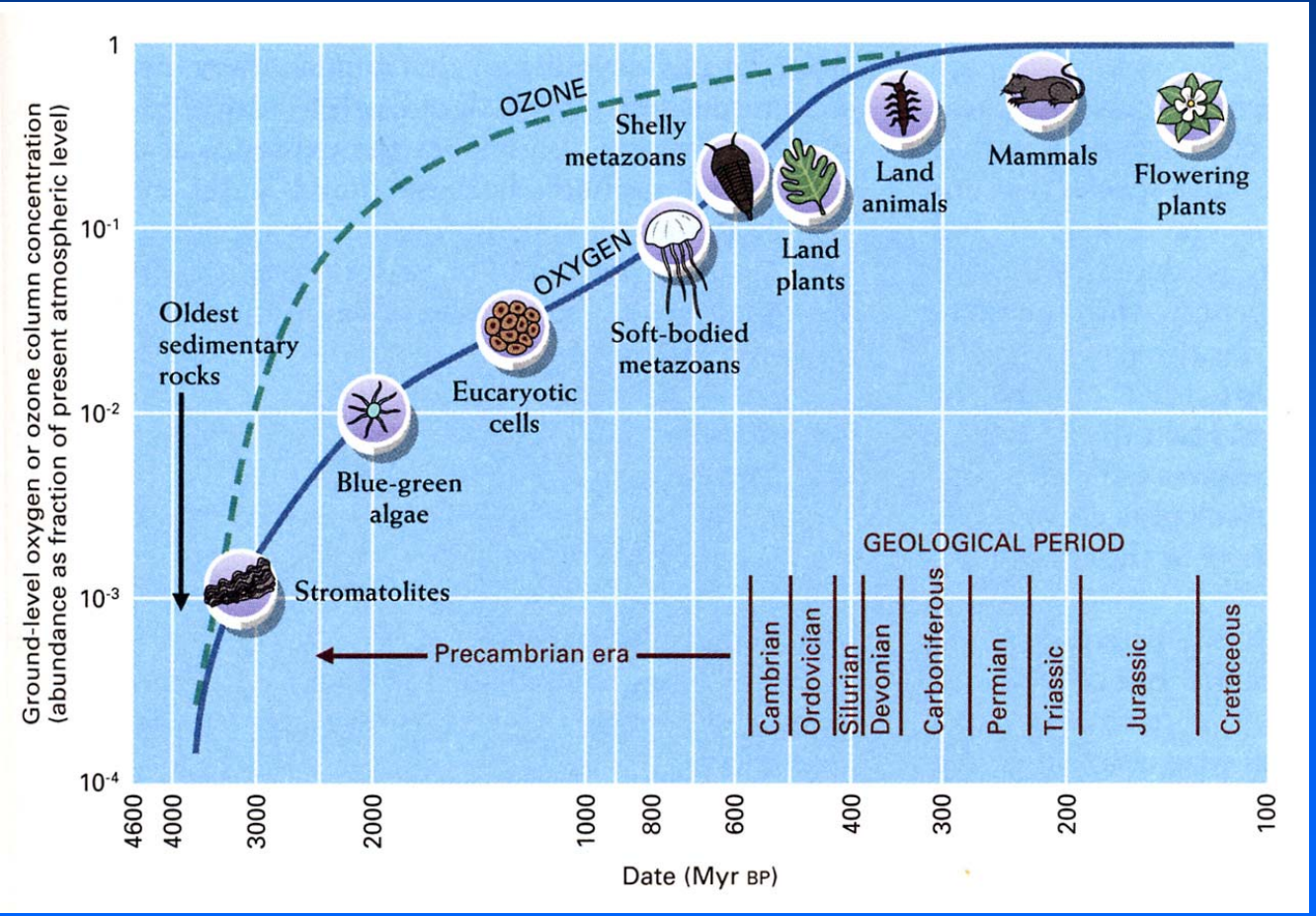
Origen del agua en la Tierra

- Hace 3800-4200 millones de años, la Tierra sufrió una fase de bombardeo intenso por parte de objetos de regiones exteriores del Sistema Solar que pudieron aportar H_2O



P. Hartogh et al. Nature, 2011

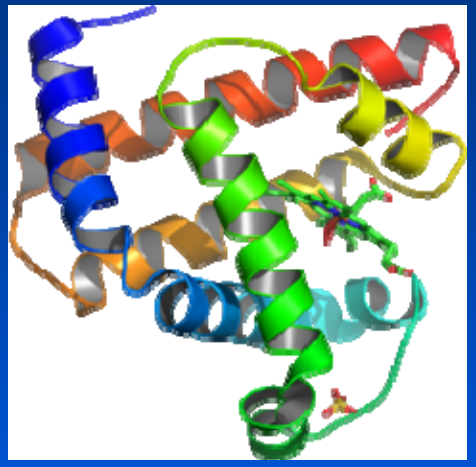
Evolución del oxígeno en la atmósfera terrestre

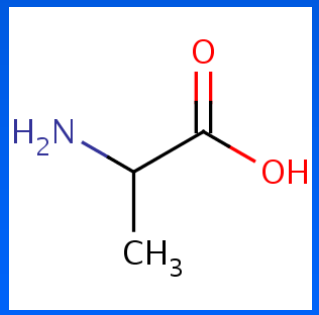


La mayor parte del O_2 se produjo por fotosíntesis

Biomoléculas

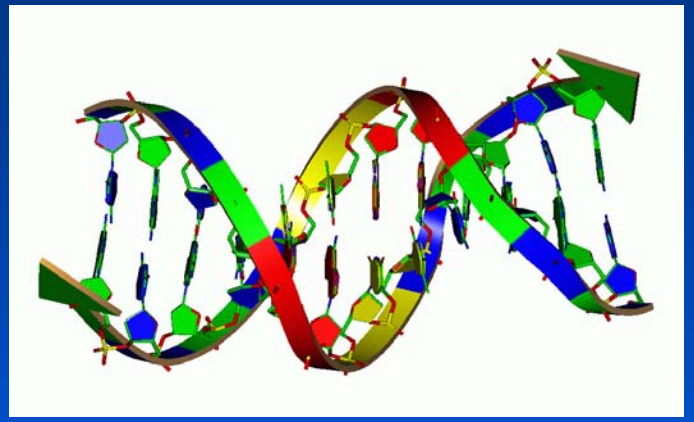
Proteínas
(mioglobina)

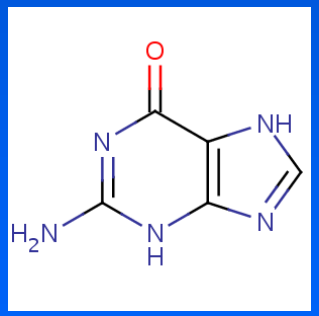




Aninoácidos
(alanina)

Ácidos nucleicos

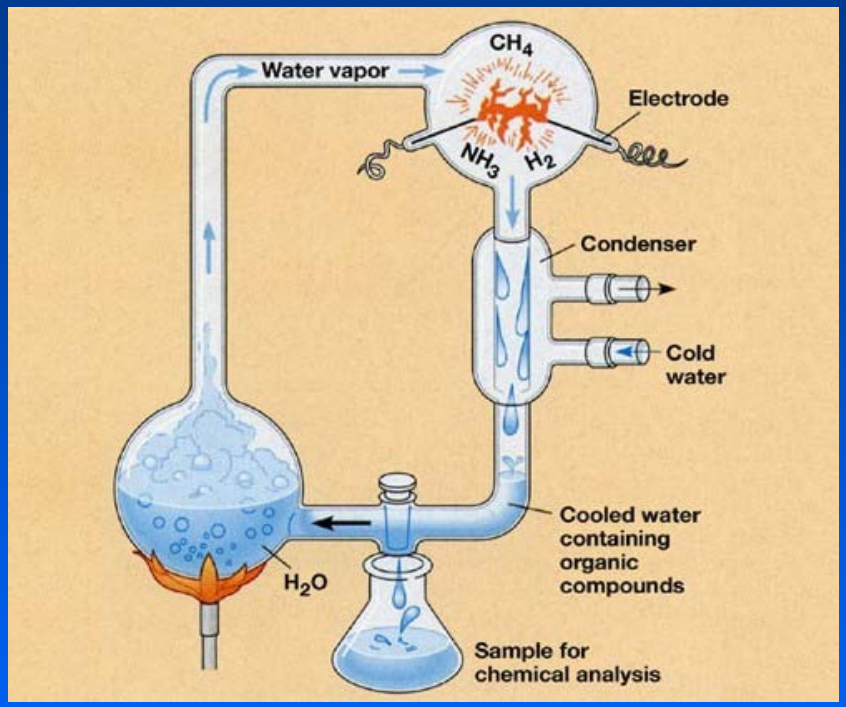




Bases nitrogenadas
(guanina)

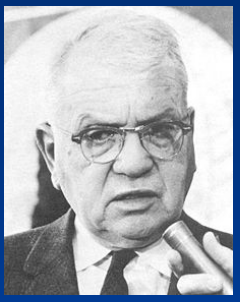
Experimento de Miller-Urey

1952



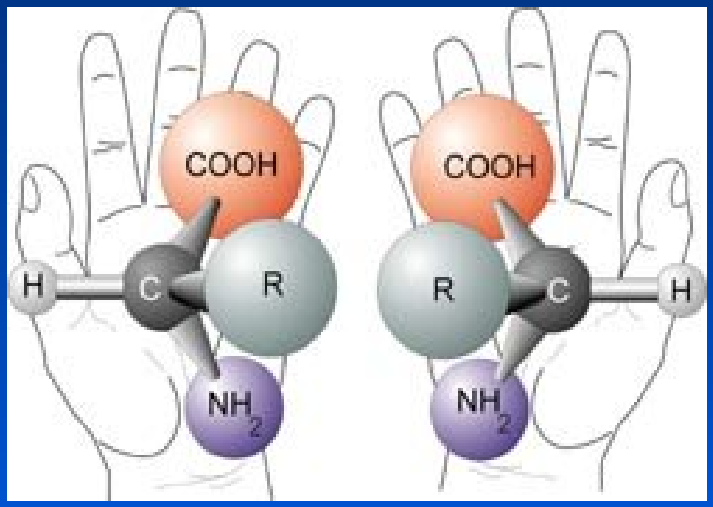
Aminoácidos, azúcares, lípidos, bases nitrogenadas

S. Miller



H. Urey

Aminoácidos y quiralidad



- Las proteinas están formadas por combinaciones de solo 22 aminoacidos distintos
- Salvo la glicina (el mas sencillo) estos aminoácidos son quirales
- Las moléculas quirales tienen dos variedades L y D que son como imagénes especulares y no se pueden superponer
- En las síntesis de laboratorio se obtiene normalmente una mezcla equimolecular de L y D
- Los aminoácidos fabricados por los seres vivos son de la variedad L

Aminoácidos en meteoritos y cometas

- Gran número de compuestos orgánicos incluidos bases nitrogenadas y aminoácidos
- Mezclas de aminoácidos L y D, con ligero exceso de L
- Relaciones isotópicas de $^{15}N/^{14}N$ y $^{13}C/^{12}C$ mayores que las terrestres

Meteorito de Murchinson 1969

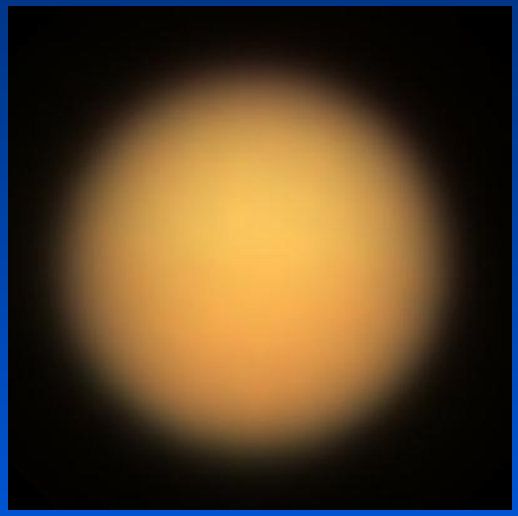
Cometa Wild2 ("Stardust" 2004)

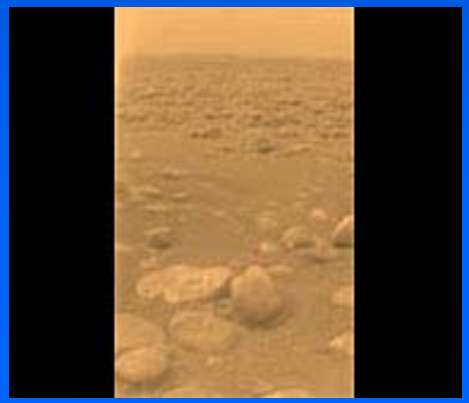
- Identificada glicina en fragmentos recogidos del cometa Wild2
- La relación isotópica $^{13}C/^{12}C$ distinta a la de la Tierra y similar a la del meteorito Murchinson

Probable formación extraterrestre de aminoácidos

Titán

- Es la mayor luna de Saturno
- Distancia al Sol : 9,54 UA (1, 43 x 10^9 km)
- Atmósfera en la superficie
  - P= 1,5 bar ; T= -179 ºC
  - N_2 = 95%; CH_4 = 5%
- Envuelto en una niebla anaranjada de derivados de nitógeno y metano
- Se producen lluvias de metano

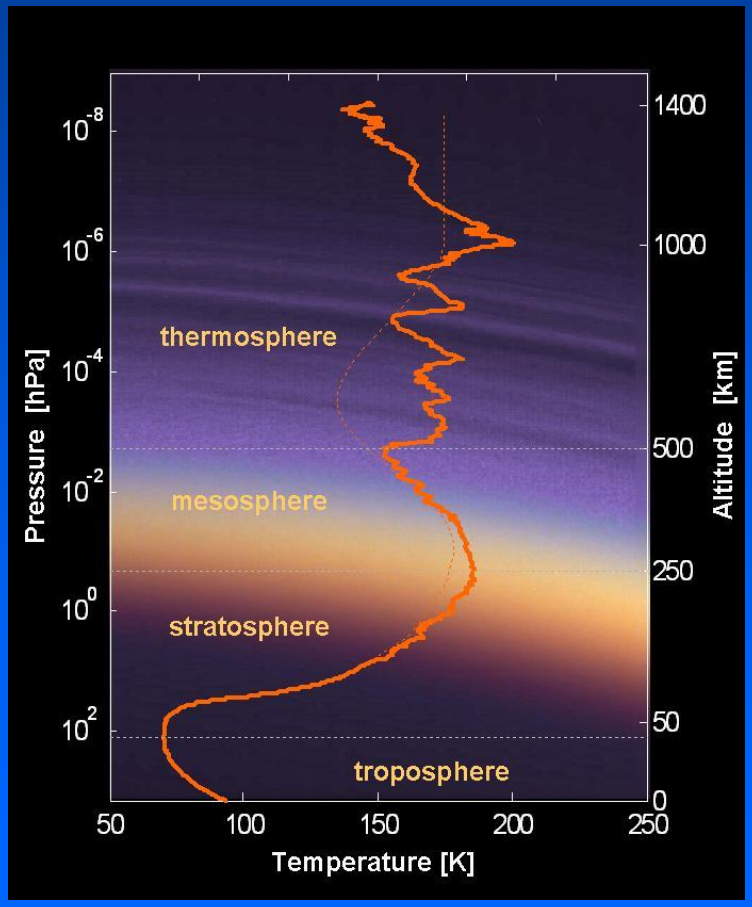


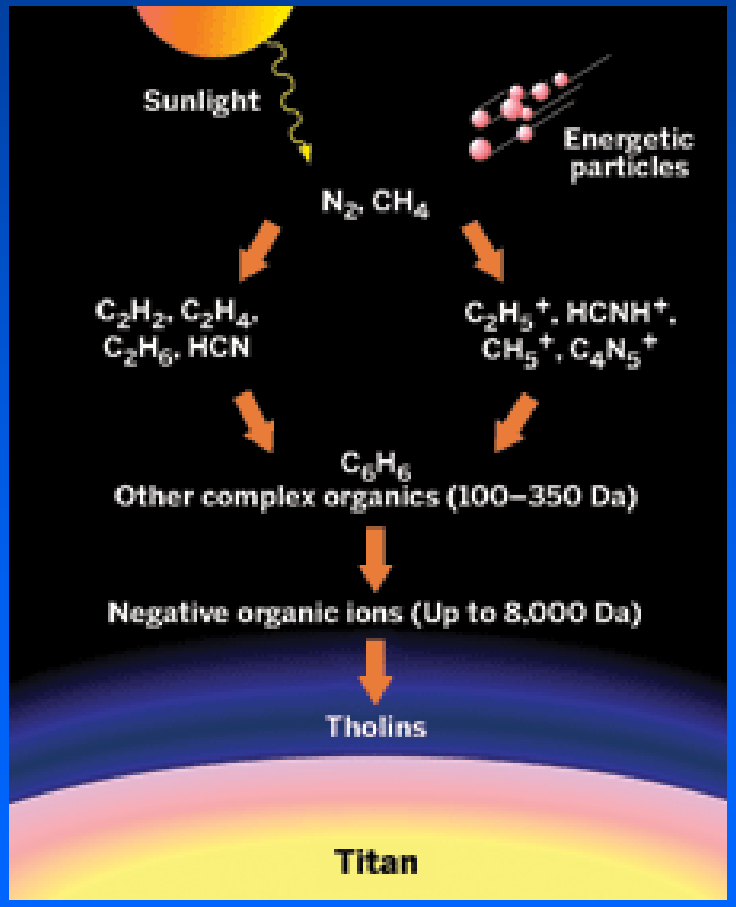


- Paisaje de Titán (guijarros de hielo en la niebla) desde la sonda Huygens, tomado en 2005
- La sonda Huygens es la nave más lejana “aterrizada” por el hombre

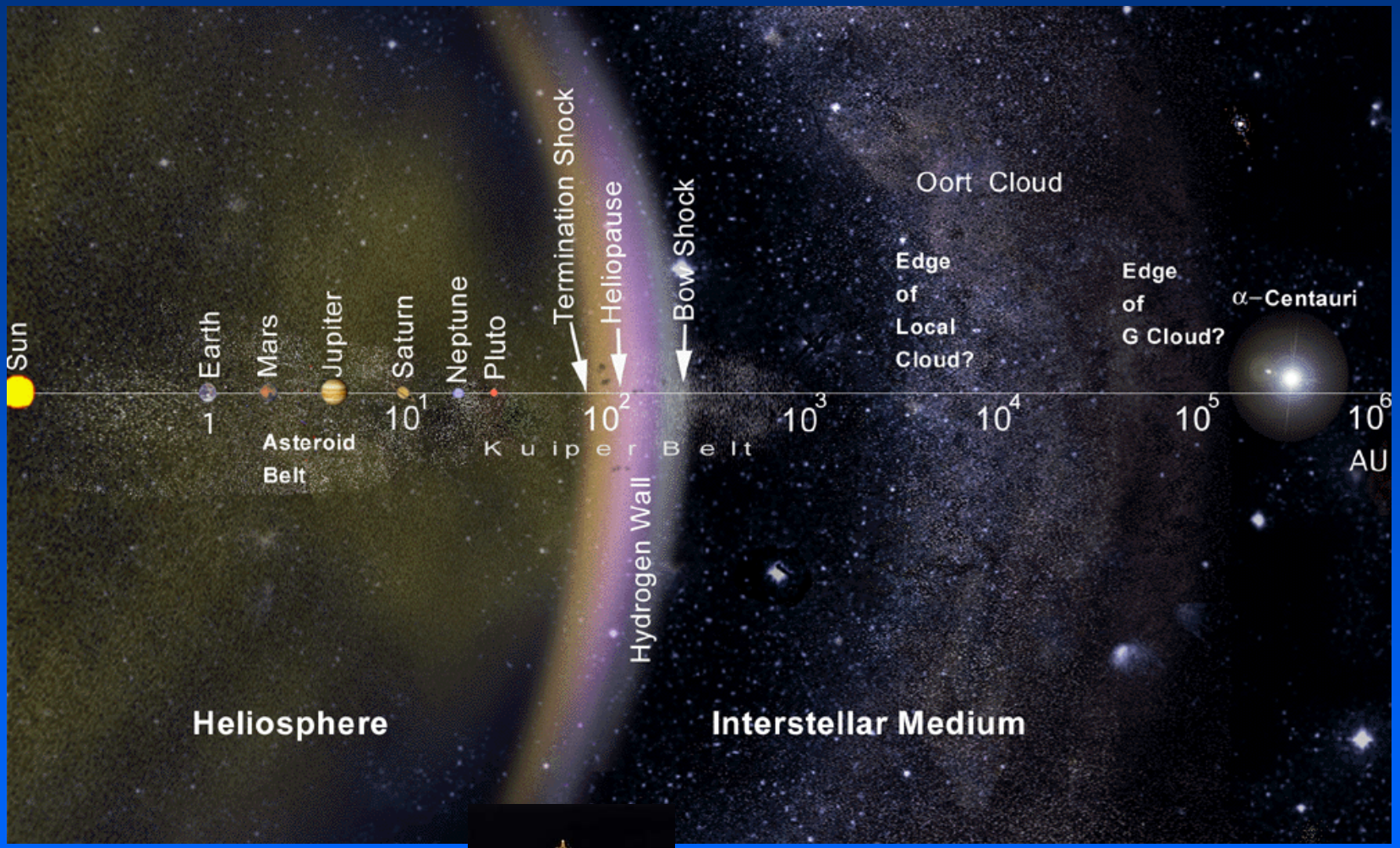
Química en la atmósfera de Titán

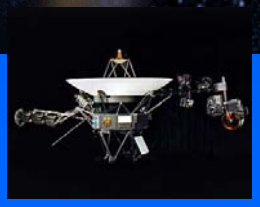
- La fotoquímica atmosférica produce polímeros de carbono y nitógeno





Los Confines del Sistema Solar





Voyager 1