

Tesis de Posgrado

Evolución química de nubes moleculares sometidas a ondas de choque

Iglesias, Eduardo Roberto

1978

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Físicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Iglesias, Eduardo Roberto. (1978). Evolución química de nubes moleculares sometidas a ondas de choque. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1597_Iglesias.pdf

Cita tipo Chicago:

Iglesias, Eduardo Roberto. "Evolución química de nubes moleculares sometidas a ondas de choque". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1978. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1597_Iglesias.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

EVOLUCION QUIMICA DE NUBES MOLECULARES
SOMETIDAS A ONDAS DE CHOQUE

Eduardo Roberto Iglesias *

1597

1597
ej. 2

TRABAJO DE TESIS

Presentado en el Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de Buenos Aires, como parte de los requisitos para optar al título de Doctor de la Universidad de Buenos Aires.

1978

* Miembro de la Carrera del Investigador de la Comisión Nacional de Estudios Geoheliofísicos.

Susana,

Carolina,

Maria Candel.

INDICE

	Página
CAPITULO I. INTRODUCCION	1
CAPITULO II. MODELO HIDRODINAMICO	12
a. Simplificaciones	12
b. Ecuaciones Hidrodinámicas	14
c. El Frente de Onda	16
d. El Factor de Compresión	19
e. Valores Iniciales	21
CAPITULO III. LA FUNCION DE ENFRIAMIENTO	23
a. Enfriamiento por H_2	25
b. Enfriamiento por CO	31
c. Otros Mecanismos de Enfriamiento	36
CAPITULO IV. MODELO QUIMICO	41
a. Abundancias Elementales	42
b. El esquema Químico para Bajas Temperaturas	43
(i), H_2 : Formación y Destrucción	43
(ii). Reacciones Gaseosas	45

(iii). Ionización por Rayos C6smicos	47
(iv). Reacciones Secundarias	49
c. Procesos Qu6micos de Alta Temperatura	56
CAPITULO V. EVOLUCION QUIMICA: RESOLUCION Y RE-	
SULTADOS	61
a. M6todo de Resoluci6n	61
b. Resultados y Discusi6n	64
(i) : H ₂	65
(ii). CO y Otras Especies Estables	65
(iii). H ₂ O	68
(iv). HCO (Formilo)	73
(v). Otras mol6culas	77
(vi). Condensaci6n	79
CAPITULO VI. RESUMEN	81
AGRADECIMIENTOS	85
REFERENCIAS	87
TABLAS	
1. Propiedades T6picas de Nubes Gal6cticas	95
2. Mol6culas Interestelares.	96

3. Energías de Disociación, Potenciales de Ionización y Diámetros de Algunas Moléculas de Interés Astrofísico.	98
4. Transiciones Rotacionales de la molécula H_2 en su estado Vibrónico Fundamental	99
5. Transiciones Vibracionales-Rotacionales de la Molécula H_2 entre $v=0$ y $v = 1$.	100
6. Niveles Rotacionales del Estado Vibrónico Fundamental de CO	101
7. Transiciones de Estructura Fina en Especies Atómicas Abundantes.	102
8. Abundancias Elementales.	103
9. Ionización Primaria	104
10. Reacciones Ion-Molécula.	105
11. Reacciones de Intercambio de Carga	109
12. Reacciones de Recombinación Ion-Electrón	111
13. Asociación Radiativa	113
14. Reacciones Neutro-Neutro	114
15. Reacciones con Energías de Activación.	116

FIGURAS

1. La Función de Enfriamiento por H_2 computada por SH.	121
2. Interpolación de los Resultados de SH	122

3. Determinaciones Observacionales de la razón CO/H ₂ en Nubes Moleculares	123
4. Rutas Químicas Importantes para la Familia del OH.	124
5. Rutas Químicas Importantes para la Familia de los Hidrocarburos.	125
6. Rutas Químicas Importantes para la Familia del Nitrógeno.	126
7. Evolución Hidrodinámica y Química de una Onda de Choque Caracterizada por $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$, $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $T_0 = 30 \text{ K}$.	127

CAPITULO I

INTRODUCCION

En lo que sigue se ofrece un marco de referencia para el trabajo presentado, se describe brevemente el problema, y se enuncia la forma en que está organizada la presentación.

Las ideas corrientes atribuyen al Universo en expansión una edad del orden de 10^{10} años, y un radio de $\sim 10^{10}$ años luz (10^{28} cm). La materia, distribuída de manera altamente inhomogénea en el Universo, se concentra en galaxias que ocupan solo una pequeña fracción ($\sim 10^{-7}$) del volumen total. La mayoría de las galaxias contiene, además de estrellas, material interestelar difuso, de baja densidad. Primordialmente por razones observacionales los estudios concernientes al material interestelar se refieren mayoritariamente a nuestra galaxia.

En nuestra galaxia la densidad media es $\sim 10 \times 10^{-24}$ g cm⁻³; aproximadamente la mitad corresponde a material interestelar. Si el material interestelar estuviese distribuído homogéneamente, se encontrarían aproximadamente tres átomos por cm³. (El papel preponderante del hidrógeno se debe por supuesto a que su abundancia cósmica es órdenes de magnitud mayor que las abundancias de los demás elementos). Sin embargo, la distribución de la materia interestelar es inhomogénea. Aproximadamente 5% del vólumen galáctico está ocupado por regiones

de alta densidad y formas irregulares denominadas nubes, cuyos tamaños oscilan entre 0.1 y 10 parsec (1pc=3.26 años luz), con densidades en el rango $10 - 10^7$ átomos y moléculas por cm^3 . Además de la fase gaseosa, las nubes contienen lo que se denomina "humo" o "polvo" cósmico, constituido por partículas de tamaño típico ~ 0.1 micrones, y composición desconocida, aunque hay razones para considerar como probables candidatos a distintos silicatos, grafito y una mezcla de hielos "sucios". Aproximadamente el 1% de la masa de las nubes está constituido por polvo cósmico. El gas interestelar es calentado y ionizado por radiación ultravioleta y por rayos cósmicos provenientes, respectivamente, de estrellas calientes y de (posiblemente) supernovas. Diversos mecanismos, incluyendo radiación espontánea de átomos y moléculas y colisiones con partículas de polvo cósmico, contribuyen al enfriamiento de la fase gaseosa. Excepto en regiones completamente ionizadas (regiones H II) situadas en las inmediaciones de estrellas calientes, las temperaturas resultantes para las nubes se encuentran entre 10 y 100 k aproximadamente.

Observaciones realizadas en diversas regiones espectrales (UV, óptico, IR, microondas, radiofrecuencias) permiten clasificar esquemáticamente las nubes interestelares en función de los parámetros físicos que las caracterizan, como se muestra en la Tabla 1. En nubes difusas el hidrógeno se encuentra en

forma predominantemente atómica debido a que las bajas densidades implican tasas de formación de H_2 que no pueden competir eficientemente con la disociación debida a absorción de fotones UV. En las demás nubes, en cambio, el interior se halla parcial o totalmente protegido de los efectos disociativos de la radiación interestelar UV por autoapantallado de las moléculas de H_2 y por la extinción (dispersión + absorción, caracterizada por A_v) producida por el polvo cósmico; estas nubes están constituidas predominantemente por H_2 , contienen cantidades apreciables de una diversidad de moléculas y se denominan, genéricamente, nubes moleculares. Hasta el momento se han identificado más de cuarenta moléculas interestelares, sin incluir las variedades isotópicas detectadas, como se ilustra en la Tabla 2, donde también se incluyen varias moléculas aún no detectadas, pero que presumiblemente se encuentran presentes en nubes moleculares. Las líneas moleculares de absorción y emisión proveen información acerca de densidades, temperaturas, composición química e isotópica y campos de radiación en nubes moleculares individuales, su extensión angular y su ubicación en la galaxia. Las moléculas interestelares proveen por lo tanto una valiosa herramienta para el estudio de temas tan diversos como la intensidad y espectro de la radiación isótropa universal de 2.7°K, teorías de nucleosíntesis, cinética química, espectroscopía molecular de especies de muy

corta vida media en condiciones de laboratorio, y el proceso de formación de estrellas (un problema central de la astronomía de todos los tiempos) que parece tener lugar en regiones moleculares densas (de Jong y Maeder 1976).

La mayor parte de las observaciones descritas hasta aquí fueron interpretadas en un principio en términos de modelos simples de densidad y temperatura uniformes. En este contexto se desarrollaron, con variado éxito, modelos químicos de nubes moleculares. Hollenbach y Salpeter (1971) estudiaron la formación de H_2 interestelar concluyendo que este proceso debe realizarse en la superficie catalítica de las partículas de polvo cósmico; observaciones posteriores produjeron considerable evidencia en apoyo de este modelo (Jura 1974). Poco después, Watson y Salpeter (1972) propusieron un modelo de formación de moléculas simples (como H_2O , CH_4) por reacciones catalíticas sobre granos interestelares, el modelo depende de una cantidad de parámetros pobremente conocidos por lo que sus resultados son esencialmente cualitativos. Herbst y Klemperer (1973) desarrollaron un modelo químico estacionario basado en reacciones ion-molécula que produjo resultados compatibles con las observaciones. Una cantidad de nuevas observaciones, ideas teóricas y determinaciones experimentales de velocidades de reacción en procesos químicos relacionados con moléculas interestelares pronto requirieron la modificación, extensión y refinamiento de los modelos pri-

mitivos. Importantes nuevas rutas químicas fueron propuestas por ejemplo por Dalgarno, Oppenheimer y Black (1973), Oppenheimer y Dalgarno (1975), Herbst y colaboradores (1975), Huntress (1977); la importancia de reacciones de transferencia de carga entre iones moleculares y átomos como Fe, Ca, Mg y Na para la ionización relativa fue señalada por Oppenheimer y Dalgarno (1974); Glassgold y Langer (1974) y Barshun y Walmsley (1977) propusieron modelos químicos para nubes de baja densidad donde los efectos de la radiación ultravioleta interestelar son importantes; Iglesias (1977) desarrolló los primeros modelos de evolución química de nubes moleculares, asumiendo densidad y temperatura constantes.

El constante aumento en calidad y cantidad de las observaciones disponibles lleva a reconocer nuevos e importantes problemas. En particular se puede destacar la probable existencia de ondas de choque propagándose en nubes moleculares y sus efectos dinámicos, térmicos y químicos, temas que motivan el presente trabajo.

Varios argumentos independientes indican que las nubes moleculares, lejos de ser regiones homogéneas de densidad y temperatura uniforme, podrían contener densos agregados de gas que se mueven a velocidades supersónicas. Esto se infiere, por ejemplo, del trabajo de Matsakis y otros (1977) quienes interpretan que sus observaciones de NH_3 implican la existen-

cia de inhomogeneidades en gran escala dentro de nubes moleculares. Dichos autores argumentan que esas grandes sub-nubes se mueven a velocidades relativas supersónicas, lo que permite explicar simultáneamente los anchos de línea observados y la aparente transparencia de las nubes en líneas que, de otro modo, serían opacas. Los anchos de línea de varias moléculas y de líneas de recombinación en radiofrecuencias (Zuckerman y Palmer 1974; Brown y otros 1974) proveen evidencia en favor de este punto de vista. De acuerdo a una interpretación alternativa, los perfiles de línea de varias moléculas, en particular ^{12}CO y ^{13}CO , indican la ocurrencia de colapso sistemático supersónico. Liszt y otros (1974) interpretaron que sus datos correspondientes a anchos de líneas y a variaciones en los perfiles con la profundidad óptica y con la temperatura de brillo favorecen un modelo dinámico en el que la nube molecular se halla colapsando gravitacionalmente. Las magnitudes de las velocidades de caída libre pueden explicar los anchos de línea observados y son extremadamente supersónicas. Cualquier irregularidad, sea cinemática o en densidad, que se aparte de la simetría esférica tenderá a ser amplificada durante el colapso y este proceso producirá consecuentemente ondas de choque en pequeña escala, y actuará como una fuente de turbulencia supersónica. El tiempo de disipación característico de dichos movimientos es del mismo orden que

el tiempo característico de colapso de la nube y por lo tanto el colapso es capaz de proveer la energía para el proceso.

La bien conocida correlación espacial entre nubes moleculares y regiones HII provee otra indicación de la presencia de ondas de choque en dichos objetos. La región M8 ha sido particularmente bien estudiada en este respecto: Lada y otros (1976), comparando observaciones de radio, infrarrojas y ópticas encontraron una íntima asociación entre frentes de ionización y nubes moleculares. Los frentes de ionización serán en general precedidos por ondas de choque que comprimirán la nube molecular; dichos frentes se propagarán dentro de la nube molecular a velocidades comparables a la velocidad del sonido en la región HII (10 km s^{-1}). Debido a las altas densidades y temperaturas que se alcanzan en presencia de fuerte enfriamiento, la región comprimida entre ambos frentes es de particular importancia para la química molecular.

Finalmente, la reciente detección de emisión infrarroja ($\sim 2\mu$) proveniente de hidrógeno molecular vibracionalmente excitado con temperaturas de excitación $\leq 2500 \text{ }^\circ\text{K}$ en la nube molecular de Orion (Gautier y otros 1976; Joyce y Grasdalen 1977; Beckwith y otros 1977) constituye una nueva línea de evidencia de la existencia de ondas de choque en nubes moleculares.

Hollenbach y Shull (1977) analizaron dichas observaciones en términos de excitación de las moléculas de hidrógeno por (i) absorción de radiación ultravioleta (proveniente de una estrella cercana a la región de emisión) y subsecuente cascada radiativa a través de los niveles vibracionales del estado fundamental electrónico y por (ii) excitación colisional en la zona de enfriamiento radiativo de una onda de choque, favoreciendo la segunda hipótesis. Otros autores (Kwan 1977; London, McCray y Chu 1977) arribaron a similares conclusiones. Estos últimos autores proponen vientos estelares como posibles mecanismos propulsores de ondas de choque en nubes moleculares.

La estructura química de las nubes moleculares puede ser significativamente modificada por la propagación de ondas de choque en el medio. Las posibles modificaciones incluyen la inyección de nuevas moléculas en la fase gaseosa por descarado y disrupción de los mantos del polvo cósmico (Aannestad 1973), disociación molecular radiativa o colisional, ocurrencia de reacciones con apreciables energías de activación y de ciertas reacciones endotérmicas, y la formación de una zona comprimida de baja temperatura ($T < 100 \text{ }^\circ\text{K}$) donde no prevalece el equilibrio químico, que tiende a ser reestablecido por reacciones ion-molécula en escalas de tiempo astronómicamente significativas. La existencia efectiva y la importancia relativa de estos efectos en nubes moleculares dependen

den de la velocidad v_0 con que se propaga el frente de onda respecto al medio. Esquemáticamente se pueden considerar dos casos de interés astrofísico: ondas de choque que disocian todas las moléculas y ionizan todos los átomos del medio ambiente ($v_s \gtrsim 50 \text{ km s}^{-1}$), y ondas de choque no disociativas ($v_s < 15 \text{ km s}^{-1}$) que esencialmente calientan y comprimen el gas. El presente trabajo se focaliza en el estudio de la alternativa enunciada en segundo término, estadísticamente mas frecuente según lo indicado por las observaciones. En este caso se puede ignorar la inyección de nuevas moléculas en la fase gaseosa por descascarado del polvo cósmico porque para granos constituídos por silicatos o grafito se requieren velocidades relativas al gas del orden de 200 km s^{-1} para obtener una eficiencia de descascarado apreciable (Salpeter 1977); además existen modelos (Aannestad 1973) de descascarado de mantos de hielos (CH_4 , H_2O , NH_3) en ondas de choque que requieren velocidades significativamente mayores que las consideradas aquí para alcanzar alta eficiencia, y los hielos constituyen un pequeño porcentaje ($\sim 2\%$) de la masa total de silicatos en nubes moleculares (Merrill, Russell y Soifer 1976).

A medida que el gas ambiente pasa a través del frente de una onda de choque no disociativa, la mayor parte del movimiento ordenado de cada molécula es desviado y termalizado, aumentando la temperatura; la consiguiente disminución

de la velocidad de flujo y la continuidad del flujo de masa producen un brusco aumento de densidad en la inmediata vecindad del frente. Corriente abajo el gas se enfría paulatinamente por radiación molecular comprimiéndose simultáneamente. La región de enfriamiento radiativo coincide espacialmente con la zona en que diversas reacciones sensibles a temperatura compiten para modificar la estructura química del gas. Eventualmente la velocidad del flujo respecto del frente de onda disminuye hasta valores despreciables, la temperatura decrece a valores comparables a la temperatura del medio ambiente, y la densidad alcanza su máximo valor; en esta región reacciones exótermicas que proceden sin energía de activación reestablecen el equilibrio químico detallado. En este trabajo se estudian, mediante modelos numéricos unidimensionales estacionarios, el flujo, los perfiles térmicos, y, especialmente, la evolución química de una onda de choque no disociativa que se propaga en el interior de una nube molecular. Para ello se extienden y adaptan a una situación predominantemente molecular modelos hidrodinámicos desarrollados por Field y colaboradores (1968) para nubes difusas (Capítulo II); y se discuten los principales procesos que contribuyen al enfriamiento para obtener una expresión apropiada para la función de enfriamiento (Capítulo III). El esquema químico adoptado se discute en el Capítulo IV; se seleccionaron aproximadamente doscientas reacciones para

obtener las ecuaciones cinéticas diferenciales correspondientes a sesenta y cuatro especies químicas de interés cuyas concentraciones se determinan a lo largo del flujo. En el Capítulo V trata el método de resolución, y se discuten los resultados; el resumen se encuentra en el Capítulo VI.

CAPITULO II.

MODELO HIDRODINAMICO

En este capítulo se describe el modelo hidrodinámico utilizado, se presentan las aproximaciones adoptadas y se extienden y modifican modelos hidrodinámicos utilizados previamente para nubes difusas.

a. Simplificaciones

En situaciones reales el problema de la propagación de ondas de choque en nubes moleculares depende de una cantidad de parámetros, incluyendo la geometría e historia previa de la región. Se pueden evitar las complejidades inherentes al modelado de una región específica y al mismo tiempo investigar las características principales del problema adoptando simplificaciones convenientes. La mas obvia, y adoptada en este trabajo, es considerar un medio ambiente homogéneo de densidad y temperatura uniformes. La segunda simplificación consiste en la adopción de una geometría plano paralela en la que el frente de onda es normal a la velocidad de propagación, y donde la única dimensión espacial considerada es z , en la dirección de propagación. Aunque existen seguramente casos reales de mayor complejidad (por ejemplo colisiones oblicuas de nubes moleculares), esta hipótesis es directa o aproximadamente aplicable en una variedad de casos de interés astrofísico, como colisiones frontales de

masas de gas y ondas de choque propulsadas por vientos estelares o por la expansión de regiones HII, cuyos radios de curvatura típicos ($\lambda \approx 0.1$ pc) son, como se demostrará, mucho mayores que las dimensiones transversales de la cáscara comprimida.

Argumentos similares justifican la adopción de una tercera hipótesis que consiste en asumir que la velocidad del frente de onda con respecto al medio ambiente es constante. Por ejemplo, el tiempo típico de expansión de una región HII ($\lambda \approx 10^4$ años) es mucho mayor que el tiempo de enfriamiento (~ 500 años) del gas perturbado, y en este último lapso las posibles variaciones de la velocidad de expansión son despreciables.

La adopción de las ecuaciones de estado estacionario ($\partial/\partial t \equiv 0$), consistente con la hipótesis anterior, simplifica enormemente el modelo y se justifica si las escalas de tiempo correspondientes a la región perturbada son mucho menores que las vidas medias de los fenómenos que propulsan la onda de choque. Esto se verifica considerando que dichas vidas medias son mayores que 10^5 años (1 pc a 10 km s $^{-1}$) tanto para colisiones de nubes como para la expansión de regiones HII.

Por último, al considerar la posible existencia de campos magnéticos conjuntamente con la evidencia observacional de una componente ionizada finita (ver Tablas 1 y 2) en nubes

moleculares, se hace necesario describir de alguna manera la interacción del gas con el campo magnético. Por simplicidad se asume acoplamiento completo entre iones y neutros, y líneas de campo "congeladas" en el gas. El grado de corrección de esta hipótesis es discutible, como lo señalara por ejemplo Wentzel (1967), ya que en ondas de choque dominadas por fuerzas magnéticas los neutros son acelerados indirectamente por interacción con los iones, y dicha fricción puede resultar ineficiente dadas las bajas concentraciones iónicas (Tabla 1) típicas de nubes moleculares. Además, en la actualidad no se cuenta con evidencia directa de la existencia de campos magnéticos en nubes moleculares, y los valores propuestos para B en dichos objetos, que difieren unos de otros por órdenes de magnitud, están sujetos a controversia (Heiless 1971, Mouschovias 1976, Troland y Heiless 1977). Por ello, la inclusión del campo magnético en el modelo propuesto es en buena medida formal, y se limitará a la discusión de posibles efectos.

b. Ecuaciones hidrodinámicas

Con estas aproximaciones las ecuaciones hidromagnéticas de continuidad y conservación de impulso y energía se reducen a (Field y colaboradores 1968).

$$\frac{d}{dz} (\rho v) = 0 \quad (\text{II.1})$$

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{B}{\rho} \right) = 0 \quad (\text{II.2})$$

$$\rho v \frac{dv}{dz} + \frac{d}{dz} \left(p + \frac{B^2}{8\pi} - \sigma_{zz} \right) = 0 \quad (\text{II.3})$$

$$\frac{d}{dz} \left\{ \rho v \left(\frac{1}{2} v^2 + U + \frac{p}{\rho} \right) + \frac{B^2}{4\pi} v + F_z - v \sigma_{zz} \right\} = 0 \quad (\text{II.4})$$

donde v es la velocidad del flujo relativa al frente de onda, ρ densidad, B componente del campo magnético en la dirección normal a v , p presión, σ_{zz} tensor de los esfuerzos viscosos, U energía interna, y F_z es la componente z del vector de flujo radiactivo. Estas relaciones se complementan con las fórmulas de los gases ideales

$$p = \frac{R\rho T}{\mu} \quad (\text{II.5})$$

$$U = \frac{RT}{\mu(\gamma-1)} \quad (\text{II.6})$$

donde μ es el peso molecular medio y γ el cociente de los calores específicos, y con la relación

$$\frac{dF_z}{dz} = \Lambda(\rho, T) \quad (\text{II.7})$$

donde Λ , la función de enfriamiento, representa la potencia irradiada por unidad de volumen. En el Capítulo III se discute Λ en detalle.

c. El frente de onda

Whitney y Skalafuris (1963), en su estudio de ondas de choque en atmósferas estelares encuentran que en la vecindad del frente de onda se pueden distinguir cuatro regiones: (i) una región que precede al frente, afectada por radiación procedente del mismo, y que puede resultar ionizada por radiación ultravioleta en el caso de ondas de choque suficientemente energéticas; (ii) una región, situada inmediatamente detrás del frente, en la que tiene lugar la relajación colisional de los grados de libertad translacionales; (iii) a continuación, una región en la que los grados de libertad internos (vibración, rotación, estructura fina) son excitados, y (iv) la región de enfriamiento radiativo. Las velocidades consideradas en esta investigación, $v_s < 15 \text{ km s}^{-1}$, implican energías cinéticas moleculares $\frac{1}{2} m(\text{H}_2) v_s^2 < 2.25 \text{ eV}$ significativamente menores que $P.I.(\text{H}_2) = 15.43 \text{ eV}$ (Tabla 3) por lo que se puede ignorar el precursor ionizado; se desprecia el calentamiento del gas ambiente debido a la radiación mas blanda, por la alta transparencia del medio a esas frecuencias.

Se puede estimar en orden de magnitud el espesor de la región (ii) por medio de $\{n(H_2)\sigma_{\text{elast}}\}^{-1}$, el libre camino medio elástico. Como las secciones eficaces elásticas del H_2 son por lo menos uno o dos órdenes de magnitud mayores que las secciones eficaces inelásticas, el espesor de la región (ii) es mucho menor que el espesor de la región siguiente, y será tratado como una discontinuidad ("el frente de onda"). En consecuencia, la temperatura translacional está siempre bien definida fuera del frente de onda.

En su trabajo sobre nubes difusas, Field y colaboradores (1968) englobaron la región (iii) en la discontinuidad con el siguiente argumento: en sus modelos $n(H_2) \leq 0.1n(H)$ y el enfriamiento era producido principalmente por emisión de líneas rotacionales de H_2 en su estado vibracional mas bajo. En ese caso la escala de tiempo de enfriamiento es

$$t_{\text{enf}} \sim \frac{n(H)kT}{C n(H_2)\Delta E} ,$$

donde C es el número de excitaciones por molécula por segundo, y ΔE la energía de excitación. El tiempo típico de establecimiento de equilibrio rotacional es $t_{\text{rot}} \sim C^{-1}$, y por lo tanto

$$\frac{t_{\text{enf}}}{t_{\text{rot}}} \sim \frac{n(H)}{n(H_2)} \frac{kT}{\Delta E} \gtrsim 10$$

ya que $\Delta E \sim kT$ para los niveles involucrados. Sin embargo, al estudiar ondas de choque en nubes moleculares se debe distinguir dos casos (Shull y Hollenbach 1978): cuando en la región perturbada la tasa de excitación colisional $n(\text{H}_2) \langle \sigma_{\text{inelast}} v \rangle$ sobrepasa la probabilidad de emisión espontánea por unidad de tiempo A , se establece equilibrio termodinámico local (ETL) en un tiempo corto comparado con el tiempo de enfriamiento, la región (iii) puede ser considerada como una discontinuidad, y el enfriamiento se puede calcular a partir de las poblaciones de Boltzmann en la región (iv). Cuando $n(\text{H}_2) \langle \sigma_{\text{inelast}} v \rangle \lesssim 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$, no existe ETL, las regiones (iii) y (iv) se confunden, y se deben calcular simultáneamente las poblaciones instantáneas de los niveles del hidrógeno molecular y el enfriamiento. En este trabajo se adoptan $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $T_0 = 30\text{K}$ y $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$ como densidad y temperatura del medio ambiente no perturbado y velocidad del frente de onda en él, respectivamente, por ser valores típicos apropiados tanto a la expansión de regiones HII en nubes moleculares cuanto a colisiones nube-nube. Veremos que la elección de estos parámetros implica la segunda alternativa mencionada, es decir, se considera la región (ii) como una discontinuidad y se estudia en detalle la evolución de la región de enfriamiento en la que los gradientes térmicos generan cambios químicos significativos. La formulación es Lagrangiana, $dz = v dt$, y se

sigue la evolución de un elemento de fluido desde que entra a la discontinuidad hasta que su temperatura decae al valor no perturbado. Las cantidades subindicadas con cero se refieren al medio ambiente no perturbado, y el subíndice 1 indica que la cantidad correspondiente se refiere a la cara posterior de la discontinuidad, donde todavía no se ha producido enfriamiento radiativo.

d. El factor de compresión

Se puede integrar las ecuaciones (II.1) a (II.3) entre la región no perturbada y un valor cualquiera de z detrás del frente, independientemente de las pérdidas radiativas. Despreciando las fuerzas viscosas fuera del frente de onda se obtiene

$$\rho v = \rho_0 v_0 \quad (\text{II.8})$$

$$\rho v^2 + p + \frac{B^2}{8\pi} = \rho_0 v_0^2 + p_0 + \frac{B_0^2}{8\pi} \quad (\text{II.9})$$

$$\frac{B}{\rho} = \frac{B_0}{\rho_0} \quad (\text{II.10})$$

Definiendo el factor compresión $y = \rho/\rho_0$ y combinando las ecuaciones (II.8) a (II.10) se obtiene

$$p(y) = p_0 + \rho_0 v_0^2 (1 - y^{-1}) + \frac{B_0^2}{8\pi} (1 - y^2) \quad (\text{II.11})$$

$$T(y) = T_0 y^{-1} \{1 + M^2 (1 - y^{-1}) + b_0 (1 - y^2)\} \quad (\text{II.12})$$

presión y temperatura en cualquier punto y detrás del frente. En (II.12) $c = (p_0/\rho_0)^{1/2}$ es la velocidad del sonido en el medio ambiente, $M = v/c$ el número de Mach, y $b_0 = B_0^2/8\pi p_0$.

Manipulando convenientemente las ecuaciones (II.5) a (II.12), y usando la definición del factor de compresión y la relación $d/dz = d/vdt$, se puede reescribir la ecuación (II.4) de conservación de energía en la siguiente forma

$$\frac{dy}{dt} = \frac{(\gamma-1)\Lambda(y,T)}{-b_0 p_0 (\gamma-2)y + (p_0 + \rho_0 v_0^2 + b_0 p_0) \gamma y^{-1} - \rho_0 v_0^2 (\gamma+1)y^{-2}} \quad (\text{II.13})$$

que resulta conveniente para el tratamiento numérico.

La constancia aproximada de μ implícita en la derivación de (II.13) se verifica a-posteriori. Sin embargo es fácil ver, apelando nuevamente al argumento de la energía cinética correspondiente a las moléculas que arriban al frente, que la disociación del hidrógeno molecular es despreciable, y considerando las abundancias elementales de la Tabla 8 inferir que se pueden ignorar las variaciones del peso molecular promedio.

e. Valores iniciales

Para integrar la ecuación (II.13) se requieren valores iniciales de y y T . Integrando (II.4) a través del frente se obtiene

$$v_1^2 + \frac{2\gamma}{\gamma-1} \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{B_1^2}{2\pi\rho_1} = v_0^2 + \frac{2\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{B_0^2}{2\pi\rho_0} \quad (\text{II.14})$$

considerando que se puede despreciar las fuerzas viscosas fuera del frente y que en la cara posterior de este no ha comenzado aún el enfriamiento radiativo. Combinando (II.8), (II.10) y (II.11) con (II.14) se obtiene la siguiente ecuación cuadrática para el salto inicial de densidad

$$2(2-\gamma)b_0y_1^2 + \{(\gamma-1)M^2 + 2\gamma(1+b_0)\}y_1 - (\gamma+1)M^2 = 0 \quad (\text{II.15})$$

que tiene raíces reales si

$$M \geq (\gamma+2b)^{1/2} \quad \text{ó} \quad v_0 \geq \left(\frac{\gamma RT_0}{\mu} + \frac{B_0^2}{4\pi\rho_0} \right)^{1/2} \quad (\text{II.16})$$

Conocido y_1 se calcula T_1 mediante la ecuación (II.12).

En este trabajo se aproxima γ por el cociente de los calores específicos correspondientes a un gas de puro H_2 . El índice adiabático correspondiente a un gas de hidrógeno molecular cuyos niveles rotacionales y vibracionales pueden alcanzar un grado de excitación significativo es una función de la temperatura que varía entre 7/5 (correspondiente a traslación mas dos modos rotacionales) y 9/7 (traslación mas vibración mas rotación). Por simplicidad se adoptó $\gamma = 7/5$, valor apropiado para la mayor parte de la evolución estudiada. En el límite $M^2 \gg b_0$, (II.15) se transforma en

$$y_1 = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} = 6, \quad (\text{II.17})$$

y correspondientemente

$$T_1 \approx \frac{\mu}{R} \frac{2(\gamma-1)}{(\gamma+1)^2} v_0^2 \sim (4100 \text{ }^\circ\text{K}) (v_0/10 \text{ km s}^{-1})^2 \quad (\text{II.18})$$

donde se ha tomado $\mu=2.44$ de acuerdo a las abundancias elementales de la Tabla 8. Vemos entonces que $n_1(H_2) = 6 \times 10^4 < A / \langle \sigma_{\text{elast}} v \rangle \approx 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, y que por lo tanto la región inmediatamente posterior al frente no se encuentra en ETL.

CAPITULO III.

LA FUNCION DE ENFRIAMIENTO

Las altas temperaturas alcanzadas en la región que sigue inmediatamente al frente de onda disminuyen corriente abajo merced a diversos mecanismos de enfriamiento que incluyen radiación molecular y atómica, disociación molecular y colisiones inelásticas con partículas de polvo cósmico. En general la velocidad de enfriamiento depende de la disponibilidad de procesos con secciones eficaces inelásticas apreciables en el entorno de la energía cinética típica de las moléculas del gas en el instante dado que, simultáneamente, permitan la rápida irradiación de la energía transferida en la colisión. Por ello la tasa de enfriamiento del gas depende no sólo de su densidad y temperatura sino también de su composición y de su profundidad óptica en las frecuencias en que irradia. El estudio de la función de enfriamiento implica por lo tanto la propuesta de una serie de mecanismos plausibles para la composición dada y la evaluación de las eficiencias respectivas a distintas densidades y temperaturas.

Los principales mecanismos de enfriamiento de ondas de choque que se propagan en nubes difusas (regiones HI, predominantemente atómicas) en el rango de velocidades $v_0=4-16$ km s⁻¹ fueron discutidos por Field y colaboradores (1968). Dichos autores consideraron la excitación colisional, por

átomos y electrones, de todas las especies atómicas que poseen estructura fina cuyas abundancias en regiones HI exceden $10^{-6} n(\text{H})$ y de los niveles rotacionales del estado fundamental vibrónico de H_2 , encontrando que la importancia relativa del enfriamiento molecular aumenta con $n(\text{H}_2)$ hasta volverse dominante para $n(\text{H}_2) \gtrsim 0.1 n(\text{H})$.

Recientemente Shull y Hollenbach (1978, en adelante SH) consideraron el problema del enfriamiento de ondas de choque en nubes moleculares para temperaturas relativamente altas ($T > 500\text{K}$) encontrando que este está dominado por emisión de líneas cuadrupolares de H_2 correspondientes a transiciones de sus bandas vibracionales-rotacionales en casos en que la disociación del H_2 es despreciable.

Kwan (1978) discutió la eficiencia de enfriamiento por disociación colisional de H_2 en ondas de choque que se propagan en nubes moleculares concluyendo que esta es despreciable para $v_0 \lesssim 10 \text{ km s}^{-1}$, pero significativa en ondas de choque mas energéticas. Este umbral de velocidades es menor que el propuesto por SH ($12-15 \text{ km s}^{-1}$).

En lo que sigue se discute la función de enfriamiento utilizada en el presente trabajo. Por conveniencia se la ha dividido en una suma de términos

$$\Lambda = \Lambda_{\text{molec}} + \Lambda_{\text{disoc}} + \Lambda_{\text{atom}} + \Lambda_{\text{polvo}} \quad (\text{III.1})$$

correspondientes a enfriamiento por radiación molecular, disociación molecular, radiación atómica y colisiones inelásticas

con partículas de polvo interestelar respectivamente. En (a) se describe el enfriamiento por emisión cuadrupolar de H_2 ; en (b) se obtiene una expresión para el enfriamiento por CO; y en (c) se consideran otros mecanismos de enfriamiento.

a. Enfriamiento por H_2

Los resultados del capítulo anterior implican que la región inmediatamente posterior al frente no se encuentra en ETL. Esto requiere, como se mencionó, el cómputo de las poblaciones instantáneas de los niveles vibracionales-rotacionales del H_2 , lo que considerando conjuntamente con la integración simultánea de las ecuaciones cinéticas correspondientes a varias decenas de especies químicas plantea un problema computacional formidable en razón de la complejidad inherente, las facilidades de memoria requeridas y los altos costos asociados a considerables tiempos de procesamiento. Para evitar dichas dificultades se adoptó el criterio de ajustar expresiones analíticas a los resultados numéricos de SH, cuyos procedimientos se describen a continuación.

Se incluyeron en el cálculo las contribuciones de los niveles rotacionales $J=0-15$ del nivel vibrónico fundamental ($v=0$), y las correspondientes a los niveles rotacionales $J=0-10$ de cada uno de los niveles vibracionales excitados $v=1-6$.

Las energías correspondientes a los niveles vibraciona-

rotacionales del H_2 fueron calculadas mediante la expresión

$$E_{vJ} = hc \left\{ w_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - w_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + w_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 - w_e z_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^4 + B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 \right\} \quad (\text{III.2})$$

(Herzberg 1950) donde la constante rotacional para el estado vibracional v está dada por

$$B_v = B_e - \alpha_e \left(v + \frac{1}{2} \right) , \quad (\text{III.3})$$

siendo B_e la constante rotacional correspondiente a la separación de equilibrio r_e , y $\alpha_e \ll B_e$ la constante de corrección para el rotor vibrante; similarmente, la constante rotacional que describe los efectos de la fuerza centrífuga en el estado vibracional v es

$$D_v = D_e + \beta_e \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III.4})$$

Los valores adoptados para las distintas constantes, en cm^{-1} , fueron: $w_e = 4395.2$, $w_e x_e = 117.99$, $w_e y_e = 0.29$, $w_e z_e = 0.046$, $B_e = 60.809$, $D_e = 0.04656$, $\alpha_e = 2.993$ y $\beta_e = -1.793 \times 10^{-3}$.

Las tasas de decaimiento radiativo espontáneo para $v=0$, $J \leq 15$ (Annestad 1973) se ilustran en la Tabla 4; las correspondientes a $v \geq 1$ fueron provistas por Black (1977); valores numéricos típicos de la banda $v=1 \rightarrow 0$ se muestran en la Tabla 5.

Las secciones eficaces de excitación en colisiones $H-H_2$ son por lo menos un orden de magnitud mayores que las correspondientes a colisiones H_2-H_2 . Sólo las últimas se incluyeron en el cálculo, sin embargo, porque para $v_0=10 \text{ km s}^{-1}$ la concentración de hidrógeno atómico debido a disociación colisional es del orden de uno por mil en la región perturbada. A velocidades $v_0 > 10 \text{ km s}^{-1}$ la importancia de la excitación por colisiones con átomos de hidrógeno crece rápidamente y se hace necesaria su inclusión en los cálculos. Los coeficientes de deexcitación colisional dentro de un nivel v dado se calcularon mediante

$$C(vJ \rightarrow v'J') = \sigma_0 \bar{v} \left(1 - \frac{1}{5}\right) \left(1 + \frac{1}{b} + \frac{\Delta E_{vJ, v'J'}}{kT}\right) \quad (\text{III.5})$$

con $\sigma_0 = 10^{-16} \text{ cm}^{-2}$, $\bar{v} = (8kT/\pi m_r)^{1/2} = (1.45 \times 10^4 \text{ cm s}^{-1}) T^{1/2}$, m_r la masa reducida de H_2-H_2 , $\Delta E_{vJ, v'J'} = |E_{vJ} - E_{v'J'}|$ y $b = 1 + 0.1(kT/\Delta E_{vJ, v'J'})$. Para calcular los coeficientes de deexcitación colisional en transiciones para los cuales $\Delta v \geq 1$ se utilizó la expresión

$$C(vJ \rightarrow v'J') = \sigma_0 \bar{v} \exp \left\{ - \frac{2.87 \Delta E_{vJ, v'J'}}{k(T + 1190 \text{ }^\circ\text{K})} \right\} \quad (\text{III.6})$$

En ambos casos se consideraron únicamente transiciones para las cuales

$\Delta J = \pm 2$ en razón de que las secciones eficaces correspondientes a otras transiciones son al menos un orden de magnitud menores; los coeficientes de excitación se obtuvieron por medio del principio de balance detallado.

En las condiciones consideradas el tiempo típico de conversión orto - parahidrógeno - para hidrógeno por intercambio de protones y átomos de hidrógeno es largo comparado con el tiempo de enfriamiento hasta 500K; por lo tanto se mantuvo el cociente orto - para en su valor inicial de 3:1.

Las poblaciones n_{vJ} de los niveles vJ se obtuvieron integrando numéricamente las ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{dn_{vJ}}{dt} = & \sum_{v'J'} n_{v'J'} \{A(v'J' \rightarrow vJ) + n(H_2) C(v'J' \rightarrow vJ)\} - \\ & n_{vJ} \sum_{v'J'} n(H_2) C(vJ \rightarrow v'J') - \\ & n_{vJ} \sum_{v''J''} \{A(vJ \rightarrow v''J'') + n(H_2) C(vJ \rightarrow v''J'')\} + \\ & \sum_{v''J''} n_{v''J''} n(H_2) C(v''J'' \rightarrow vJ) \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

donde las dos primeras sumatorias se realizan sobre todos los niveles $v'J' > vJ$ para los cuales las transiciones desde y hacia el nivel vJ son permitidas, y donde las dos últimas sumatorias se realizan similarmente sobre todos los niveles $v''J'' < vJ$ para los que existen transiciones permitidas. Las reglas de selección para transiciones radiativas son

$\Delta J = 0, \pm 2$; $J = 0 \rightarrow 0$ prohibida

Δv : sin restricciones. (III.8)

Las transiciones colisionales siguen las mismas reglas de selección con la excepción de que se permiten transiciones $J = 0 \rightarrow 0$.

Finalmente, la contribución del H_2 al enfriamiento se obtuvo mediante

$$\Lambda_{H_2} = \sum_{vJ} n_{vJ} \sum_{v'J'} A(vJ \rightarrow v'J') \Delta E_{vJ, v'J'} \quad (III.9)$$

Esta expresión lleva implícita la transparencia del medio a las frecuencias correspondientes y se justifica porque, debido a sus bajas tasas de emisión espontánea, las líneas cuadrupolares $v = 1 \rightarrow 0$ y $v = 0 \rightarrow 0$ son ópticamente finas, a la dispersión de velocidades correspondiente al modelo, para densidades de columna $N(H_2) < 5 \times 10^{24} \text{ cm}^{-2}$, mucho mayores que las estudiadas (Fig. 7).

En la Fig. 1 se presentan los resultados de SH parametrizados por $n(H_2)$; la curva identificada con LTE corresponde al caso en que los niveles vibracionales-rotacionales se encuentran en equilibrio de Boltzmann.

El trabajo de SH ofrece expresiones analíticas que ajustan con razonable precisión la función de enfriamiento correspondiente al caso de ETL para los rangos de temperatura $T < 1600\text{K}$ y $T > 4000\text{K}$. La extrapolación de dichas expresiones al rango de temperaturas intermedio resulta poco satisfactoria. Por ello se empalmaron las curvas de SH mediante una tercera expresión que provee un ajuste razonablemente preciso de la función de enfriamiento de ETL en el intervalo $1600 \lesssim T \lesssim 4000\text{K}$.

De este modo se obtuvo

$$\Lambda_{\text{LTE}}(\text{H}_2) = \begin{cases} 1.4 \times 10^{-35} T^{4.74} n(\text{H}_2) & T < 1600 \text{ K} \\ 7.03 \times 10^{-29} T^{2.65} n(\text{H}_2) & 1600 < T < 4000 \text{ K} \\ 2.46 \times 10^{-18} n(\text{H}_2) \exp(-9140/T) & T > 4000 \text{ K} \end{cases} \quad (\text{III.10})$$

Notando luego que para densidades $n(\text{H}_2) < 10^6 \text{ cm}^{-3}$ la tasa de enfriamiento disminuye significativamente con respecto a $\Lambda_{\text{LTE}}(\text{H}_2)$, y que dicha disminución depende además de la temperatura, se definió

$$\Lambda(\text{H}_2) = G(T, n(\text{H}_2)) \Lambda_{\text{LTE}}(\text{H}_2) \quad (\text{III.11})$$

donde $G \leq 1$, y $G \rightarrow 1$ cuando $n(\text{H}_2) \rightarrow 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Finalmente, ajustando los resultados numéricos de SH se obtuvo

$$G = \left\{ 1 + \left(\frac{10^6}{n(\text{H}_2)} \right)^{1/2} \exp(-630/T) \right\}^{-1} \quad (\text{III.12})$$

En la Fig. 2 se aprecia la precisión del ajuste logrado. La curva representa los valores computados para $\Lambda(\text{H}_2)$ durante la evolución de una onda de choque caracterizada por $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$, $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y $T_0 = 30 \text{ K}$; notar (Fig. 7) que $n(\text{H}_2)$ es aproximadamente proporcional a T^{-1} . Los círculos representan los valores computados por SH para las correspondientes densidades y temperaturas. Considerando las incertidumbres inherentes al modelo el ajuste es muy satisfactorio.

b. Enfriamiento por CO

Numerosas observaciones (ej. Thaddeus 1976) y argumentos teóricos (Herbst y Klemperer 1973; Watson 1974; Iglesias 1977) sugieren que en nubes moleculares típicas como las descritas en el Capítulo I, CO es la molécula más abundante después de H₂. La Fig. 3 presenta un resumen esquemático de determinaciones observacionales del cociente CO/H₂; puede apreciarse, por comparación con las abundancias elementales de la Tabla 8, que el CO contiene la mayor parte del carbono interestelar que se encuentra en fase gaseosa. Cuando una onda de choque no disociativa se propaga en una nube molecular, las transformaciones químicas que tienen lugar en la región de enfriamiento dejan inalterada la concentración del CO (Capítulo V), un compuesto particularmente estable. La abundancia de esta especie, su estructura heteronuclear que implica la existencia de un momento dipolar permanente y cortas vidas medias radiativas, y su particular estructura de niveles rotacionales determinan la gran importancia que tiene el monóxido de carbono como refrigerante en la zona comprimida por la onda de choque.

En la aproximación "oscilador anarmónico" los niveles vibracionales de moléculas diatómicas se calculan mediante

$$E_v = hc \left\{ \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - v_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + w_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 \dots \right\} \quad (\text{III.13})$$

(Herzberg 1950). Para CO los valores apropiados son $\omega_e = 2170.21$, $v_e x_e = 13.461$ y $w_e y_e = +0.0308$ (todo en cm^{-1}). Las energías de los

niveles vibracionales excitados respecto del fundamental son entonces $(E_v - E_0)/k = 3083, 6127$ y 9133 K para $v = 1, 2$ y 3 respectivamente. En equilibrio de Boltzmann el cociente entre las poblaciones del primer estado excitado vibrónico y del nivel fundamental

$$n_{CO}(v = 1)/n_{CO}(v = 0) = \exp(-3083/T)$$

vale 0.46, 0.21 y 0.05 para $T = 4000, 2000$ y 1000 K respectivamente. Sin embargo la potencia irradiada en la banda $v = 1 \rightarrow 0$ ($\sim 4.7\mu$) del CO es despreciable frente al enfriamiento por radiación cuadrupolar de H_2 ya que

$$\frac{\Lambda_{CO}(v = 1 \rightarrow 0)}{\Lambda_{H_2}(v = 1 \rightarrow 0)} \sim \frac{n_{CO}(v = 0)n_{H_2}(v = 0)k_{CO,H_2}^{exc} \Delta E_{CO}(v = 1 \rightarrow 0)}{n_{H_2}(v = 0)n_{H_2}(v = 0)k_{H_2,H_2}^{exc} \Delta E_{H_2}(v = 1 \rightarrow 0)} \sim$$

$$\frac{n_{CO}}{n_{H_2}} \frac{2.1(\mu)}{4.7(\mu)} \ll 1$$

porque los coeficientes de excitación colisional para CO k_{CO,H_2}^{exc} , son comparables a los correspondientes a H_2 , k_{H_2,H_2}^{exc} (Thompson 1973). Por ello no se consideraron transiciones vibracionales de CO.

A temperaturas $T < 500$ K el enfriamiento por transiciones dipolares entre niveles rotacionales del estado fundamental vibrónico de CO se hace importante. Cualitativamente esto se puede entender comparando los

esquemas de niveles rotacionales de CO y H₂. El mayor momento de inercia del CO se refleja en un espaciamiento entre niveles mucho menor que el correspondiente a H₂ ($E_J \propto B_e \propto I^{-1}$); por ejemplo, el primer nivel excitado de H₂ se encuentra a una energía $E/k = 510$ K por encima del nivel fundamental, en tanto que para CO la cantidad correspondiente es 5.5 K (Tabla 6). Por debajo de $T \sim 500$ K, la disponibilidad de niveles de energía excitables colisionalmente y las mayores tasas de emisión espontánea correspondientes a transiciones dipolares determinan que el enfriamiento por CO predomine rápidamente sobre el enfriamiento por radiación cuadrupolar de H₂, al descender la temperatura, a pesar de la diferencia de abundancias.

El cómputo de $\Lambda(\text{CO})$ se simplifica considerablemente si se puede asumir que los niveles rotacionales de CO se encuentran en equilibrio de Boltzmann. Para verificar la validez de dicha hipótesis es necesario investigar la razón entre la velocidad con que se pueblan colisionalmente los niveles rotacionales del CO, y la velocidad con que se despueblan por emisión espontánea. En la literatura se encuentran distintas especulaciones acerca de la forma de las secciones eficaces inelásticas rotacionales correspondientes a colisiones CO-H₂ (Goldsmith 1972; Scoville y Solomon 1974; Goldreich y Kwan 1974; de Jong, Chu y Dalgarno 1975). En este trabajo se adoptó $\sigma = 4 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ por simplicidad. Considerando que $\Lambda(J \rightarrow J-1) = A_0 J^3$ (ver mas abajo) y adoptando una tasa de excitación de los niveles rotacionales de CO $\langle \sigma v_t \rangle$, donde v_t es la velocidad térmica de las moléculas de hidrógeno, se puede estimar

$$\frac{n(\text{H}_2) \langle \sigma v_t \rangle}{A(J \rightarrow J-1)} = \frac{9 \times 10^3 T^{1/2} n(\text{H}_2)}{10^{-7} J^3} \quad (\text{III.14})$$

Para $T \lesssim 500 \text{ K}$, $n(\text{H}_2) \gtrsim 6 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ (Fig.7) y la expresión (III.14) implica que los niveles rotacionales de CO se encuentran en equilibrio de Boltzman aproximado para $J \lesssim 8$.

Para obtener una expresión analítica aproximada que represente $\Lambda(\text{CO})$ se asumió ETL para los niveles rotacionales $J < J_{\text{max}}$, y profundidad óptica despreciable en las líneas emitidas. En estas condiciones se tomó

$$\Lambda(\text{CO}) = \sum_{J=1}^{J_{\text{max}}} n_J A(J \rightarrow J-1) \Delta E_{J,J-1} \quad (\text{III.15})$$

despreciando la contribución de los niveles $J > J_{\text{max}}$, donde J_{max} se obtiene de la expresión

$$A(J \rightarrow J-1) = \langle \sigma v_t \rangle n(\text{H}_2) , \quad (\text{III.16})$$

$$\Delta E_{J,J-1} = 2h B_e J = 2E_0 J, \quad (\text{III.17})$$

$$\text{y } \Lambda(J \rightarrow J-1) = \frac{64 \pi^4 \mu^2}{3hc^3} (\nu_{J,J-1})^3 \frac{J}{2J+1} = A_0 J^3 \quad (\text{III.18})$$

donde μ es el momento dipolar permanente. En ETL las poblaciones n_J de los niveles rotacionales están dados por

$$n_J = \frac{n(\infty)}{Q_p} (2J + 1) \exp - \{hB_e J (J + 1)/kT\} \quad (\text{III.19})$$

donde la función de partición rotacional Q_p se calcula mediante

$$Q_p = \sum_{J=0}^{\infty} (2J + 1) \exp - \{hB_e J (J + 1)/kT\} \quad (\text{III.20})$$

Reemplazando las sumatorias en (III.15) y (III.20) por integrales y despreciando términos de orden superior se obtiene

$$\Lambda(\infty) = \frac{2F_0 A_0 n(\infty) \int_0^{J_{\max}} J^5 \exp - (F_0^2/kT) dJ}{\int_0^{J_{\max}} J \exp - (F_0^2/kT) dJ} \quad (\text{III.21})$$

y con el cambio de variables

$$u = E_0 J^2 / kT \quad (\text{III.22})$$

$$\Lambda(\infty) = 4 k^2 \left(\frac{A_0}{E_0}\right) n(\infty) T^2 f(u_{\max}) , \quad (\text{III.23})$$

donde

$$f(u) = \{1 - 0.5 e^{-u}(u^2 + 2u + 2)\} / (1 - e^{-u}) \quad (\text{III.24})$$

Usando $\mu = 0.11$ Debye y $B_e = 1.9313 \text{ cm}^{-1}$, se obtiene

$$u_{\max} = 7.35 \times 10^{-2} \{n(\text{H}_2) / 10^4 \text{ cm}^{-3}\}^{2/3} (100 \text{ K}/T)^{2/3} \quad (\text{III.25})$$

$$y \quad \Lambda(\text{CO}) = 1.78 \times 10^{-23} n(\text{CO}) T^2 f(u_{\max}) \quad (\text{III.26})$$

c. Otros mecanismos de enfriamiento

Otras moléculas heteronucleares relativamente abundantes, como HD y OH, podrían contribuir significativamente al enfriamiento para $T < 500 \text{ K}$, aparte de CO. Sin embargo, el mayor espaciamiento de los niveles rotacionales determinado por los menores momentos de inercia de HD y OH resultan en eficiencias de enfriamiento menores que la correspondiente a CO con su apretado esquema de niveles, especialmente a bajas temperaturas. Asumiendo una abundancia $\text{HD}/\text{H}_2 = 2 \times 10^{-5}$ compatible con las observaciones en nubes difusas (Solomon y Wolf 1973), y siguiendo un procedimiento similar al usado en (b) se encuentra

$$\Lambda(\text{HD}) \approx 1.23 \times 10^{-31} T^{2.54} n(\text{H}_2) \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}, \quad (\text{III.27})$$

significativamente menor que $\Lambda(\text{CO})$ para $T \lesssim 500 \text{ K}$.

Para transiciones radiativas permitidas $J \rightarrow J-1$ las tasas de emisión espontánea para OH son un factor

$$(\mu_{\text{CO}}/\mu_{\text{OH}})^2 (B_e^{\text{CO}}/B_e^{\text{OH}})^3 \approx 2 \times 10^5 \text{ mayores que los correspondientes a CO. En consecuencia, a las temperaturas y densidades}$$

consideradas las poblaciones de los niveles rotacionales de OH se encuentran significativamente por debajo de las correspondientes a ETL, y no puede utilizarse la aproximación adoptada para CO y HD. Estos bajos números de ocupación, considerados conjuntamente con el esquema de niveles sugieren que el enfriamiento rotacional de OH podría ser insignificante. Si así no fuera los tiempos de enfriamiento correspondientes a $T < 500$ K serían menores que los hallados.

Como se discutiera en (a), la contribución al enfriamiento debido a disociación colisional de moléculas de hidrógeno es despreciable para $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$. Similarmente se puede despreciar la disociación colisional de moléculas con energías de disociación $D \gtrsim D(\text{H}_2) = 4.48 \text{ eV}$. Los compuestos mas abundantes en la región situada corriente arriba del frente son especies estables con energías de disociación comparables o mayores que $D(\text{H}_2)$ (ver Fig. y Tabla 3); por lo tanto se despreció el enfriamiento disociativo por especies con $D < 4.48 \text{ eV}$ en razón de sus bajas abundancias. En consecuencia, en el presente modelo se tomó $\Lambda_{\text{dis}} = 0$.

Se examina a continuación la incidencia del enfriamiento por radiación de niveles de estructura fina de especies atómicas abundantes. Usando secciones eficaces de excitación por colisiones con H_2 estimados, SH concluyen que los niveles de estructura fina de las especies atómicas de interés se encuentran termalizados a densidades $n(\text{H}_2) < 10^5 \text{ cm}^{-3}$, y que Λ_{atom}

és despreciable frente a $\Lambda(\text{H}_2)$ para $T > 500$ K en ondas de choque caracterizadas por $10^3 \leq n_0(\text{H}_2) \leq 10^7 \text{ cm}^{-3}$, $6 \leq v_0 \leq 14 \text{ km s}^{-1}$. La discusión se limitará entonces a la región comprimida donde las temperaturas son relativamente bajas ($T \lesssim 500$ K, $n(\text{H}_2) > 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, Fig. 7). Asumiendo que las tasas de excitación en colisiones con H_2 son aproximadamente 0.2-0.4 por las tasas correspondientes a encuentros con H (caso C^+-H_2 , Chu y Dalgarno 1975), los coeficientes radiativos de emisión espontánea y las tasas de deexcitación colisional de Bahcall y Wolf (1968) implican el equilibrio térmico de los niveles de estructura fina de las especies de interés (Tabla 7) en la región considerada. Con los datos de la Tabla 7 se obtienen las siguientes tasas de enfriamiento (en $\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$) apropiados para ETL:

$$\Lambda(\text{O}) = n(\text{O}) (1.7 \times 10^{-18} e^{-228/T} + 4.6 \times 10^{-20} e^{-326/T}) \quad (\text{III.28})$$

$$\Lambda(\text{C}) = n(\text{C}) (1.5 \times 10^{-22} e^{-24/T} + 2.9 \times 10^{-22} e^{-63/T}) \quad (\text{III.29})$$

$$\Lambda(\text{C}) = n(\text{C}) (1.5 \times 10^{-22} e^{-24/T} + 2.9 \times 10^{-22} e^{-63/T}) \quad (\text{III.30})$$

$$\Lambda(\text{C}^+) = 6.1 \times 10^{-20} n(\text{C}^+) e^{-92/T} \quad (\text{III.31})$$

$$\Lambda(\text{Si}^+) = 2.4 \times 10^{-18} n(\text{Si}^+) e^{-413/T} \quad (\text{III.32})$$

Considerando que $n(C)$ varía entre $\sim 10^{-5}$ y 10^{-2} cm^{-3} para $500 \gtrsim T \gtrsim 30 \text{ K}$, y las abundancias de la Fig.7 se concluye que el enfriamiento debido a radiación por niveles excitados de estructura fina es despreciable frente a $\Lambda(CO)$.

Debido a la alta eficiencia con que irradia ($\propto T^4$) el polvo cósmico se encuentra a temperaturas sensiblemente menores que las del gas en la zona comprimida por la onda de choque. Burke y Hollenbach (1978) calcularon el enfriamiento debido a la emisión por partículas de polvo de la energía transferida por colisiones de moléculas de hidrógeno encontrando

$$\Lambda_{\text{polvo}} = n(H_2)n_{\text{polvo}} \langle \sigma v \rangle \alpha 2k(T - T_{\text{polvo}}) =$$

$$4 \times 10^{-34} n(H_2)^2 T^{3/2} \text{ erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (\text{III.33})$$

En la expresión anterior se adoptó para α (el coeficiente de acomodamiento) el valor 0.5, que resulta apropiado para el rango de temperaturas considerado (Hollenbach 1978); la sección eficaz geométrica de las partículas de polvo se estimó mediante $\sigma = 6 \times 10^{-22} n(H_2)/n_{\text{polvo}}$, que resulta compatible con la extinción típica del medio interestelar (Spitzer 1968). La contribución es despreciable a $T \sim 500 \text{ K}$ pero aumenta hasta $\sim 20\%$ a $T \sim 30 \text{ K}$ por lo que fué incluida en los cálculos. Debido a la dependencia cuadrática en la densidad la impor-

1870
1871
1872
1873
1874
1875
1876
1877
1878
1879
1880
1881
1882
1883
1884
1885
1886
1887
1888
1889
1890
1891
1892
1893
1894
1895
1896
1897
1898
1899
1900

CAPITULO IV

MODELO QUIMICO

Es conveniente comenzar la descripción del esquema químico adoptado haciendo referencia a las abundancias elementales, cuya elección se discute en el punto (a).

La evolución hidrodinámica de las ondas de choque estudiadas cubre un amplio rango de temperaturas: desde 4100 K en la cara posterior del frente de onda hasta ~ 30 K en la región más densa. En esta última región la química está dominada por reacciones ion-molécula relativamente insensibles a la temperatura, que también determinan las concentraciones iniciales necesarias para integrar las ecuaciones cinéticas diferenciales de interés. El sistema de reacciones ion-molécula se describe en (b), en tanto que en el punto (c) se tratan las reacciones sensibles a temperatura que juegan un papel preponderante en la evolución química de la región caliente vecina al frente de onda.

La información termoquímica necesaria para esta investigación se obtuvo de las J.A.N.A.F. Thermochemical Tables, 2a. edición (1971) y de sus suplementos que aparecen periódicamente en el Journal of Physical and Chemical Reference Data.

a. Abundancias elementales

Las abundancias elementales habitualmente denominadas "cósmicas" y más modernamente standard, se refieren en realidad a nuestro sistema solar y provienen de observaciones de la fotosfera, cromósfera y corona solares, rayos cósmicos solares y meteoritos (Cameron 1968; Pagel 1973; Allen 1973). Diversas observaciones sugieren, en la interpretación de algunos investigadores (Unsold 1969), la virtual constancia de las abundancias standard en la escala galáctica, aunque este punto de vista no es compartido plenamente (Pagel 1973). Observaciones recientes en UV y radiofrecuencias y consideraciones teóricas indican que el problema de la homogeneidad de las abundancias elementales galácticas no puede considerarse resuelto (Tinsley 1977).

Con excepción de las de H y He, las abundancias elementales de la fase gaseosa se hallan significativamente deprimidas respecto de las abundancias standard, en el medio interestelar (Spitzer y Jenkins 1975). Este fenómeno se atribuye generalmente a la condensación de los elementos pesados en granos de polvo cósmico (ej. Salpeter 1977); el factor de depresión de los distintos elementos correlaciona bien con la temperatura de condensación de los mismos (Field 1974).

En las nubes difusas observadas con el Telescopio UV del satélite Copérnicus las abundancias correspondientes a la fase gaseosa son muy aproximadamente uniformes (Spitzer

y Jenkins 1975). Por ello se adoptaron las abundancias deprimidas de la Tabla 8, derivadas de sus observaciones por Morton (1974). A modo de comparación la misma tabla ilustra las abundancias standard totales (gas + polvo) de Allen (1973).

b. El esquema químico para bajas temperaturas

En el presente trabajo se consideran moléculas relativamente simples constituídas por H, O, C y N. Su gran abundancia relativa confiere al hidrógeno molecular un papel central en la química de las nubes interestelares densas; por lo tanto parece natural describir en primer lugar los mecanismos que lo forman y destruyen.

(i). H_2 : Formación y Destrucción

El H_2 , que constituye la mayor parte de la masa contenida en las nubes moleculares, se forma en la superficie catalítica de los granos de polvo cósmico (Hollenbach y Salpeter 1971). Esquemáticamente, un primer átomo de hidrógeno se adhiere a la superficie de una partícula de polvo al chocar con ésta; típicamente permanece allí, explorando los pozos de potencial vecinos por efecto túnel, un tiempo suficientemente largo como para que un segundo átomo llegue, se adhiera a la superficie, y se produzca el encuentro y subsecuente recombinación y eyección. Hollenbach, Werner y Salpeter (1971) calculan una tasa de formación de H_2 en granos

$$R_p = \frac{1}{2} \eta \langle \sigma_p \rangle \langle v_H \rangle n_{\text{polvo}} n(H) \quad (\text{IV.1})$$

donde η es la fracción de átomos que eventualmente forman moléculas al chocar con un grano, $\langle \sigma_p \rangle$ la sección geométrica media de los granos de polvo y $\langle v_H \rangle$ la velocidad térmica media de los átomos de hidrógeno en el gas.

Dichos autores encuentran que, en las condiciones físicas reinantes en nubes difusas y moleculares, R_p es prácticamente independiente de la temperatura. Las observaciones favorecen un valor

$$R_p = k_p n_H n(H) = 2.5 \times 10^{-17} n_H n(H) \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (\text{IV.2})$$

(Jura, 1975a,b), donde se ha utilizado la relación $\langle \sigma_p \rangle = 3 \times 10^{-22} n_H / n_{\text{polvo}}$ (Capítulo III) para escribir R_p en función de $n_H (\text{cm}^{-3})$, la densidad de núcleos de hidrógeno.

En las capas externas de las nubes moleculares, permeadas por el campo ultravioleta interestelar ($h\nu < 13.6 \text{ eV}$), el H_2 es destruído por el mecanismo de Stecher y Williams (1967). La absorción de fotones en la banda de Lyman excita las moléculas desde el estado fundamental electrónico $X^1\Sigma^+$ ($v=0$) hasta un nivel vibracional v' del estado electrónico $B^1\Sigma^+$; aproximadamente 40% de las moléculas excitadas decae radiativamente al continuo vibracional del estado fundamental electrónico,

disociándose; el resto decae radiativamente a estados vibratoriales ligados.

En estado estacionario la competencia entre formación en granos y destrucción por absorción de fotones ultravioleta determina las abundancias relativas de H y H₂, la profundidad óptica en la banda de Lyman aumenta rápidamente con la distancia hacia el interior de la nube, y en la región interior prácticamente todo el hidrógeno se encuentra en forma molecular (Hollenbach, Werner y Salpeter 1971). El espesor de la zona de transición es despreciable en nubes moleculares para las que, típicamente, $n_H \gtrsim 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y N_H , la densidad columnar de núcleos de hidrógeno, excede 10^{23} cm^{-2} (Tabla 1, Fig. 3).

El interior de las nubes se encuentra aislado de la influencia del campo ultravioleta interestelar también por la extinción (dispersión + absorción) continua debida al polvo interestelar (Heiles 1971). No es necesario por lo tanto considerar fotoionización o fotodisociación en estas regiones, que son las de interés para el presente trabajo.

(ii). Reacciones Gaseosas

Consideraciones teóricas (Herbst y Klemperer 1973, Watson 1974) indican que, con excepción de H₂, las moléculas interestelares se sintetizan mayormente por intermedio de reacciones que tienen lugar en la fase gaseosa (éstas son

más rápidas en general que los procesos catalíticos en granos). Observaciones de diversas moléculas, como HN_2^+ , HCO^+ y SO_2 (Snyder, Watson y Hollis 1977), CO (Knapp y Jura, 1976), DCO^+ (Guelin y colaboradores 1977) y NH (Crutcher y Watson 1976), proveen evidencia en favor de dicho punto de vista, que se adopta como hipótesis en esta investigación.

Las bajas densidades y temperaturas características de las nubes moleculares imponen restricciones en cuanto al tipo de reacciones gaseosas que resultan eficientes en dichas regiones. Se puede despreciar la incidencia de reacciones que involucran colisiones de tres cuerpos porque requieren densidades del orden de 10^{11} cm^{-3} , mucho mayores que las observadas, para ser eficientes. A temperaturas $T < 100 \text{ K}$ solo reacciones exotérmicas proceden rápidamente y es to a condición de no poseer energías de activación. La mayor parte de las reacciones bimoleculares entre especies neutras poseen energías de activación $E_a/k \gg 100\text{K}$, y no inciden por lo tanto en la química de bajas temperaturas que se describe en este parágrafo. Muchas reacciones átomo-radical escapan a esta regla sin embargo, y proveen importantes rutas para la síntesis de varias especies interestelares (ver más abajo). Las reacciones ion-molécula raramente poseen energías de activación (Mc Daniel y colaboradores, 1970) razón por la cual ocupan un lugar fundamental en la química interestelar. Un considerable cuerpo de evidencia experimental (ej.

(Hampson y Garvin, 1975; Anderson, 1976; Huntress y Anicich 1976; Huntress, 1977) indica que los coeficientes de reacción, para muchos de estos procesos, independientes de la temperatura, y tienen valores numéricos comparables a los predichos por la aproximación de Langevin

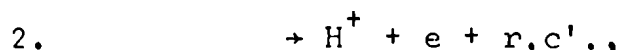
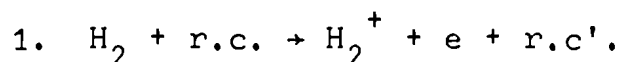
$$k_{\text{Langevin}} = 2\pi e (\alpha/\mu)^{1/2} \sim 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (\text{IV.3})$$

(Mc Daniel y colaboradores 1970). (En la expresión anterior e es la carga del electrón, α la polarizabilidad del reactante neutro y μ la masa reducida de las partículas incidentes). La generación de las especies cargadas que intervienen en las reacciones ion-moléculas se discute a continuación.

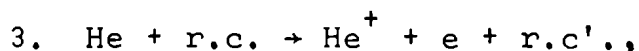
(iii). Ionización por Rayos Cósmicos

La galaxia está permeada homogéneamente por un flujo aproximadamente constante de rayos cósmicos (principalmente protones) de alta energía ($\gtrsim 100$ MeV). La distribución espectral a energías menores es mal conocida. Sin embargo, esta incertidumbre es irrelevante para las regiones estudiadas: rayos cósmicos de baja energía (~ 2 MeV) pueden penetrar densidades columnares $N_{\text{H}} \lesssim 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (Herbst y Kemperer 1973), afectando por lo tanto solo las capas externas de las nubes. En cambio se necesitan densidades de columna $N_{\text{H}} > 10^{24} \text{ cm}^{-2}$ (Herbst, Kemperer, 1973; Watson 1974) para atenuar sig-

nificativamente el flujo de partículas de alta energía (~ 100 MeV) que pueden por lo tanto penetrar la mayor parte de las nubes observadas con la posible excepción del gigantesco complejo Sagitarius B2, situado en el centro galáctico. Este bombardeo de rayos cósmicos duros inicia la serie de reacciones químicas que tienen lugar en las profundidades interiores de las nubes, ionizando el hidrógeno molecular



y el helio

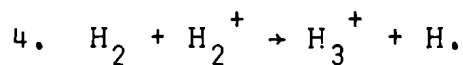


donde se ha simbolizado los estados iniciales y finales de los rayos cósmicos intervinientes con c.r. y c.r', respectivamente, y los números a la izquierda identifican la reacción. La tasa total de ionización de H_2 inducida por rayos cósmicos de 100 MeV es $\zeta \sim 10^{-17} \text{ s}^{-1}$, correspondiéndole una fracción 0.95 ζ al canal (1) y 0.05 ζ al canal (2) (Solomon y Werner 1971). Resultados experimentales (Allison y Warshaw 1953) indican $\zeta_{\text{He}} \sim \zeta$ (Herbst y Klemperer, 1973). No es necesario

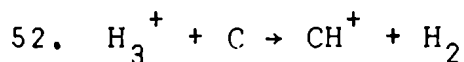
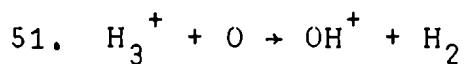
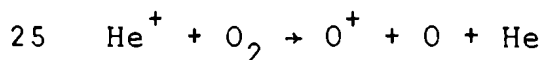
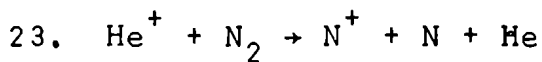
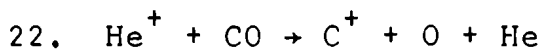
considerar la ionización inducida por rayos cósmicos para especies más pesadas ya que la ionización de H_2 y He, seguida de rápidas reacciones ion-molécula (Tabla 10) con neutros abundantes es más eficiente para producir iones pesados (Herbst y Klemperer 1973).

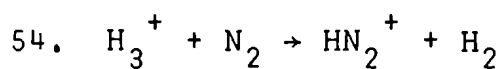
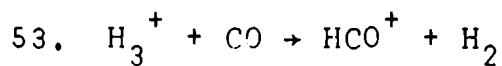
(iv). Reacciones Secundarias

El H_2^+ producido por el proceso (1) reacciona rápidamente con el abundante H_2 , sintetizando H_3^+ :

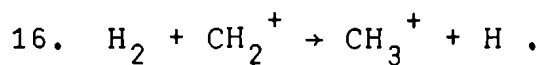
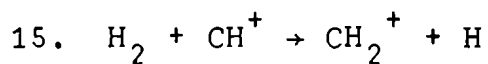
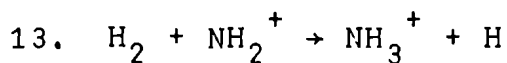
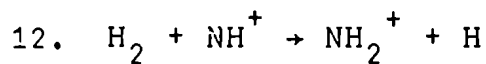
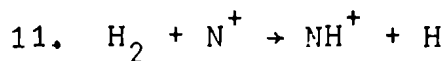
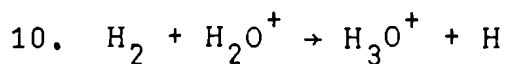
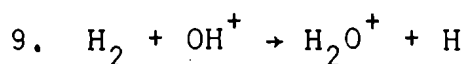
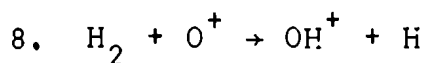


Ni el H_3^+ ni el He^+ ($k_7 = 1.6 \times 10^{-13} \exp(-160/T) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, Tabla 10) reaccionan con H_2 , por lo que sus concentraciones llegan a ser relativamente altas. Estos iones son destruidos por reacciones con especies abundantes como

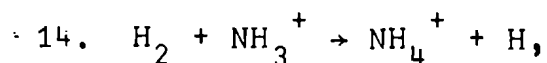




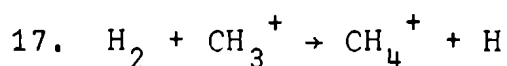
produciendo iones pesados que se hidrogenan rápidamente por reacciones con H_2 . Ejemplos importantes de este tipo de proceso son



Los productos iónicos finales de cada una de estas rutas químicas no pueden continuar el proceso de hidrogenación por razones de estructura (H_3O^+) ó por la presencia de energías de activación :

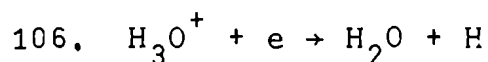


($k_{14} = 5 \times 10^{-15} + 1.1 \times 10^{-2} \exp(-1050/T) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) es lenta, y

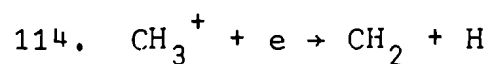
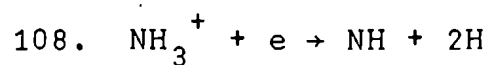


es endotérmica.

Una fracción importante de dichos iones hidrogenados es destruída en rápidas recombinaciones disociativas con electrones (Tabla 12), cinéticamente más favorables que las recombinaciones radiativas. Así se produce vapor de agua y radicales oxidrilo,

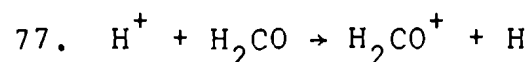
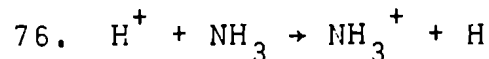
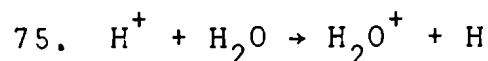
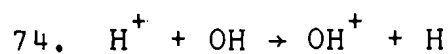
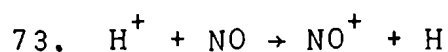


y otros radicales

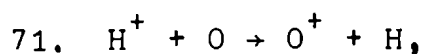


Los coeficientes de recombinación disociativa son sensibles a la temperatura; se asumió que esta dependencia es de la forma $T^{-1/2}$, de acuerdo a resultados experimentales de Leu, Biondi y Johsen (1973, a, b).

Reacciones de intercambio de carga con protones térmicos como



(Tabla 11) contribuyen a la destrucción de moléculas y radicales relativamente abundantes; el proceso

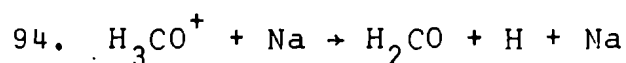
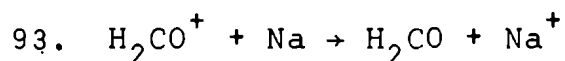
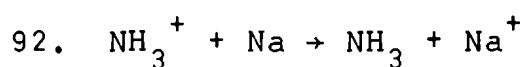


aunque ligeramente endotérmico, constituye una importante fuente de iones oxígeno en regiones donde la temperatura excede $\sim 100\text{K}$.

Además del intercambio de carga con iones reactivos como H^+ y C^+ , es necesario considerar la rápida transferencia

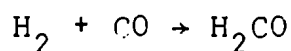
de carga de iones moleculares a átomos pesados como Fe, Mg, Ca y Na entre otros. Los iones de dichos átomos, que son destruídos lentamente por recombinación radiativa, acumulan prácticamente toda la carga positiva, determinando por lo tanto las densidades electrónicas en las nubes moleculares (Oppenheimer y Dalgarno 1974). Por simplicidad sólo se incluyó Na, el de menor potencial de ionización entre los metales traza. Esta simplificación aproxima bien las densidades electrónicas que se obtendrían incluyendo los demás metales (Oppenheimer y Dalgarno, 1974). Las reacciones de intercambio de carga con Na y los correspondientes coeficientes (medidos o estimados) se encuentran en la Tabla 11. El coeficiente de recombinación radiativa adoptado para Na^+ es

$k_{99} = 2.0 \times 10^{-10} T^{-0.7}$ (Allen 1973). Además de regular la densidad electrónica, las reacciones de intercambio de carga con metales traza contribuyen a la formación de moléculas observacionalmente abundantes como amoníaco y formaldehído

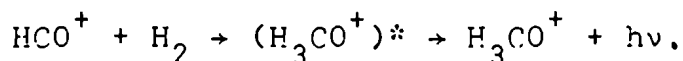


El formaldehído es una molécula interestelar ubicua y relativamente abundante (ej. Zuckerman y Palmer, 1974; Solomon

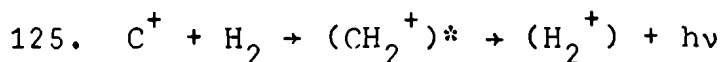
1973). Su síntesis a baja temperatura presenta un problema particular porque la reacción



es endotérmica. Una salida a este dilema es invocar una ruta química que incluye como paso intermedio la asociación radiativa de un ion con una molécula (ej. Herbst y Klemperer, 1973; Dalgarno, Oppenheimer y Black, 1973). Experimentos recientes demostraron la ineficacia del mecanismo sugerido por Herbst y Klemperer (1973) que incluye la asociación radiativa



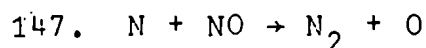
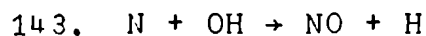
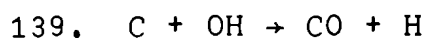
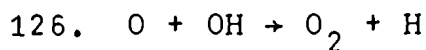
En este trabajo se adoptó el esquema propuesto por Dalgarno, Oppenheimer y Black (1973) cuyo eslabón básico es



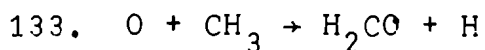
Esta importante reacción ha motivado diversas investigaciones. Los experimentos de Mahan y Sloane (1973) y estudios teóricos de Liskow, Bender y Schaefer (1974) sugieren que se forma un complejo activado $(\text{CH}_2^+)^*$ de vida media comparable a un período rotacional, y que el estado fundamental electrónico de CH_2^+ es accesible a los reactantes. Herbst, Schubert y Certain

(1977) encuentran un coeficiente de reacción teórico $k_{125} = 10^{-14.0 \pm 1.5} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ a 90K. Para el presente modelo se adoptó $k_{125} = 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ (Tabla 13), que resulta en concentraciones $n(\text{H}_2\text{CO}) / n(\text{H}_2) \sim 10^{-9}$, compatibles con las observaciones (ej. Solomon, 1973). Si las densidades de átomos metálicos (como Mg) capaces de intercambiar carga con CH_3^+ son mayores que $n(\text{Na})$, se puede disminuir el valor de k_{125} sin afectar significativamente la abundancia de formaldehído.

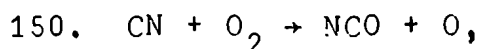
Las reacciones átomo-radical, que frecuentemente carecen de energías de activación, juegan un importante papel en los modelos químicos de nubes moleculares. Los coeficientes de reacción correspondientes a este tipo de proceso son altos ($k_{\text{atomo-radical}} \sim 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, Tabla 14, comparables a los derivados asumiendo secciones eficaces geométricas), e insensibles a la temperatura ($k_{\text{atomo-radical}} \propto T^{1/6}$; Herbst y Klemperer 1973) cuando no existen energías de activación. Como ejemplos importantes se citan las reacciones



que son eficientes mecanismos de destrucción de radicales relativamente abundantes, y contribuyen a la síntesis de moléculas estables como O_2 , CO y N_2 (Herbst y Klemperer 1973); el proceso



es importante en el esquema del formaldehído (Palgarno, Oppenheimer y Black, 1973); la reacción radical-molécula



que es rápida ($k_{150} = 0.7 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$) y carece de energía de activación (Boden y Trush, 1968), constituye probablemente el principal mecanismo de destrucción del CN observado en nubes moleculares (Iglesias 1977).

Para finalizar esta sección se presenta en las Figs. 4-6 un resumen esquemático que ilustra rutas químicas importantes (a bajas temperaturas) del modelo adoptado.

c. Procesos químicos de alta temperatura

En la inmediata vecindad del frente de onda se alcanzan temperaturas ($T \sim 4000\text{K}$) que, en condiciones de equilibrio termodinámico, implican un alto grado de disociación molecular.

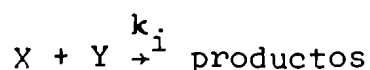
Cómputos detallados de equilibrio disociativo para atmósferas estelares (Tsuji 1964, 1973) indican, por ejemplo, que a dicha temperatura las concentraciones relativas a H de las moléculas mas abundantes (H_2 y CO) son del orden de 10^{-10} , para $n_H \sim 10^9 \text{ cm}^{-3}$, y decrecen al disminuir la densidad. El carácter altamente transitorio de la región de elevada temperatura permite sin embargo la supervivencia de muchas especies moleculares (con concentraciones que se desvían considerablemente de las correspondientes a equilibrio termodinámico) en las ondas de choque estudiadas. En otras palabras, el tiempo típico de enfriamiento es mucho menor que el correspondiente al de establecimiento de equilibrio químico disociativo a las densidades y temperaturas consideradas.

Contrariamente a lo que ocurre en situaciones de equilibrio termodinámico, donde la relación entre la densidad de una especie y las de sus elementos constituyentes se describe por medio de un único parámetro (la "constante" de equilibrio), la investigación de la química de no equilibrio que tiene lugar en la zona perturbada por la onda de choque requiere considerar un conjunto de reacciones específicas para cada una de las especies consideradas. Las densidades relativamente bajas ($10^4 \lesssim n_H \lesssim 10^7 \text{ cm}^{-3}$) permiten restringirse a reacciones bimoleculares. Los coeficientes de reacción para estos últimos procesos se expresan habitualmente mediante la fórmula de Arrhenius

$$k_{\text{Arrhenius}} = A \exp(-E_a / kT) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

donde A, el factor preexponencial, puede depender (en general débilmente) de la temperatura, y E_a , la energía de activación, es la barrera energética que se debe transponer para formar los productos. Valores típicos de A son $10^{-10} - 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, en tanto que las energías de activación cubren un amplio rango que va desde cero, para ciertas reacciones exotérmicas como las átomo-radical mencionadas en (b), hasta varios eV, correspondientes aproximadamente a energías de ligadura en reacciones endotérmicas.

La abundancia de una determinada especie ν presente en la región perturbada por la onda de choque es modificada significativamente por una reacción particular



cuando el tiempo típico de reacción $t_r(Y)$ es menor que el tiempo típico de enfriamiento t_{enf} a la misma temperatura. Por consiguiente, los procesos neutro-neutro sensibles a temperatura incluídos en el modelo fueron seleccionados requiriendo que

$$t_r(Y) = (k_i(T_1)n_1(Y))^{-1} \quad (\text{IV.4})$$

(donde $k_i(T_1)$ es el coeficiente de reacción del proceso considerado, a la temperatura T_1 y el subíndice 1 indica la cara posterior del frente) sea menor que $t_{enf}(T_1)$. Se encontraron 43 reacciones que satisfacen el criterio (Tabla 15). Los coeficientes de reacción de muchos de ellos son conocidos experimentalmente, con errores que, frecuentemente, dependen de la temperatura de la medición. Típicamente los errores sobre todo el rango de temperaturas medido implican posibles variaciones de los coeficientes de reacción por factores 1.5-2 en ambos sentidos (Hampson y Garvin 1975; Anderson 1976).

En los casos en que sólo se cuenta con unas pocas determinaciones a diferentes temperaturas (reacciones (175), (178), y (192)) se interpolaron fórmulas de Arrhenius a los datos. En otros casos (procesos (158) y (163)) sólo se conoce el coeficiente de reacción en la dirección exotérmica k_{exo} ; se utilizó entonces

$$k_{endo} \sim k_{exo} \exp(-\Delta H/kT), \quad (IV.5)$$

donde ΔH es el calor de reacción, para estimar el coeficiente de reacción en la dirección endotérmica.

Como se adelantó, la disociación colisional no afecta significativamente la concentración de H_2 ; sin embargo, produce cantidades importantes de hidrógeno atómico reactivo.

Journal of Democracy

Journal of Democracy

CAPITULO V

EVOLUCION QUIMICA: RESOLUCION Y RESULTADOS

En el paragrafo (a) de este capítulo se describe el método utilizado para computar los perfiles estacionarios, hidrodinámicos y químicos, correspondientes a una onda de choque que se propaga con velocidad $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$ en una nube molecular homogénea caracterizada por $n(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y $\tau_0 = 30\text{K}$. Los resultados se discuten en (b).

a. Método de resolución

Las variaciones de densidad y temperatura sufridas a lo largo de su camino por un elemento de gas que se desplaza corriente abajo del frente de onda inducen variaciones significativas de sus abundancias químicas relativas. Para investigar dichas variaciones se requiere, en las condiciones de no equilibrio imperantes, integrar las ecuaciones cinéticas diferenciales que describen la competencia entre los procesos que sintetizan y destruyen las especies presentes. Usando los procesos y coeficientes de reacción de las Tablas 10-15 se escribieron las ecuaciones cinéticas para 64 especies de interés. Muchas de esas ecuaciones dependen sensitivamente de la densidad y temperatura local, las que a su vez están acopladas a la composición química instantánea del gas a través de la función de enfriamiento. Se obtuvieron soluciones autoconsistentes integrando, mediante un procedimiento numérico, las ecuaciones

cinéticas simultáneamente con las expresiones (II.12) y (II.13) que describen las variables hidrodinámicas. Como variables de cómputo se utilizaron las concentraciones definidas mediante

$$x(M) = n(M) / n_H \quad (V.1)$$

donde $n(M)$ (cm^{-3}) es la densidad de la especie genérica M , y n_H el número de núcleos de hidrógeno por cm^3 . Al alcanzar la temperatura del gas un valor igual a T_0 , se interrumpió la integración.

Los valores iniciales del coeficiente de compresión y de la temperatura se computaron mediante (II.15) y (II.12) respectivamente. Para inicializar las concentraciones químicas se asumió que la composición del medio ambiente no es modificada por el pasaje del frente de onda, ya que en él no tienen lugar ni disociación molecular ni reacciones químicas (los tiempos típicos de disociación y de reacción son mayores que los correspondientes a colisiones elásticas). Las concentraciones iniciales adoptadas corresponden a un estado químico estacionario (formación = destrucción) caracterizado por $T = 30\text{K}$ y $n_H = 2 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Dichas concentraciones se obtuvieron resolviendo numéricamente el conjunto de ecuaciones algebraicas que resulta al igualar

$$\frac{dx(M_i)}{dt} = 0 \quad , \quad (V.2)$$

para todo i . Estos valores de equilibrio fueron elegidos en razón de que probablemente las nubes moleculares con densidades $n(\text{H}_2) < 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ se encuentran químicamente en estado estacionario, ya que la escala de tiempo en que este se establece es menor que las escalas de tiempo dinámicas relevantes (Iglesias 1977). Nótese que en principio se debiera adoptar concentraciones iniciales de no equilibrio para ondas de choque que se propagan en nubes moleculares cuyas densidades exceden 5×10^5 moléculas de hidrógeno por cm^3 .

Las subrutinas utilizadas para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas (V.2), y para integrar el sistema de 65 ecuaciones diferenciales a coeficientes variables simultáneas fueron provistos por el Centro de Computación de Berkeley (Universidad de California). El trabajo de programación restante corrió por cuenta del autor. Los programas se procesaron en el equipo CDC 6400 del mismo Centro. La subrutina de integración, apropiada para ecuaciones "tiesas" (stiff equations) como las tratadas, se basa en el método de Gear (1971); el paso de integración varía automáticamente para obtener la precisión requerida por el usuario. La subrutina utilizada para resolver el sistema algebraico se basa en el método de Brown (1969, 1971) que converge más rápidamente que el de Newton.

b. Resultados y discusión

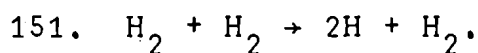
En la Fig. 7a se ilustra la evolución de una onda de choque caracterizada por parámetros $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$, $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y $T_0 = 30\text{K}$. La componente del campo magnético paralela al frente de onda se tomó igual a cero. Se puede describir el enfriamiento como aproximadamente isobárico; crece la densidad al disminuir la temperatura. El modelo investigado es incapaz de predecir la temperatura asintótica corriente abajo del frente porque no incluye otros mecanismos de calentamiento que la onda de choque en sí. Si la temperatura asintótica fuera comparable a $T_0 = 30\text{K}$, como parece probable en ciertos casos, la correspondiente densidad sería $n(\text{H}_2) \approx 10^7 \text{ cm}^{-3}$, que compara bien con la densidad predicha para ondas de choque isotérmicas $n_0(\text{H}_2)(v_0/c)^2$ (Spitzer 1968).

El gas se enfría hasta alcanzar una temperatura de 30K en aproximadamente 500 años, un tiempo mucho menor que los tiempos de expansión de regiones HII ($> 10^4$ años) y de interpenetración en colisiones nube-nube ($\sim 10^5$ años). Se justifica entonces la hipótesis de estado estacionario de las variables hidrodinámicas (Cap. II). Similarmente, una rápida estimación demuestra que Δz , el espesor de la cáscara comprimida, no excede $5 \times 10^{15} \text{ cm}$; luego Δz es mucho menor que los radios típicos de regiones HII en expansión ($> 0.1 \text{ pc}$) y se justifica la adopción de una geometría plana.

En la figura 7b se presenta la evolución química computada para la región de enfriamiento. Las concentraciones iniciales están marcadas sobre el eje de la izquierda. Como es notorio, la onda de choque modifica significativamente una fracción importante de las abundancias moleculares; sin embargo, las concentraciones de algunas especies, notablemente H_2 , CO, N_2 , NH_3 , HCN y CO_2 permanecen inalteradas. Las características evolutivas mencionadas se discuten a continuación

(i). H_2

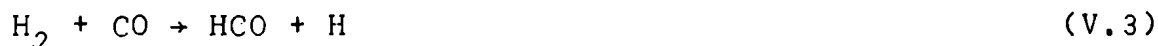
El rápido incremento de $x(H)$ en la Fig. 7b se debe a disociación colisional



El hidrógeno atómico alcanza una concentración máxima aproximadamente igual a 4×10^{-3} , demostrando que $x(H_2)$ permanece efectivamente inalterada durante la evolución. La alta abundancia alcanzada por el reactivo hidrógeno atómico es importante para la síntesis de vapor de agua y radicales formilo en las ondas de choque.

(ii) CO y Otras Especies Estables

A altas temperaturas ($T \sim 3000K$), la reacción



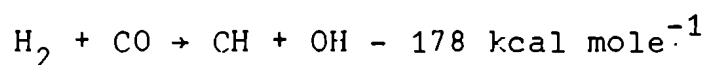
es endotérmica por aproximadamente $80 \text{ kcal mole}^{-1}$. Tomando un coeficiente de reacción

$$k_{V.3} \sim 10^{-11} \exp \{-(40000 + E_a)/T\},$$

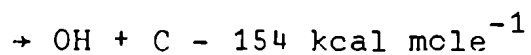
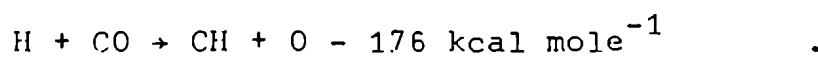
dónde E_a es la energía de activación (desconocida) correspondiente a la reacción inversa, se encuentra un tiempo de reacción (a $T = 4100 \text{ K}$)

$$\{k_{V.3} n(\text{H}_2)\}^{-1} \approx 960 \text{ años},$$

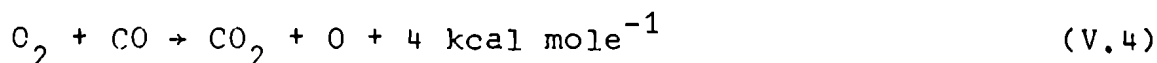
demasiado largo como para que este proceso tenga alguna importancia como sumidero de CO. El proceso



es más endotérmico que la reacción (V.3), y el correspondiente tiempo de reacción es consecuentemente más largo. Reacciones con el abundante hidrógeno atómico, que eventualmente podrían deprimir la concentración de CO, como



son también despreciables debido a sus largos tiempos de reacción. El proceso



($k_{\text{V.4}} = 2 \times 10^{-11} \exp(-30000/T) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, Dean y Kistiakowsky 1971) es similarmente despreciable debido a una alta energía de activación. Argumentos similares a los presentados valen para H_2O y N_2 , las únicas especies restantes con abundancias suficientemente altas como para poder deprimir apreciablemente $x(\text{CO})$.

La constancia de la razón $x(\text{CO})/x(\text{H}_2)$ a través de toda la estructura de la onda de choque es un resultado importante, porque sugiere que observaciones de emisión infrarroja de esas moléculas conducirán eventualmente a la medición directa de la abundancia de carbono con respecto a hidrógeno en nubes moleculares densas asociadas a regiones HII. Este resultado es insensible a la energía de la onda de choque para $v_0 \lesssim 15 \text{ km s}^{-1}$ (tomando dicha velocidad como "límite de disociación" de H_2) porque $D(\text{CO}) > D(\text{H}_2) = 4.48 \text{ eV}$. Para $v_0 > 15 \text{ km s}^{-1}$ sin embargo, el cociente $x(\text{CO})/2x(\text{H}_2)$ podría exceder $\{C\}/\{H\}$, la abundancia elemental de fase gaseosa correspondiente a C. Para $n_0(\text{H}_2) > 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $x(\text{CO})/2x(\text{H}_2)$ puede ser menor que $\{C\}/\{H\}$ porque, para esas densidades, las nubes en las que el hidrógeno se encuentra mayormente en forma molecular podrían no haber alcanzado el equilibrio químico, y el CO podría

no contener la mayor parte del carbono (Iglesias 1977), y además no existen mecanismos eficientes de formación de CO asociados a la onda de choque.

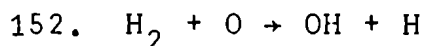
Barreras de activación o altos calores de reacción impiden similarmente la destrucción de las otras moléculas "estables" mencionadas. Las densidades columnares normales al frente de onda correspondientes a especies "estables" se computan mediante

$$N(M) = \int_0^t n(M) v dt = n_0(M) v_0 t . \quad (V.5)$$

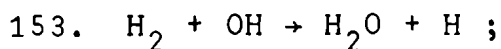
De esta manera se obtuvo la escala horizontal de la figura 7b.

(iii) H_2O

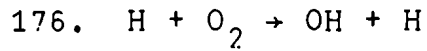
En aproximadamente dos años ($n(H_2) \sim 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$), $x(H_2O)$ aumenta un orden de magnitud con respecto a su valor inicial, con lo que pasa a contener la mayor parte del oxígeno que no se encuentra ligado en forma de CO. Esto se concreta en dos pasos: primero la reacción



convierte el oxígeno atómico en OH, que a su vez es transformado rápidamente en vapor de agua mediante el proceso



la escala de tiempo asociada es del orden de un mes. Después, en aproximadamente dos años, la reacción



seguida de (152) y (153) convierte una cantidad substancial del O_2 inicial en H_2O (fig. 7b).

El resultado de que detrás de los frentes de ondas de choque, que se propagan en nubes moleculares con velocidades $v_0 \sim 10 \text{ km s}^{-1}$, la mayor parte del oxígeno gaseoso no ligado en CO se encuentra formando H_2O debe ser válido para un amplio rango de densidades y composiciones químicas iniciales. Esto se debe a que en la región no perturbada situada corriente arriba del frente el hidrógeno se encuentra mayormente en forma molecular, en tanto que O y O_2 contienen la mayor parte del oxígeno gaseoso que no se encuentra en forma de CO, sin importar que prevalezca el equilibrio químico, para composiciones elementales razonables (Iglesias 1977). Además, densidades no perturbadas mayores que 10^4 moléculas de H_2 por cm^3 no pueden afectar este resultado porque los tiempos de enfriamiento menores implicados son sin embargo largos comparados con la escala de tiempo asociada a la formación de H_2O (esta última es proporcional a n_{H}^{-1} , en tanto que la primera es menos sensible a cambios en la densidad, ver Capítulo III). La mayor incertidumbre proviene de posibles desviaciones de los coeficientes de reacción relevantes respecto de los valores

adoptados, fuera del rango de temperaturas en que fueron medidos. Velocidades del frente menores que 10 km s^{-1} tienden a disminuir la concentración máxima alcanzada por H_2O debido a los menores coeficientes de reacción asociados a temperaturas mas bajas.

Una configuración en que H_2O da cuenta de la mayor parte del oxígeno no ligado en CO, no es estable en nubes moleculares de baja temperatura (Iglesias 1977). En dichas nubes las escalas de tiempo asociadas al equilibrio químico vienen dados por los tiempos de formación ó destrucción de átomos y moléculas abundantes; las especies traza se encuentran en equilibrio químico aproximado y siguen los cambios de las concentraciones de las especies mayores (Iglesias 1977). Ya que, como se discutió, $x(\text{H}_2)$, $x(\text{CO})$ y $x(\text{N}_2)$ no son modificadas por la onda de choque, la escala de tiempo correspondiente al reestablecimiento del equilibrio químico en el gas perturbado está dada por el tiempo de destrucción de H_2O :

$$t_{\text{eq}} \sim t_{\text{eq}}(\text{H}_2\text{O}) \sim \{k_{38}n(\text{C}^+) + k_{46}n(\text{HCO}^+) + k_{57}n(\text{H}_3^+) + k_{75}n(\text{H}^+)\}^{-1} = 10^6 \text{ años} \quad (\text{V.6})$$

Esta escala de tiempo es en buena medida independiente del valor de la densidad total porque las concentraciones de los iones que destruyen el vapor de agua son aproximadamente

proporcionales a n_H^{-1} (Iglesias 1977); por ejemplo, la concentración de H_3^+ puede escribirse

$$x(H_3^+) = \zeta x(H_2) / \{n_H (k_{51} x(O) + k_{52} x(C) + k_{53} x(CO) + k_{54} x(N_2))\}$$

(ver Capítulo IV). Notando que t_{eq} es comparable a, o mayor que, las vidas típicas de estrellas OB y las edades de regiones HII compactas respectivamente, se concluye que en las nubes moleculares comunmente asociadas a regiones HII la química fuera de equilibrio es probablemente importante. Concentraciones de OH y H_2CO anormalmente bajas son predichas por el modelo propuesto para las partes frías y comprimidas de la cáscara (fig. 7b).

Ya que en nubes moleculares frías las concentraciones de equilibrio dependen de la densidad total (Herbst y Klemperer 1973; Iglesias 1977), y que la posible existencia de campos magnéticos podría causar densidades asintóticas menores que las correspondientes al caso de la fig. 7a., se calcularon, como guía para la composición química asintótica, las abundancias estacionarias correspondientes a una nube de densidad $n(H_2) = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ y temperatura $T = 30K$, mediante el sistema (V.2). Dichas abundancias se encuentran indicadas en el eje derecho de la figura 7b.

Resulta tentador especular acerca de una posible conexión entre la producción de grandes cantidades de vapor de

agua en ondas de choque que se propagan en nubes moleculares densas asociadas a regiones HII, y los célebres máseres interestelares de H_2O que con frecuencia se detectan en esas regiones (ej. Litvak 1972; Zuckerman 1977). El límite superior de la densidad proyectada de H_2O en máseres interestelares es del orden de 10^{20} cm^{-2} (Litvak 1972). En el modelo presente la densidad columnar de H_2O normal al frente de onda es

$$N(H_2O) = x(H_2O) 2n_0(H_2) v_0 t(H_2O)$$

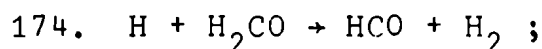
$$\sim 4 \times 10^{19} \left(\frac{n_0(H_2)}{10^4 \text{ cm}^{-3}} \right) \left(\frac{v_0}{10 \text{ km s}^{-1}} \right) \left(\frac{t(H_2O)}{10^6 \text{ años}} \right) \text{ cm}^{-2} \quad (V.7)$$

con $t(H_2O) < t_{eq}$. Para la interpretación de los máseres interestelares de agua se requieren además densidades $n(H_2) \lesssim 10^9 \text{ cm}^{-3}$ y temperaturas de pocos centenares de grados Kelvin (Litvak 1972). Con campos magnéticos relativamente bajos, como los predichos por Mouchovias (1976), las densidades necesarias se alcanzan cómodamente en regiones caracterizadas por densidades $n_0(H_2) \gtrsim 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Los valores relativamente altos de estas últimas implican magnitudes de $t(H_2O)$ comparables con las edades de regiones HII compactas (algunos miles de años, Habing 1974) asociados comúnmente con máseres interestelares. Finalmente, la energía necesaria para mantener los

máseres a las temperaturas requeridas, podría provenir de radiación UV ($\lambda > 912 \text{ \AA}$) proveniente de la región HII en expansión que propulsa las ondas de choque, como lo indican cálculos preliminares de la estructura térmica y química de regiones moleculares iluminados por fuentes UV intensas (Iglesias y Hollenbach 1978).

(iv). HCO (Formilo)

El radical formilo ha sido detectado recientemente en el espacio interestelar, con densidades columnares típicas $0.6 \times 10^{13} \lesssim N(\text{HCO}) \lesssim 11 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (Snyder, Hollis y Ulich 1976). El presente modelo produce cantidades considerables de formilo. Practicamente todo el formaldehído inicial se convierte en HCO a través de

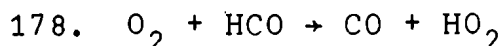


la escala de tiempo asociada es

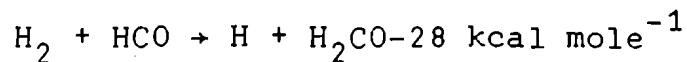
$t(\text{HCO}) \sim \{k_{174}n(\text{H})\}^{-1} \sim 5$ años. Reacciones con el caso oxígeno atómico,



constituyen el mayor sumidero de HCO. El proceso

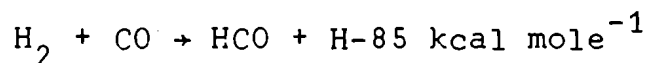


es ineficiente para destruir HCO. La reacción endotérmica



no es efectiva por debajo de 4000 K, como surge de la aproximación (IV.5).

Aparte del proceso (174), otras posibles fuentes de radicales formilo, como



($k_{\text{V.9}} = 7.5 \times 10^{-11} \exp(-20500/T) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, Vardanyan, Sachyan y Nalbandyan 1975; $k_{\text{V.10}} = 1.5 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, Herron y Huie 1973), son despreciables debido a los largos tiempos de reacción implícitos.

Usando los parámetros de la figura 7 ($n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, $\bar{x}(\text{HCO}) \sim 10^{-9}$) se obtienen densidades columnares de formilo

$$N(\text{HCO}) \sim 2n_0(\text{H}_2)\bar{x}(\text{HCO})v_0t_{\text{HCO}} \sim 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2},$$

donde $t_{\text{HCO}} \sim 500$ años es el tiempo Lagrangiano durante el cual $\bar{x}(\text{HCO})$ (la barra indica valor medio temporal) es comparable a $x_0(\text{H}_2\text{CO})$.

La densidad columnar predicha está aproximadamente un orden de magnitud por debajo del límite observacional inferior. Sin embargo, la inclusión de campos magnéticos finitos conduce a mayores densidades columnares de formilo. Esto se debe a que el tiempo de destrucción de HCO,

$$t_{\text{des}}(\text{HCO}) \sim \{(k_{135} + k_{136})n(0)\}^{-1}, \quad (\text{V.11})$$

que vale ~ 300 años para $N(\text{H}_2) \sim 1.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2}$ en las condiciones de la fig. 7, se ve substancialmente alargado al reducirse $n(0) = x(0)n_{\text{H}}$, en parte debido a la presión magnética, y en parte debido a las menores concentraciones de oxígeno atómico asociadas a tiempos de enfriamiento mas largos.

Se estiman a continuación los efectos, relevantes para la síntesis de HCO, derivados de la introducción de campos magnéticos finitos. Para valores razonables del campo magnético interestelar ($B_0 \lesssim 100 \mu$ gauss para $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$, Mouchovías 1976), la presión magnética en la inmediata vecindad de la parte posterior del frente de onda es despreciable frente a la presión dinámica ($B_0^2 / 8\pi \ll \rho_0 v_0^2$) y esta última es aproximadamente igual a la presión total, y comparable a $\rho_0 v_0^2$ (ver expresión (II. 11)). Al aumentar la compresión crece rápidamente la presión magnética $B^2 / 8\pi$, alcanzando el valor $\rho_0 v_0^2$ en el punto

$$y_{\text{crit}} = (\epsilon \pi \rho_0)^{1/2} (v_0/B_0) \approx 10 \left(\frac{v_0}{10 \text{ km s}^{-1}} \right) \left(\frac{B_0}{100 \text{ } \mu\text{gauss}} \right)^{-1} \quad (\text{v.12})$$

De allí en adelante se puede considerar que cesa prácticamente la compresión, y el gas se enfría isocóricamente. La escala de tiempo de enfriamiento

$$t_{\text{enf}} \propto n(\text{H}_2)kT/\Lambda$$

es sensible a la densidad total y aumenta con respecto al caso $B_0=0$. Este efecto es más pronunciado a bajas temperaturas: un campo de 100 μgauss aumenta el tiempo de enfriamiento por un factor ~ 2 a 900K, y por un factor ~ 16 a 130K. Las mayores temperaturas resultantes para un tiempo lagrangiano dado aumentan la tasa de destrucción del oxígeno atómico a través del incremento exponencial de k_{152} , que sobrecompensa la disminución de n_{H} ; las mayores tasas de destrucción, vigentes por tiempos más largos, implican valores de $x(0)$ deprimidos con respecto al caso $B_0=0$. Tomando el valor de $x(0)$ correspondiente a este último caso, se puede estimar una cota inferior para la densidad columnar de formilo en ondas de choque hidromagnéticas. De este modo se obtiene, para $B_0=100\mu$ gauss,

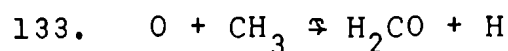
$$N(\text{HCO}) \gtrsim 10^{13} \text{ cm}^{-2},$$

dentro del rango observado.

Este esquema provee una interpretación cuantitativa de la detección de HCO unicamente en las direcciones de nubes moleculares de densidades moderadas ($n(\text{H}_2) \lesssim 10^4 \text{ cm}^{-3}$) asociadas a regiones HII. La notoria correlación entre las velocidades radiales de HCO y C^+ (Snyder, Hollis y Ulich 1976) provee evidencia de dicha asociación. El modelo propuesto predice la presencia de radicales formilo tanto fríos como moderadamente calientes; observaciones infrarrojas de HCO excitado rotacionalmente o vibracionalmente constituirían un posible test.

(v). Otras Moléculas

Después de ser destruído en la porción caliente del gas por el proceso (174), la reacción

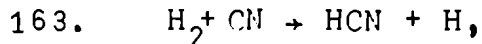


regenera formaldehído en cantidades comparables a $x(\text{CH}_3) \sim 8 \times 10^{-11}$ (Fig 7b), en la región fría. La escala de tiempo correspondiente es

$$t_f (\text{H}_2\text{CO}) \sim \{k_{133} n(\text{O})\}^{-1} \sim 10^3 \text{ años}$$

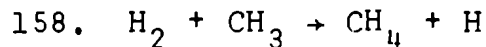
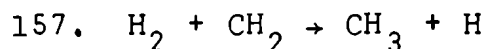
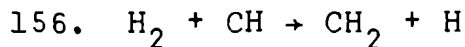
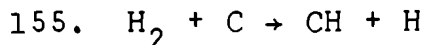
(en $t \sim 500$ años). Como se discutió más arriba, la presencia de campos magnéticos de intensidad razonable puede disminuir sensiblemente la densidad asintótica del oxígeno atómico. Por lo tanto, se predicen densidades columnares de formaldeído relativamente pequeñas, para frentes de onda coplanares con campos magnéticos de $\sim 100 \mu$ gauss..

El modelo predice densidades columnares de CN extremadamente bajas, debido a su destrucción en la región de alta temperatura por reacciones con hidrógeno molecular



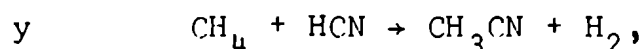
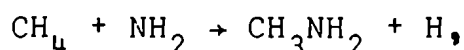
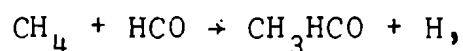
y el hecho de que $x(\text{CN})$ correlaciona inversamente con $n(\text{H}_2)$ en regiones frías (Iglesias 1977).

La secuencia de reacciones



produce cantidades de metano comparables a las observadas para otras moléculas interestelares (ej. H_2CO , HCO , Fig7b). Fox y Jennings (1978) anunciaron recientemente la probable detección de CH_4 en dirección a la nube molecular de Orión. Desafortunadamente dichas observaciones son inconcluyentes

en cuanto a las densidades columnares involucradas, y no pueden compararse con las predicciones del presente modelo. Las concentraciones relativamente altas obtenidas para el metano abren interesantes posibilidades, que no se han perseguido en este trabajo, para la síntesis de especies orgánicas complejas observadas (ej. acetaldeído CH_3HCO , metilamina CH_3NH_2 , acetonitrilo CH_3CN y otros compuestos metílicos) vía reacciones bimoleculares tales como



en la región comprimida. Sin embargo, estas posibilidades se restringen probablemente a reacciones exotérmicas con energías de activación despreciables debido a los largos tiempos de reacción implícitos.

Las bajas abundancias de HCO^+ , HN_2^+ y otros iones, predichos para la región comprimida, se deben a la anticorrelación de estas cantidades con la densidad total (Iglesias 1977).

(vi). Condensación

El proceso de condensación molecular sobre granos in-

telestelares, caracterizado por la incertidumbre de los parámetros físicos relevantes, fue discutido por varios autores (ej. Watson y Salpeter 1972; Watson 1974, 1977; Miller y Williams 1975; Iglesias 1977). Es por lo tanto de algún interés discutir posibles modificaciones de los resultados presentados debidas a condensación. Asumiendo adherencia completa e inexistencia de mecanismos eficientes de eyección, la escala de tiempo para condensación de moléculas de CO, de velocidad térmica $\langle v_{CO} \rangle$, es

$$t_{\text{cond}}(\text{CO}) \sim \{ \langle \sigma_{\text{polvo}} \rangle n_{\text{polvo}} \langle v_{\text{CO}} \rangle \}^{-1} \approx 3 \times 10^5 \left(\frac{n_0}{n} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \text{ años}$$

Por inspección de la figura 7 es notorio que la condensación solo podría llegar a tener importancia en la zona en que el gas perturbado se encuentra a temperaturas inferiores a 50K. Luego, aunque el proceso de condensación podría afectar tanto las concentraciones iniciales (Iglesias 1977) como el restablecimiento del equilibrio químico, no modifica la química de la región de enfriamiento.

Los resultados discutidos en los puntos (i) - (vi) indican que observaciones moleculares de alta resolución espacial proveerán en el futuro importantes diagnósticos de la presencia de ondas de choque en nubes interestelares densas.

CAPITULO VI

RESUMEN

Diversos argumentos observacionales y teóricos señalan la posible existencia de ondas de choque en nubes moleculares. Colisiones nube-nube, expansión de regiones HII, vientos estelares y colapso gravitatorio proveen, entre otros, posibles mecanismos generadores para dicho fenómeno. Las velocidades de propagación de las ondas de choque asociadas a los mecanismos mencionados son, típicamente, comparables a 10 km s^{-1} . Consecuentemente se puede despreciar la inyección de nuevas especies en la fase gaseosa por disrupción y descascarado de las partículas de polvo cósmico, y la disociación colisional de H_2 y de la mayor parte de las restantes moléculas de interés astrofísico.

Usando las ecuaciones de continuidad y de conservación de impulso y energía correspondientes al estado estacionario, se investigaron numéricamente las variables hidrodinámicas asociadas a una onda de choque unidimensional que se propaga con velocidad $v_0 = 10 \text{ km s}^{-1}$ en una nube molecular de densidad $n_0(\text{H}_2) = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y temperatura $T_0 = 30 \text{ K}$.

Se investigaron los mecanismos de enfriamiento concluyéndose que éste se lleva a cabo principalmente por emisión de radiación molecular proveniente de H_2 excitado vibracional y rotacionalmente ($T \gtrsim 500 \text{ K}$), y de transiciones entre

niveles rotacionales del estado vibrónico fundamental de CO ($T < 500$ K).

Para estudiar la química fuera de equilibrio que tiene lugar corriente abajo del frente de onda, se desarrolló un esquema que contiene aproximadamente doscientas reacciones, con las que se obtuvieron las ecuaciones cinéticas diferenciales correspondientes a 64 especies de interés, que fueron integradas simultáneamente con las ecuaciones hidrodinámicas. Asumiendo balance químico detallado, de acuerdo a lo indicado por investigaciones anteriores para densidades $n_0(\text{H}_2) \lesssim 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, se computaron las concentraciones iniciales. Similarmente se calcularon las concentraciones de equilibrio correspondientes a $n(\text{H}_2) = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ como guía para las abundancias asintóticas. Procesos que poseen energías de activación (algunos de ellos endotérmicos) dominan la evolución química en la región de altas temperaturas, en tanto que rápidas reacciones ion-molécula reestablecen el balance químico detallado en la región mas densa y fría.

Se puede agrupar las conclusiones mas importantes como sigue: (a) el tiempo de enfriamiento hasta 30 K es de aproximadamente 500 años.

(b) las concentraciones de varias moléculas particularmente estables (CO, N_2 , NH_3 , HCN y CO_2) no son modificadas por el pasaje de la onda de choque. Los principales reservorios de carbono (CO) y nitrógeno (N_2) permanecen por lo tanto inalterados. Para densidades ambientales

$n_0(\text{H}_2) \approx 5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ y ondas de choque caracterizados por $v_0 < 15 \text{ km s}^{-1}$, determinaciones observacionales en el infrarrojo del cociente $n(\text{CO})/2n(\text{H}_2)$ proveerán eventualmente una medida directa (actualmente inexistente) de la abundancia gaseosa del carbono $\{\text{C}\} / \{\text{H}\}$, en nubes moleculares densas asociadas con regiones HII.

(c) a diferencia de lo que ocurre con carbono y nitrógeno, el exceso de oxígeno sobre carbono, que en nubes frías se encuentra mayormente en forma atómica y molecular, es transformado por el pasaje de la onda de choque en vapor de agua, que pasa a constituir, junto a CO, una de las dos moléculas más abundantes después de H_2 , en una escala de tiempo muy corta comparada con el tiempo de enfriamiento hasta 30 K. Este resultado es insensible a variaciones de la densidad y composición química inicial, y a variaciones de v_0 en el rango $\sim 9\text{-}15 \text{ km s}^{-1}$. La formación de importantes cantidades de vapor de agua en ondas de choque propulsadas por la expansión de regiones HII compactas podría estar vinculada a la frecuente asociación de máseres de H_2O con dichas regiones.

(d) En las ondas de choque estudiadas se sintetizan cantidades importantes de radicales formilo, recientemente detectados en el medio interestelar. El modelo provee una interpretación cuantitativa de dichas observaciones.

(e) El modelo produce cantidades de metano ($x(\text{CH}_4) \sim 4 \times 10^{-9}$) comparables a las observadas para otras moléculas

interestelares. La reciente detección de metano interestelar es inconcluyente en cuanto a las densidades columnares involucradas, y no puede por lo tanto compararse con el resultado mencionado.

(f) Las concentraciones de algunas especies relativamente abundantes en nubes moleculares (H_2CO , CN , HCO^+ y HN_2^+) disminuyen considerablemente por efecto de la onda de choque.

(g) La escala de tiempo correspondiente al reestablecimiento del equilibrio químico detallado es del orden de 10^6 años, independientemente de la densidad, lo que indica la probable importancia de procesos químicos fuera de equilibrio en las inmediaciones de las fronteras entre regiones HII y las nubes moleculares comunmente asociadas a dichas zonas.

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar deseo agradecer al Profesor Joseph I. Silk, mi Director de Tesis, su generosidad al invitarme a colaborar con su grupo en el Departamento de Astronomía de la Universidad de California, Berkeley, donde adquirí la mayor parte de los conocimientos astronómicos que poseo y donde llevé a cabo la mayor parte de este trabajo de investigación. Al constante aliento, paciencia y valiosas sugerencias del Dr. Silk debe acreditarse en gran medida la realización del presente estudio. Con el Dr. David Hollenbach compartí largas horas de trabajo y estimulantes discusiones. A él y al Dr. Michael Shull, que con inusual desprendimiento compartieron conmigo sus resultados inéditos, debo una importante mejora de la función de enfriamiento a altas temperaturas. También deseo mencionar valiosas sugerencias de los Profesores Christopher McKee y Carl Heiles; el Profesor Charles Townes en diversas oportunidades me facilitó preprints y evacuó mis consultas.

La Fundación Eulbright me concedió una beca de viaje que me permitió visitar el Departamento de Astronomía de Berkeley por segunda vez, ocasión en que llevé a cabo los cálculos finales para este estudio. Agradezco la hospitalidad que se me brindó en esa oportunidad.

El manuscrito fue tipeado y corregido en su mayor parte, con gran paciencia y responsabilidad, por María Cristina Toucedo, a quien agradezco también su calidad humana. Mi esposa, Susana Chiesa, colaboró con el tipeado a pesar de su escaso tiempo disponible. Las figuras fueron realizadas por Mr. Ronald Toy (Berkeley) y por el Sr. Miguel Mascialino (IAFE) a quien agradezco su prolijidad y rapidez.

De mi esposa aprecio la comprensión y el aliento a lo largo de los últimos años, pero sobre todo, su cariño. A mis hijas Carolina y María Candela les pido disculpas por las, tal vez demasiado numerosas, oportunidades en que no estuve disponible para ellas "porque papá tiene que trabajar".

Esta investigación fue financiada en parte por N.A.S.A. mediante el grant NGR 05-003-578.

REFERENCIAS

- Aannestad, P. A. 1973, Ap. J. (Supplements), 25, 223.
- Allen, C. W. 1973, Astrophysical Quantities, 3rd. edition
(London: The Athlone Press).
- Allison, S. K. y Warshaw, S.D., 1953, Rev. Mod. Phys. 25, 779
- Anderson, L. G. 1976, Rev. Geophys. Sp. Phys., 14, 151
- Bahcall, J. M. y Wolf, R. A., 1968, Ap. J. 152, 70
- Barsuhn, J. y Walmsley, C.M. 1977, Astr. Ap., 54, 345
- Bates, D. R., y Dalgarno, A. 1962, "Atomic and Molecular Processes", ed. D. R. Bates (New York, Academic Press)
- Baulch, D. L., Drysdale, D.D., Horne, D. G., y Lloyd, A. C. 1972, Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions, vol. 1, Homogeneous Gas Phase Reactions of the H₂-O₂ System, (London: Butterworths).
- Baulch, D. L., Drysdale, D. D., y Horne, D.G. 1973, en NBS Technical Note 866, ed. R. F. Hampson, y D. Garvin (Washington: NBS).
- Becklin, E. E., Beckwith, S., Gatley, I., Matthews, K., Neugebauer, G., Zarazin, C., y Werner, M. W. 1976, Ap. J., 207, 770.
- Beckwith, S., Becklin, E. E., Neugebauer, G., y Persson, S. E. 1977, Bull. A.A.S., 8, 564.
- Black, J. H., 1977, comunicación privada.
- Black, J. H., Dalgarno, A., y Oppenheimer, M. 1975, Ap. J., 199, 633.
- Black, J. H. y Dalgarno, A., 1973, Ap. Letters, 15, 79
- Boden, J. C. y Trush, B. A., 1968, Proc. Roy Soc. London A 305, 107.
- Bowers, M. T., y Elleman, D. D. 1972, Chem. Phys., 16, 486.

- Breshears, W. D., y Bird, P. F. 1973, Symp. (Int) Combustion, 14, 211
- Brown, R. L., Gammon, R. H., Knapp, G.R., y Balick, B. 1974, Ap. J., 192, 607.
- Brown, K. M., 1969, SIAM J. Num. An., 6, 560.
- Burke, J., y Hollenbach, R. J. 1978, en preparación.
- Cameron, A. G. W., 1968 en "Origin and Distribution of the Elements", ed. L. H. Ahrens, Pergamon Press, New York, p. 125.
- Crutcher, R. M. y Watson, W. D., 1976, Ap. J. 209, 778.
- Chu, S. I. y Dalgarno, A., 1975, J. Chem. Phys., 62, 4009.
- Dalgarno, A., y Mc Cray, R.A. 1972, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 10, 375.
- Dalgarno, A., Oppenheimer, M. y Black, J. H., 1973, Nature Phys. Sci. 245, 100.
- Dean, A. M., y Kistiakowsky, G. B. 1971, J. Chem. Phys., 54, 1718.
- de Jong, T., Chu, S. I., y Dalgarno, A. 1975, Ap. J., 199, 69.
- de Jong, T., y Maeder, A. 1976, I.A.U. Symposium N°75, "Star Formation"
- Demerjian, K. L., Kerr, J. A., y Calvert, J.G. 1974, Adv. Environ. Sci. and Technology, 4, 1.
- Farragher, A. L., Peden, J. A., y Fite, W. L. 1969, J. Chem. Phys., 50, 287.
- Fazio, G. G., Kleinmann, D. E., Noyes, R. W., Wright, E. L., Zeilik, M., y Low, F. J. 1974, Ap. J. (Letters), 192, L 23.

- Fehsenfeld, F. 1976, Ap. J., 209 , 638.
- Fehsenfeld, F., Lidinger, W., Schmeltekopf, A., Albritton, D.,
y Ferguson, E. 1975, J. Chem. Phys., 62, 2001.
- Field, G. B., Rather, J. D. G., Aannestad, P. A., y Orszag,
S. A. 1968, Ap. J., 151, 953.
- Field, G., 1974, Ap. J. 187, 453.
- Field, G. B. y Steigman, G. 1971, Ap. J., 166, 59
- Fox, K. y Jennings, D. E. 1978, Bull. A.P.S., 23, 318.
- Gautier, T. N., Fink, U., Treffers, R. P., y Larson, H. P.
1976, Ap. J., 207 , L 129.
- Gear, C. W., 1971, Comm. A.C.M., 14, 176.
- Gehring, J., Hoyerman, K., Schacke, H. y Wolfrum, J. 1973,
14th Symposium (International) on Combustion, p.99
(Combustion Institute, Pittsburgh)
- Glassgold, A. E., y Langer, W. D. 1974, Ap. J., 193, 73.
- Goldreich, P., y Kwan, J. 1974, Ap. J., 189, 441.
- Goldsmith, P. F. 1972, Ap. J. 176, 597.
- Guelin, M., Langer, W. D., Snell, R. L. y Wootten, H. A.,
1977, Ap. J. (Letters) 217, L 165.
- Habing, H. J. 1974, "HII regions and the Galactic Centre", in
Proceedings of Eight Eslab Symposium, 4-7 June
1974, Frascati, Italia, p. 127, ed. A.F.M. Moorwood.
- Hampson, R. F., y Garvin, D. 1975, NBS Technical Note, 866,
Washington: NBS
- Hampson, R. F. 1973, J. Phys. Chem. Ref. Data, 2, 267.
- Heiles, C., 1971, Ann. Rev. Astr. and Ap. 9 , 293.
- Herbst, E. y Klemperer, W. 1973, Ap. J., 185, 505.
- Herbst, E., Schubert, J. G. y Certain, P. R., 1977, Ap. J.
213, 696.
- Herbst, E., Bohme, D. K., Payzant, J., y Schiff, H., 1975
Ap. J., 201, 603.

- Herzberg, G., 1950 "Molecular Spectra and Molecular Structure",
Van Nostrand, New York.
- Herron, J. T., y Huie, R. E. 1973, J. Phys. Chem. Ref. Data,
2, 467.
- Hill, J. 1975
- Hollenbach, D. J., y Shull, J. M. 1977, Ap. J., 216, 419.
- Hollenbach, D. J., Iglesias, E. R., Mc Kee, C. 1977, en
preparación.
- Hollenbach, D. J., 1978, comunicación privada.
- Hollenbach, D. J. y Salpeter, E. E., 1971, Ap. J. 163, 155.
- Hollenbach, D. J., Werner, M. W. y Salpeter, E. E. 1971, Ap.
J. 163, 165.
- Huntress, W. T. y Anicich, V. G., 1976, Ap. J. 208, 237.
- Huntress, W. T., 1977, Ap. J. Supplements 33, 495.
- Huntress, W., Kim, J. y Theard, L. 1974, Chem. Phys. Letters
29, 189.
- Iglesias, E. R., y Hollenbach, D. J. 1978, en preparación.
- Iglesias, E. R., 1977, Ap. J., 218, 697.
- Joyce, R., y Grasdalen, G. 1978, Bull. A.A.S., 8, 349.
- Jura, M. 1975 a, Ap. J., 197, 575.
- Jura, M. 1975 b, Ap. J., 197, 581.
- Kaufman, F. 1969, Ann. Rev. Phys. Chem., 20, 45.
- Kim, J., Theard, L. y Huntress, W. 1975, J. Chem. Phys., 62, 45
- Knacke, R. F., Cudaback, D. D., y Gaustad, J. E. 1969, Ap. J.,
158, 151.
- Knapp, G. R. y Jura, M., 1976, Ap. J. 209, 782.
- Kwan, J. 1977, Ap. J., 216, 713.
- Lada, C. J., Gull. T. R., Gottlieb, C.A., y Gottlieb, E. W.
1976, Ap. J., 203, 159

- Langer, W. D. 1976, Ap. J., 206, 699.
- Laudenslager, J., Huntress, W. y Bowers, M. 1974, J. Chem. Phys. 61, 4600.
- Leu, M. T., Biondi, M. A., y Johsen, R. 1973 a, Phys. Rev., A7, 292.
- Leu, M. T., Biondi, M. A., y Johsen, R. 1973 b, Phys. Rev., A8, 413.
- Liskow, D. H., Bender, C. F. y Schaefer, H. F., 1974, J. Chem. Phys. 61, 2507.
- Liszt, H. S., Wilson, R. W., Penzias, A.A., Jefferts, K. B., Wannier, P. G. y Solomon, P. M. 1974, Ap. J., 190, 557.
- Litvak, M. M. 1972, in "Atoms and Molecules in Astrophysics", ed. T. R. Carson y M. J. Roberts, Academic Press (London) p. 201
- London, R., Mc Cray, R., y Chu, S.I. 1977, Ap. J., 217, 442.
- Mahan, B. H. y Sloane, T. M., 1973, J. Chem. Phys. 59, 5661.
- Matsakis, D. N., Brandshaft, D., Chui, M. F., Cheung, A. C., Yngvesson, K. S., Cardiasmenos, A. G., Shanley, J. F. y Ho, P. T. P., 1977, Ap. J. (Letters), 214, L 67.
- Mc Daniel, E. W., Cermak, V., Dalgarno, A., Ferguson, E.E., y Friedman, L. 1970, Ion-Molecule Reactions (New York: Interscience)
- Merril, K.M., Russell, R. W., y Soifer, B. T. 1976 Ap. J., 207 , 763.

- Millar, T. J. y Williams, D. A., 1975, M.N.R.A.S., 173, 527.
- Morris, E. D., y Niki, H. 1971, J. Chem. Phys., 55, 1991.
- Morton, D. 1974, Ap. J. (Letters), 193, L 35
- Mouschovias, T. Ch. 1976, Ap. J., 207, 141.
- Oppenheimer, M., y Dalgarno, A. 1974, Ap. J., 192, 29.
- Pagel, B. E. J., 1973 en "Cosmochemistry", ed. A. G. W. Cameron, Reidel, Dordrecht, p. 1.
- Peeters, J., y Mahnen, G. 1973, Symp. Comb. 14th, p. 133
(Pittsburgh: Combustion Institute)
- Salpeter, E. E., 1977, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 15, 267.
- Scoville, N. Z., y Solomon, P. M. 1974, Ap. J.(Letters), 187,
L 67.
- Schiff, H. I., Hemsworth, R. S., Payzant, J. D. y Bohme, D. K.
1974, Ap. J., 191, L-49.
- Shull, J. M., y Hollenbach, D. J. 1978 Ap. J., en prensa.
- Slack, M. W. 1976, J. Chem. Phys., 64, 228.
- Smith, I. W. M., y Zellner, R. 1974, in NBS Technical Note
866, ed. R.F. Hampson, y D. Garvin (Washington:NBS)
- Snyder, L. E., Hollis, J. M., y Ulich, B. L. 1976, Ap. J.
(Letters), 208, L 91.
- Snyder, L. E., Watson, W. D. y Hollis, J. M., 1977, Ap. J.
212, 79.
- Solomon, P. M. y Woolf, N., 1973, Ap. J. (Letters), 180, L 89.
- Solomon, P. M. y Werner, M. N. , 1971 Ap. J., 165, 41.
- Solomon, P. M., 1973, Phys. Today 26, 3, 32.

- Spitzer, L. 1968, Diffuse Matter in Space (New York: Interscience)
- Spitzer, L. y Jenkins, E. B. 1975, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 13, 133.
- Stecher, T. P. y Williams, D. A., 1967, Ap. J. (Letters) 149, L 29.
- Tinsley, B. M., 1977 en "CNO Isotopes in Astrophysics", ed. J. Audouze, Reidel, Dordrecht, p. 175.
- Thaddeus, P., 1977 en "Star Formation", ed. T. de Jong y A. Maeder, Reider, Dordrecht, p. 37.
- Thompson, R. I., 1973, Ap. J. 181, 1039
- Troe, J., y Wagner, H. G. 1972, Ann. Rev. Phys. Chem., 23, 311.
- Troland, T. H., y Heiles, C. 1977 Ap. J., 214, 703.
- Tsuji, T. 1964, Ann. Tokyo A. Obs., 9, 1.
- Tsuji, T., 1973, Astr. Ap., 23, 411.
- Unsold, A., 1969 Science 163, 1015.
- Vardanyan, I. A., Sachyan, G.A., y Nalbandyan, A.B. 1975, Int. J. Chem. Kinet. 7, 23.
- Washida, N., Martinez, R. I., y Bayes, K. D. 1973, in NBS Technical Note 866, ed. R.F. Hampson, y D. Garvin (Washington: NBS)
- Watson, W. D. y Salpeter, E. E. 1972, Ap. J. 174, 321.
- Watson, W. D., 1977, Twenty- First Liege International Astrophysical Symposium; Liege.
- Watson, W. D., 1974, Ap. J. 188, 35

- Wentzel, D. C., 1967, Ap. J., 150, 453
- Werner, M. W., Gatley, I., Harper, D. A., Becklin, E. E.,
Loewenstein, R., Telesco, C., y Thronson, H. 1976
Ap. J., 204, 420.
- Westenberg, A. A., y de Haas, N. 1972, J. Chem. Phys., 76,
2215.
- Whitney, C. A. y Skalafuris, A. J., 1963, Ap. J., 138, 200
- Wilson, W. E. 1972, J. Phys. Chem. Ref. Data, 1, 535.
- York, D. G. 1975, Ap. J. (Letters), 196, L 103.
- Zuckerman, B., y Palmer, P. 1974, Ann. Rev. Astron. Ap. 12 279.
- Zuckerman, B. 1977, Nature, 268, 491.

2
Diario de campo

J. I. Sieb

MAPLA 1

Propiedades típicas de nubes galácticas *

Propiedad	Mubes difusas	Nebulosas Oscuras	Nubes moleculares compactas	Envoladuras protoestelares y circumestelares
$n(H)+n(F_2)$ (cm^{-3})	10	10^3-10^4	10^4-10^7	10^5-10^{11}
L^\dagger (pc)	10	1	0.5-10	$10^{-5}-10^{-2}$
T_{cinet} ($^{\circ}K$)	70	8-15	20-100	10-1000
$\frac{n(e)}{n(H)+n(F_2)}$	$\approx 4 \times 10^{-3}$	$10^{-9}-10^{-7}$	$\approx 10^{-7}$	-
A_v # (magnitudes)	0.1	1-10	> 30	> 10
Δv^\S (kms $^{-1}$)	~ 1	≈ 1	4-15	~ 8
M/M_\odot^{**}	300	10^2-10^3	10^3-10^6	$10^{-2}-10^2$

* Fuentes: Zuckerman y Palmer (1974); Thaddeus (1977).

† L es el diámetro de la nube.

Una magnitud de extinción equivale a una densidad columnar de 10^{21} moléculas de hidrógeno por cm^2 aproximadamente.

§ Δv es el ancho de línea a altura mitad.

** $M_\odot = 1.99 \times 10^{33}$ g es una masa solar.

TABLA 2
Moléculas Interestelares*

Número de Átomos	Detectadas†		Aún sin detectar	
	Inorgánicas	Orgánicas	Inorgánicas	Orgánicas
2	H ₂	OH	O ₂	C ₂
	OH	OH ⁺	N ₂	
	SiO	CN	NO	
	SiS	CO	NH	
	NS	CS		
	SO			
3	H ₂ O	C ₂ H	NH ₂	CH ₂
	SH ₂	HCN	N ₂ O	CO ₂
	SO ₂	HNC	NO ₂	
	N ₂ H ⁺	HCO ⁺		
		HCO		
	OCS			
4	NH ₃	H ₂ CO		C ₂ H ₂
		HNCO		CH ₃
		H ₂ CS		
5		CH ₄ §		
		H ₂ CNH		
		H ₂ NCH		
		HCOCH		
		HC ₃ H		
6		CH ₃ OH		C ₂ H ₄
		CH ₃ CN		
		HCONH ₂		

TABLA 2
Moléculas Interestelares*

Número de Átomos	Detectadas [†]		Aún sin detectar	
	Inorgánicas	Orgánicas	Inorgánicas	Orgánicas
7		CH ₃ NH ₂		
		CH ₃ C ₂ H		
		HCOCH ₃		
		H ₂ CCHCN		
		HC ₅ N		
8		HCOOCH ₃		C ₂ H ₆
9		CH ₃ OCH ₃		
		CH ₃ CH ₂ OH		
		HC ₇ N		
11		HC ₉ N [#]		

* Fuente: Townes (1977) y referencias indicadas.

† No se incluyen las numerosas variedades isotópicas observadas (ver por ejemplo Audouze, 1977).

§ Fox y Jennings (1978).

Broten y colaboradores (1978).

TABLA 3
Energías de Disociación, Potenciales de Ionización,
y Diámetros[†] de algunas moléculas de interés astrofísico*.

Molécula	D (eV)	P.I. (eV)	d (Å)
H ₂	4.48	15.4	0.74
C ₂	6.2	12.0	1.3
CH	3.47	10.6	1.12
CH ⁺	3.8	--	1.13
CO	11.1	14.1	1.13
CO ⁺	8.3	27.9	1.12
CN	7.8	14.0	1.17
N ₂	9.76	15.6	1.09
N ₂ ⁺	8.72	--	1.12
NH	3.76	13.1	1.04
NO	6.5	9.3	1.15
O ₂	5.16	12.1	1.21
OH	4.39	13.4	0.97
SiH	3.2	8.5	1.52
SiO	7.8	10.5	1.51
H ₂ O	5.11	12.6	3.5
CO ₂	5.45	13.8	3.8
NH ₃	4.3	10.15	3.0
CH ₄	4.4	13.0	3.5
HCN	5.6	13.9	--

* Fuente: Allen 1973

† Distancia intermolecular para moléculas diatómicas.

TABLA 4

Transiciones Rotacionales de la Molécula de H₂ en su Estado Vibrónico Fundamental*

Transición	E _J /k (°K)	λ _{J+2→J} (μ)	A _{J+2→J} (s ⁻¹)
2→0	510	28.2174	2.9 x 10 ⁻¹¹
3→1	1015	17.0345	4.6 x 10 ⁻¹⁰
4→2	1682	12.2788	2.6 x 10 ⁻⁹
5→3	2504	9.6651	9.3 x 10 ⁻⁹
6→4	3475	8.0246	2.4 x 10 ⁻⁸
7→5	4587	6.9074	5.3 x 10 ⁻⁸
8→6	5832	6.1033	1.0 x 10 ⁻⁷
9→7	7203	5.5005	1.7 x 10 ⁻⁷
10→8	8690	5.0337	2.7 x 10 ⁻⁷
11→9	10,289	4.6617	4.0 x 10 ⁻⁷
12→10	11,993	4.3571	5.6 x 10 ⁻⁷
13→11	13,798	4.1004	7.7 x 10 ⁻⁷
14→12	15,704	3.8767	1.0 x 10 ⁻⁶
15→13	17,713	3.6746	1.4 x 10 ⁻⁶

* Fuente: Aannestad (1973)

TABLA 5

Transiciones Vibracionales-Rotacionales de la Molécula de H₂ entre v=0 y v=1

Transición	J+J'	$\lambda_{vJ,v'J'}$ (μ)	$A_{vJ \rightarrow v'J'}$ (s ⁻¹)
Q(3)	3 3	2.42373	2.29 x 10 ⁻⁷
Q(2)	2 2	2.41343	2.66 x 10 ⁻⁷
Q(1)	1 1	2.40658	3.32 x 10 ⁻⁷
S(0)	2 0	2.22328	2.47 x 10 ⁻⁷
S(1)	3 1	2.12183	3.66 x 10 ⁻⁷
S(2)	4 2	2.03375	4.48 x 10 ⁻⁷
S(3)	5 3	1.95755	4.27 x 10 ⁻⁷

Fuente: Gautier y colaboradores (1976)

TABLA 6
Niveles Rotacionales del Estado Vibrónico Fundamental de CO*

J	E_J/k (K)	$\lambda_{J,J-1}$ (cm)
1	5.53	0.26
2	16.6	0.13
3	33.2	8.67×10^{-2}
4	55.3	6.50×10^{-2}
5	83.0	5.20×10^{-2}
6	116.2	4.33×10^{-2}
7	154.9	3.72×10^{-2}
8	199.1	3.25×10^{-2}
9	249.0	2.89×10^{-2}
10	304.3	2.60×10^{-2}
11	365.1	2.36×10^{-2}
12	431.5	2.17×10^{-2}
13	503.4	2.00×10^{-2}
14	580.9	1.86×10^{-2}
15	663.9	1.73×10^{-2}
16	752.4	1.63×10^{-2}

* Calculados mediante $E_J = hcB_V J(J+1)$, $B_V = B_e - \alpha_e/2 = 1.92256 \text{ cm}^{-1}$

TABLA 7

Transiciones de Estructura Fina en Especies Atómicas Abundantes

Especie	Transición	λ (μ)	Excitación ($^{\circ}$ K)	$A(J \rightarrow J-1)$
O	$^3P_0 \rightarrow ^3P_1$	147	326	1.7×10^{-5}
	$^3P_1 \rightarrow ^3P_2$	63	228	8.9×10^{-5}
C	$^3P_0 \rightarrow ^3P_1$	369	63	2.7×10^{-7}
	$^3P_1 \rightarrow ^3P_2$	610	24	7.9×10^{-8}
C ⁺	$^2P_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$	156	92	2.4×10^{-6}
Si ⁺	$^2P_{3/2} \rightarrow ^2P_{1/2}$	35	413	2.1×10^{-5}

Fuente: Bahcall y Wolf (1968)

TABLA 8

Abundancias Elementales

	Medio Interestelar* (Fase Gaseosa)	Standard† (Gas + Polvo)
H	1	1
He	0.1	8.5×10^{-2}
O	1.8×10^{-4}	4.4×10^{-4}
C	7.3×10^{-5}	3.8×10^{-4}
N	2.1×10^{-5}	8.7×10^{-5}
Mg	1.0×10^{-6}	2.6×10^{-5}
Si	9.0×10^{-7}	3.3×10^{-5}
Fe	2.7×10^{-7}	4.0×10^{-5}
Na	2.2×10^{-7}	1.9×10^{-6}
Mn	1.5×10^{-8}	2.5×10^{-7}
Ca	4.7×10^{-10}	2.0×10^{-6}

* Fuente: Morton (1974)

† Fuente: Allen (1973)

TABLA 9
 IONIZACION PRIMARIA

Reacción	$k(s^{-1})$
1. $H_2 + r.c. \rightarrow H_2^+ + e + r.c.$	$0.95 \tau (1)$
2. $H + H^+ + e \rightarrow r.c.$	$0.05 \tau (1)$
3. $He + r.c. \rightarrow He^+ + e + r.c.$	(1)

TABLA 10
REACCIONES ION-MOLECULA

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
4. $\text{H}_2 + \text{H}_2^+ \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$	2.1 ⁽²⁹⁾	
5. $\text{H}_2 + \text{CO}^+ \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	1.39 ⁽²⁾	
6. $\text{H}_2 + \text{N}_2^+ \rightarrow \text{HN}_2^+ + \text{H}$	1.73 ⁽²⁾	
7. $\text{H}_2 + \text{He}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{H} + \text{He}$	$1.6 \times 10^{-4} \exp(-160/T)$ ⁽²⁵⁾	
8. $\text{H}_2 + \text{O}^+ \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$	1.58 ⁽²⁾	
9. $\text{H}_2 + \text{OH}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}$	1.05 ⁽²⁾	
10. $\text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}^+ \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}$	0.61 ⁽²⁾	
11. $\text{H}_2 + \text{N}^+ \rightarrow \text{NH}^+ + \text{H}$	0.48 ⁽²⁾	
12. $\text{H}_2 + \text{NH}^+ \rightarrow \text{NH}_2^+ + \text{H}$	0.95 ⁽²⁾	
13. $\text{H}_2 + \text{NH}_2^+ \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}$	0.12 ⁽²⁾	
14. $\text{H}_2 + \text{NH}_3^+ \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}$	5×10^{-6}	
15. $\text{H}_2 + \text{CH}^+ \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}$	1.01 ⁽²⁾	
16. $\text{H}_2 + \text{CH}_2^+ \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{H}$	0.72 ⁽²⁾	
17. $\text{H}_2 + \text{CH}_3^+ \rightarrow \text{CH}_4^+ + \text{H}$		Endotérmica
18. $\text{H}_2 + \text{CN}^+ \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{H}$	1.24 ⁽²⁹⁾	
19. $\text{H}_2 + \text{HCN}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}$	0.9 ⁽²⁹⁾	
20. $\text{H}_2 + \text{CNO}^+ \rightarrow \text{HNCO}^+ + \text{H}$	~ 1.0	
21. $\text{H}_2 + \text{HNCO}^+ \rightarrow \text{H}_2\text{NCO}^+ + \text{H}$	~ 1.0	
22. $\text{He}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.6 ⁽²⁹⁾	
23. $\text{He}^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}^+ + \text{N} + \text{He}$	0.83 ⁽²⁹⁾	

TABLA 10 (Cont.)

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
24. $\text{He}^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{N}_2^+ + \text{He}$	0.37 ⁽²⁹⁾	
25. $\text{He}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.0 ⁽²⁹⁾	
26. $\text{He}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2^+ + \text{H} + \text{He}$	1.76 ⁽²⁹⁾	
27. $\text{He}^+ + \text{CN} \rightarrow \text{C}^+ + \text{N} + \text{He}$	2.0 ⁽¹⁾	
28. $\text{He}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{N}^+ + \text{O} + \text{He}$	1.38 ⁽²⁹⁾	
29. $\text{He}^+ + \text{HNO} \rightarrow \text{productos}$	~ 1.0	Estimado
30. $\text{He}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{CN}^+ + \text{H} + \text{He}$	1.46 ⁽²⁹⁾	
31. $\text{He}^+ + \text{HNCO} \rightarrow \text{NCO}^+ + \text{H} + \text{He}$	~ 1.0	
32. $\text{He}^+ + \text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{H}_2 + \text{He}$	0.93 ⁽²⁹⁾	
33. $\text{He}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O} + \text{He}$	0.77 ⁽²⁹⁾	
34. $\text{C}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}^+ + \text{O}$	1.1 ⁽¹⁾	
35. $\text{C}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{H}^+ + \text{CO}$	2.0 ⁽¹⁾	
36. $\text{C}^+ + \text{NH} \rightarrow \text{H}^+ + \text{CN}$	2.0 ⁽¹⁾	
37. $\text{C}^+ + \text{CH} \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{H}$	2.0 ⁽¹⁾	
38. $\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$	2.7 ⁽²⁹⁾	
39. $\text{C}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{H}^+ + \text{HCN}$	2.0 ⁽¹⁾	
40. $\text{C}^+ + \text{CH}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}^+ + \text{H}$	2.0 ⁽¹⁾	
41. $\text{C}^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{C}_2\text{N}^+ + \text{H}$	3.2 ⁽²⁹⁾	
42. $\text{C}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CO}^+ + \text{CO}$	1.1 ⁽²⁹⁾	
43. $\text{C}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}$	1.08 ⁽²⁹⁾	
44. $\text{C}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{HC}_2\text{O}^+ + \text{H}$	2.0 ⁽¹⁾	

TABLA 10 (Cont.)

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
45. $\text{HCO}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{HCO}_2^+ + \text{H}$	1.0 ⁽¹⁾	
46. $\text{HCO}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}$	0.5 ⁽¹⁾	
47. $\text{HCO}^+ + \text{NH} \rightarrow \text{NH}_2^+ + \text{CO}$	1.0 ⁽¹⁾	
48. $\text{HCO}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{CO}$	1.0 ⁽¹⁾	
49. $\text{HCO}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{CO}$	2.6 ⁽²⁹⁾	
50. $\text{HCO}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + \text{CO}$	1.0 ⁽¹⁾	
51. $\text{H}_3^+ + \text{O} \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}_2$	0.8 ⁽²⁶⁾	
52. $\text{H}_3^+ + \text{C} \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}_2$	2.0 ⁽¹⁾	
53. $\text{H}_3^+ + \text{CO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	1.7 ⁽²⁹⁾	
54. $\text{H}_3^+ + \text{N}_2 \rightarrow \text{HN}_2^+ + \text{H}_2$	1.7 ⁽²⁹⁾	
55. $\text{H}_3^+ + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2$	2.0 ⁽¹⁾	
56. $\text{H}_3^+ + \text{CN} \rightarrow \text{HCN}^+ + \text{H}_2$	2.0 ⁽¹⁾	
57. $\text{H}_3^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2$	5.9 ⁽²⁹⁾	
58. $\text{H}_3^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{HCO}_2^+ + \text{H}_2$	1.9 ⁽¹⁾	
59. $\text{H}_3^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_2$	3.6 ⁽¹⁾	
60. $\text{H}_3^+ + \text{HCN} \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}_2$	8.0 ⁽²⁹⁾	
61. $\text{H}_3^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2$	~1.0	
62. $\text{H}_3^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + \text{H}_2$	2.0 ⁽¹⁾	
63. $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{C} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}_2$	2.0 ⁽¹⁾	
64. $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{O}$	2.2 ⁽²⁹⁾	
65. $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCO} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{O}$	~1.0	
66. $\text{O}_2^+ + \text{N} \rightarrow \text{NO}^+ + \text{O}$	0.12 ⁽²⁹⁾	

TABLA 10 (Cont.)

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
67. $\text{HN}_2^+ + \text{CO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{N}_2$	0.88 (5)	
68. $\text{CH}_3^+ + \text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	0.44 (26)	
69. $\text{CH}_3^+ + \text{N} \rightarrow \text{H}_2\text{CN}^+ + \text{H}$	1.0 (7)	
70. $\text{H}^+ + \text{CO}_2 \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{O}$	3.0 (1)	

TABLA 11

REACCIONES DE INTERCAMBIO DE CARGA

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
71. $\text{H}^+ + \text{O} \rightarrow \text{O}^+ + \text{H}$	$0.7 \exp(-232/T)^{(8)}$	Algo endotermica
72. $\text{H}^+ + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + \text{H}$	$1.17^{(9)}$	
73. $\text{H}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{NO}^+ + \text{H}$	$1.9^{(1)}$	
74. $\text{H}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$	$1.0^{(1)}$	
75. $\text{H}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}$	$8.2^{(9)}$	
76. $\text{H}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}$	$5.2^{(9)}$	
77. $\text{H}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + \text{H}$	$1.0^{(1)}$	
78. $\text{H}^+ + \text{CN} \rightarrow \text{CN}^+ + \text{H}$	~ 1.0	
79. $\text{H}_2^+ + \text{N} \rightarrow \text{N}^+ + \text{H}_2$	~ 1.0	
80. $\text{C}^+ + \text{NO} \rightarrow \text{NO}^+ + \text{C}$	$1.0^{(1)}$	
81. $\text{C}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{C}$	$1.15^{(29)}$	
82. $\text{C}^+ + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_3^+ + \text{C}$	~ 1.0	
83. $\text{O}_2^+ + \text{C} \rightarrow \text{C}^+ + \text{O}_2$	$1.0^{(1)}$	
84. $\text{O}_2^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{O}_2$	$0.67^{(10)}$	
85. $\text{N}_2^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{N}_2$	$0.58^{(10)}$	
86. $\text{NO}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{NO}$	$0.07^{(10)}$	
87. $\text{H}_2\text{O}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H}_2\text{O}$	$2.7^{(11)}$	
88. $\text{H}_3^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H}_2 + \text{H}$	0.5	
89. $\text{H}_3\text{O}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	0.5	
90. $\text{HCO}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H} + \text{CO}$	0.5	
91. $\text{HN}_2^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{N}_2 + \text{H}$	0.5	

TABLA 11 (Cont.)

Reacción	$k(10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
92. $\text{NH}_3^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{NH}_3$	0.5	
93. $\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	0.5	
94. $\text{H}_3\text{CO}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	0.5	
95. $\text{CH}_3^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{CH}_3$	0.5	
96. $\text{H}_2\text{CN}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{HCN} + \text{H}$	0.5	
97. $\text{CN}^+ + \text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{C} + \text{N}$	0.5	

TABLA 12
REACCIONES DE RECOMBINACION ION-ELECTRON

Reacción	$k(10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
98. $\text{H}^+ + e \rightarrow \text{H} + h\nu$	$1.9 \times 10^{-3} T^{-0.7(12)}$	
99. $\text{Na}^+ + e \rightarrow \text{Na} + h\nu$	$2 \times 10^{-3} T^{-0.7(29)}$	
100. $\text{O}_2^+ + e \rightarrow \text{O} + \text{O}$	$2.1 (300/T)^{0.5(1)}$	Ver texto
101. $\text{NO}^+ + e \rightarrow \text{N} + \text{O}$	$4.1 (300/T)^{0.5(1)}$	"
102. $\text{H}_3^+ + e \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	$1.5 (200/T)^{0.5(13)}$	"
103. $\rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	$1.5 (200/T)^{0.5(13)}$	"
104. $\text{HCO}^+ + e \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	$3.3 (200/T)^{0.5(14)}$	"
105. $\text{HN}_2^+ + e \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}$	$6.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
106. $\text{H}_3\text{O}^+ + e \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$6.5 (300/T)^{0.5(1)}$	"
107. $\rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{H}$	$6.5 (300/T)^{0.5(1)}$	"
108. $\text{NH}_3^+ + e \rightarrow \text{NH} + \text{H} + \text{H}$	$6.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
109. $\text{NH}_4^+ + e \rightarrow \text{NH}_3 + \text{H}$	$18.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
110. $\rightarrow \text{NH}_2 + \text{H} + \text{H}$	$2.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
111. $\text{H}_2\text{CN}^+ + e \rightarrow \text{HCN} + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
112. $\rightarrow \text{CN} + \text{H} + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
113. $\text{CH}_2^+ + e \rightarrow \text{CH} + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(7)}$	"
114. $\text{CH}_3^+ + e \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	$3.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
115. $\rightarrow \text{CH} + \text{H} + \text{H}$	$3.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
116. $\text{H}_2\text{CO}^+ + e \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	$6.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
117. $\text{HCO}_2^+ + e \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
118. $\rightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"
119. $\text{H}_3\text{CO}^+ + e \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	$10.0 (30/T)^{0.5(1)}$	"

TABLA 12 (Cont.)

Reacción	$k(10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
120. $\text{H}_3\text{CO}^+ + e \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H} + \text{H}$	$10.0(30/T)^{0.5} \text{ (4)}$	
121. $\text{CO}_2^+ + e \rightarrow \text{CO} + \text{O}$	$\sim 10.0(30/T)^{0.5}$	Estimada
122. $\text{CN}^+ + e \rightarrow \text{C} + \text{N}$	$\sim 10.0(30/T)^{0.5}$	
123. $\text{H}_2\text{NCO}^+ + e \rightarrow \text{HNCO} + \text{H}$	$\sim 5.0(30/T)^{0.5}$	
124. $\text{H}_2 + \text{NCO}$	$\sim 5.0(30/T)^{0.5}$	



1225



1225

1225

1225

1225

TABLA 14
REACCIONES NEUTRO-NEUTRO

Reacción	$k(10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1})$	Comentarios
126. $\text{O} + \text{OH} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	$4.2^{(17)}$	
127. $\text{O} + \text{CH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
128. $\text{O} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH} + \text{OH}$	$4.0^{(1)}$	
129. $\text{O} + \text{NH} \rightarrow \text{NO} + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
130. $\text{O} + \text{NH}_2 \rightarrow \text{HNO} + \text{H}$	$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} 0.35^{(18)} k_{130}/k_{131} \sim 10^{(18)}$	
131. $\quad \quad \rightarrow \text{OH} + \text{NH}$		
132. $\text{O} + \text{CN} \rightarrow \text{CO} + \text{N}$	$10 \exp(-1200/T)^{(1)}$	
133. $\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$	$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} 9.0^{(19)} k_{134}/k_{133} < 0.05^{(20)}$	
134. $\quad \quad \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$		
135. $\text{O} + \text{HCO} \rightarrow \text{CO} + \text{OH}$	$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} 21.0^{(20)}$	$k_{135}/k_{136} = 1.4^{(21)}$
136. $\quad \quad \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$		
137. $\text{O} + \text{HNO} \rightarrow \text{OH} + \text{NO}$	~ 4.0	$k_{137}/k_{138}^{(18)}$
138. $\text{O} + \text{NCO} \rightarrow \text{NO} + \text{CO}$	~ 4.0	
139. $\text{C} + \text{OH} \rightarrow \text{CO} + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
140. $\text{C} + \text{NO} \rightarrow \text{CO} + \text{N}$	$4.0^{(1)}$	
141. $\text{C} + \text{NH} \rightarrow \text{CN} + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
142. $\text{C} + \text{NCO} \rightarrow \text{CN} + \text{CO}$	~ 4.0	
143. $\text{N} + \text{OH} \rightarrow \text{NO} + \text{H}$	$5.3^{(22)}$	
144. $\text{N} + \text{CH} \rightarrow \text{CN} + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
145. $\text{N} + \text{CN} \rightarrow \text{C} + \text{N}_2$	$\ll 10^{-2}^{(1)}$	
146. $\text{N} + \text{NH} \rightarrow \text{N}_2 + \text{H}$	$4.0^{(1)}$	
147. $\text{N} + \text{NO} \rightarrow \text{N}_2 + \text{O}$	$2.7^{(22)}$	

RECEIVED

10-11-3-51

COMMUNICATIONS

148. [unclear] NCO [unclear] [unclear]

148-11

149. [unclear] NCO [unclear] [unclear]

149-11

150. [unclear] [unclear] NCO [unclear]

150-77 (23)

REACCIONES CON ENERGÍAS DE ACTIVACION

Reacción	$k(\text{cm}^3 \text{s}^{-1})$	Comentarios
151. $\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}_2$	$5.48 \times 10^{-9} \exp(-53000/T)$ (31)	
152. $\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$	$3 \times 10^{-14} T \exp(-4480/T)$ (32)	
153. $\text{H}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	$3.6 \times 10^{-11} \exp(-2590/T)$ (32)	
154. $\text{H}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{H}_2$	$5.8 \times 10^{-9} \exp(-52900/T)$ (32)	
155. $\text{H}_2 + \text{C} \rightarrow \text{CH} + \text{H}$	$\sim 6.7 \times 10^{-11} T^{1/2} \exp(-14100/T)$ (33)	
156. $\text{H}_2 + \text{CH} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$	$\sim 5 \times 10^{-13} T^{0.67} \exp(-8820/T)$ (33)	
157. $\text{H}_2 + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH}_3 + \text{H}$	$\sim 2 \times 10^{-11} T^{1/6} \exp(-6400/T)$ (33)	
158. $\text{H}_2 + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}$	$\sim 1 \times 10^{-10} \exp(-5500/T)$	Estimado, ver texto
159. $\text{H}_2 + \text{N} \rightarrow \text{NH} + \text{H}$	$5 \times 10^{-11} T^{1/2} \exp(-10700/T)$ (33)	
160. $\text{H}_2 + \text{NH} \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}$	$5.8 \times 10^{-14} T^{0.79} \exp(-6700/T)$ (33)	
161. $\text{H}_2 + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}_3 + \text{H}$	$2.4 \times 10^{-11} T^{1/6} \exp(-6300/T)$ (33)	
162. $\text{H}_2 + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H} + \text{H}_2$	$1.5 \times 10^{-8} \exp(-42400/T)$ (37)	
163. $\text{H}_2 + \text{CN} \rightarrow \text{HCN} + \text{H}$	$\sim 1.7 \times 10^{-11} \exp(-3500/T)$	Estimado, datos de (27)
164. $\text{H}_2 + \text{NH}_3^+ \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}$	$5 \times 10^{-15} + 1.1 \times 10^{-11} \exp(-1050/T)$ (27)	Reemplaza k_{14}
165. $\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{O} + \text{H}_2$	$1.4 \times 10^{-14} T \exp(-3500/T)$ (32)	
166. $\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$	$1.5 \times 10^{-10} \exp(-10250/T)$ (32)	
167. $\text{H} + \text{CH} \rightarrow \text{C} + \text{H}_2$	$6.7 \times 10^{-11} T^{1/2} \exp(-2200/T)$ (33)	
168. $\text{H} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	$5 \times 10^{-13} T^{0.67} \exp(-12850/T)$ (33)	

Reacción	$k(\text{cm}^3 \text{s}^{-1})$	Comentarios
169. $\text{H} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}_2$	$2 \times 10^{-11} T^{1/6} \exp(-5600/T)$ ⁽³³⁾	
170. $\text{H} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$	$1.0 \times 10^{-10} \exp(-5800/T)$ ⁽³⁴⁾	
171. $\text{H} + \text{NH} \rightarrow \text{N} + \text{H}_2$	$5 \times 10^{-11} T^{1/2} \exp(-2400/T)$ ⁽³³⁾	
172. $\text{H} + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}_2$	$5.8 \times 10^{-14} T^{0.79} \exp(-2200/T)$ ⁽³³⁾	
173. $\text{H} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2$	$2.4 \times 10^{-11} T^{1/6} \exp(-5700/T)$ ⁽³³⁾	
174. $\text{H} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{HCO} + \text{H}_2$	$2.2 \times 10^{-11} \exp(-1890/T)$ ⁽³⁵⁾	
175. $\text{H} + \text{HNO} \rightarrow \text{NO} + \text{H}_2$	$\sim 1.5 \times 10^{-11} \exp(-1500/T)$	Interpolado, datos de (36) y (37)
176. $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{OH}$	$3.7 \times 10^{-10} \exp(-8450/T)$ ⁽³²⁾	
177. $\text{O}_2 + \text{N} \rightarrow \text{NO} + \text{O}$	$1.1 \times 10^{-14} T \exp(-3150/T)$ ⁽³⁷⁾	
178. $\text{O}_2 + \text{HCO} \rightarrow \text{CO} + \text{HO}_2$	$8.1 \times 10^{-11} \exp(-773/T)$	Interpolado, datos de (38), (39) y (40)
179. $\text{O} + \text{N}_2 \rightarrow \text{N} + \text{NO}$	$1.3 \times 10^{-10} \exp(-38000/T)$ ⁽³⁷⁾	
180. $\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$1.1 \times 10^{-10} \exp(-9240/T)$ ⁽³²⁾	
181. $\text{O} + \text{HCN} \rightarrow \text{OH} + \text{CN}$	$8.7 \times 10^{-12} \exp(-4100/T)$ ⁽⁴¹⁾	
182. $\text{O} + \text{NO} \rightarrow \text{N} + \text{O}_2$	$2.5 \times 10^{-15} T \exp(-19500/T)$ ⁽³⁷⁾	
183. $\text{O} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$	$3.5 \times 10^{-11} \exp(-4550/T)$ ⁽⁴⁶⁾	
184. $\text{O} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{NH}_2$	$2.5 \times 10^{-12} \exp(-3020/T)$ ⁽³⁷⁾	
185. $\text{N} + \text{CN} \rightarrow \text{N}_2 + \text{C}$	$7.3 \times 10^{-10} \exp(-4500/T)$ ⁽⁴²⁾	Reemplaza k_{145}
186. $\text{N} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{CO}$	$3.4 \times 10^{-13} \exp(-1700/T)$ ⁽⁴³⁾	

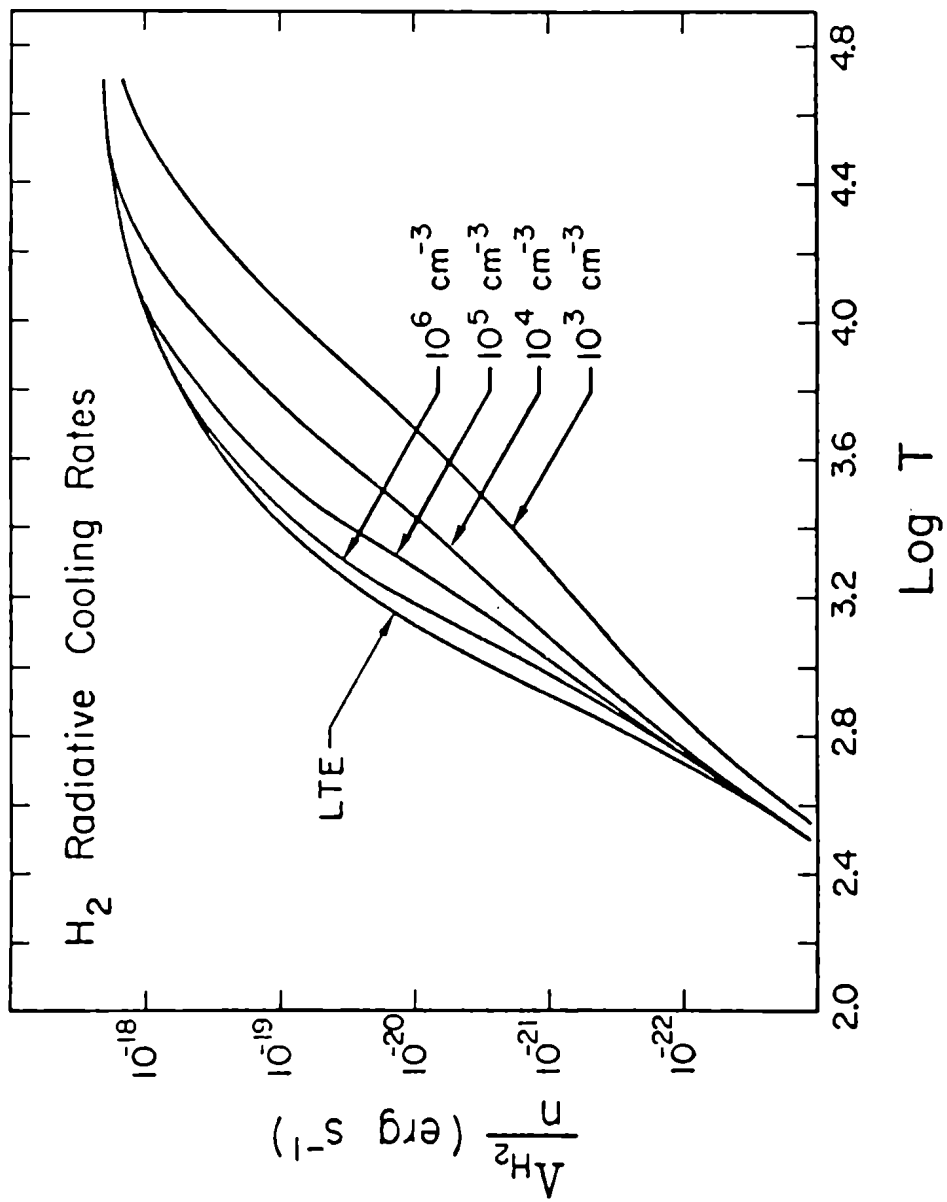
Reacción	$k(\text{cm}^3\text{s}^{-1})$	Comentarios
187. $\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	$5.1 \times 10^{-13} \exp(-300/T)^{(43)}$	
188. $\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	$1.0 \times 10^{-11} \exp(-550/T)^{(32)}$	
189. $\text{OH} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	$2.3 \times 10^{-12} \exp(-800/T)^{(44)}$	
190. $\text{OH} + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}_3 + \text{O}$	$1 \times 10^{-13}^{(37)}$	$300\text{K} \leq T \leq 1000\text{K}$
191. $\quad \quad \rightarrow \text{NH} + \text{H}_2\text{O}$	$\sim 1 \times 10^{-13}$	
192. $\text{OH} + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{HCO}$	$\sim 5 \times 10^{-11} \exp(-380/T)$	Interpolado, datos de (40), (43) y (19)
193. $\text{OH} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3$	$4.7 \times 10^{-11} \exp(-2500/T)^{(43)}$	
194. $\text{OH} + \text{NO} \rightarrow \text{NO}_2 + \text{H}$	$5.2 \times 10^{-12} \exp(-15100/T)^{(37)}$	

NOTAS PARA LAS TABLAS 9-15

Los coeficientes de reacción que carecen de referencia son estimados

- (1) Herbst and Klemperer 1973
- (2) Kim et al. 1975
- (3) Laudenslager et al. 1974
- (4) Schiff et al. 1974
- (5) Herbst et al. 1975
- (6) Dalgarno et al. 1973
- (7) Dalgarno and Oppenheimer 1974
- (8) Field and Steigman 1971
- (9) Huntress et al. 1974
- (10) Farragher et al. 1969
- (11) Ferguson 1972
- (12) Bates and Dalgarno 1962
- (13) Leu et al. 1973a
- (14) Leu et al. 1973b
- (14b) Leu et al. 1973c
- (15) Black et al. 1975
- (16) Black and Dalgarno 1973
- (17) Wilson 1972
- (18) Gehring et al. 1973
- (19) Morris and Niki 1972
- (20) Washida et al. 1974
- (21) Westenberg and de Haas 1972
- (22) Baulch et al. 1974
- (23) Boden and Trush 1968

- (24) Huntress y Anicich 1976
- (25) Fehsenfeld 1976
- (26) Fehsenfeld 1977
- (27) Fehsenfeld 1975
- (28) Huntress 1977
- (29) Allen 1973
- (30) Herbst et al. 1977
- (31) Breshears y Bird 1973
- (32) Baulch et al. 1972
- (33) Aannestad 1973
- (34) Troe y Wagner 1972
- (35) Westenberg y de Haas 1972
- (36) Hampson 1973
- (37) Baulch et al. 1973
- (38) Demerjian et al. 1974
- (39) Washida et al. 1973
- (40) Peeters y Mahnen 1973
- (41) Kaufman 1969
- (42) Slack 1976
- (43) Wilson 1972
- (44) Smith y Zellner 1974
- (45) Bowers y Elleman 1972
- (46) Herron y Huie 1973



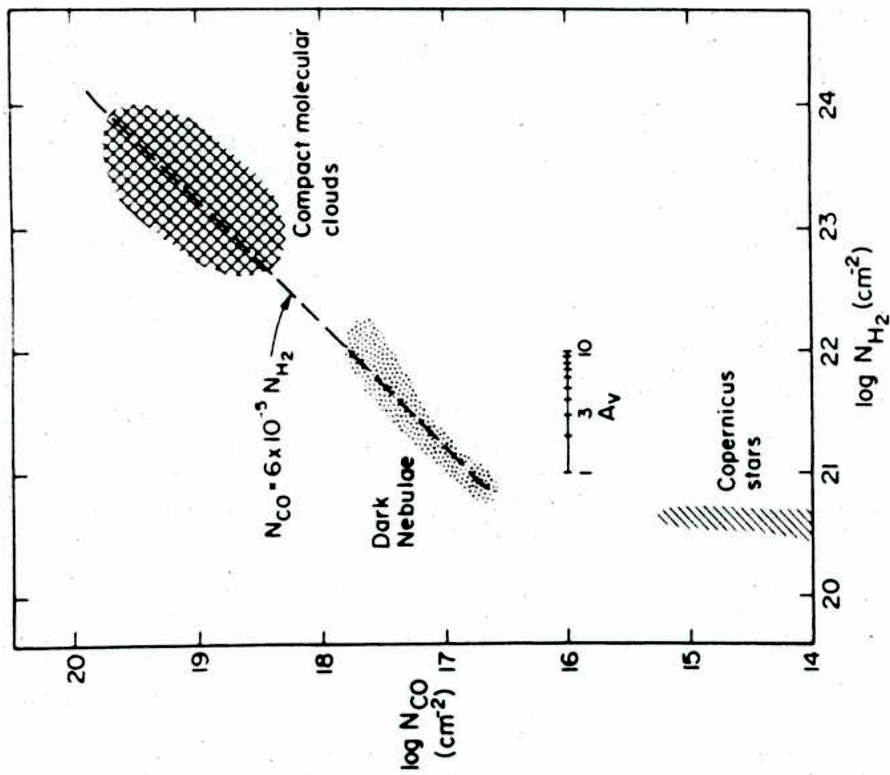
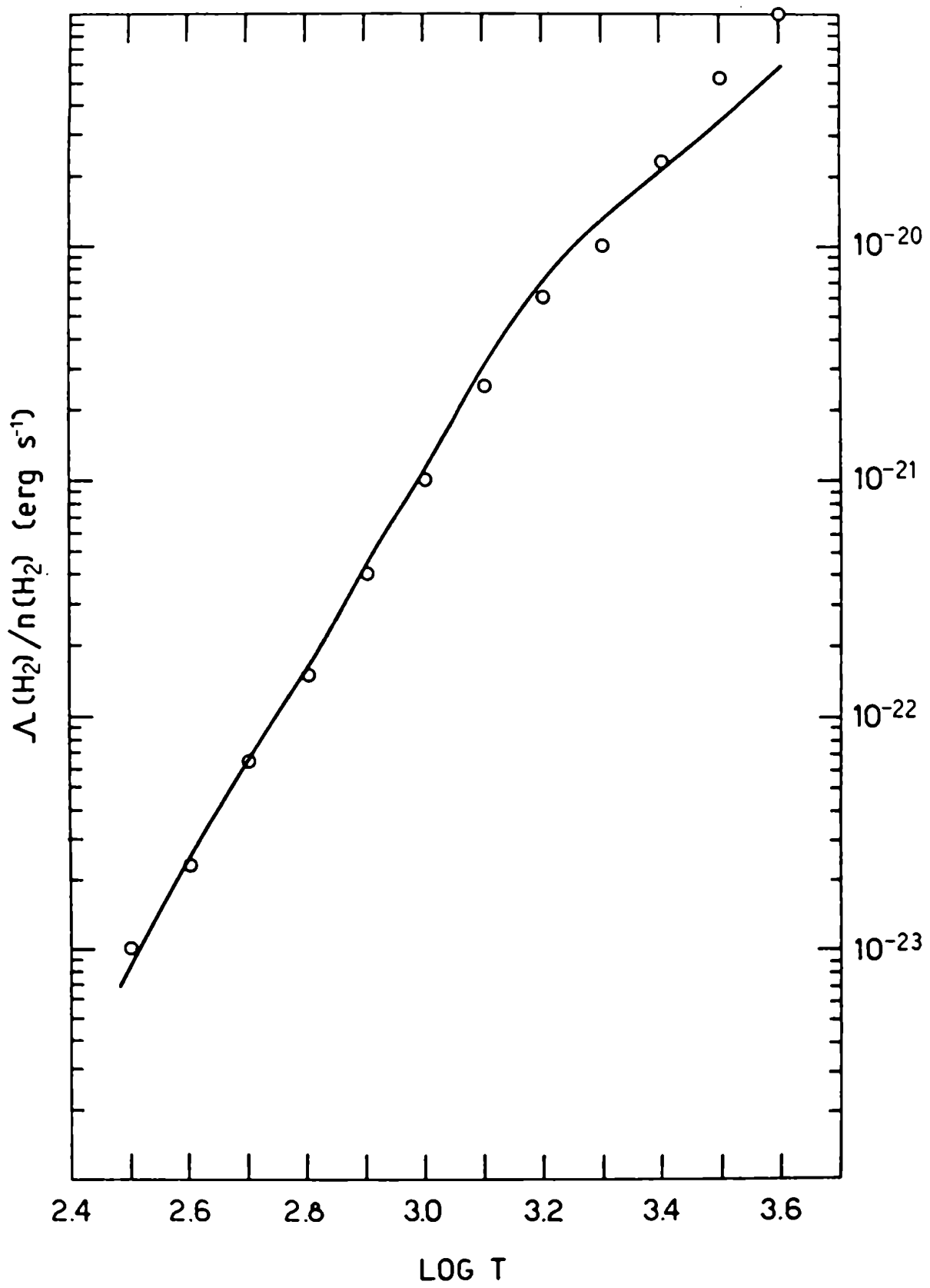


Figure 1. The CO/H₂ ratio in molecular clouds, and in the direction of stars observed by the *Copernicus* orbiting observatory.



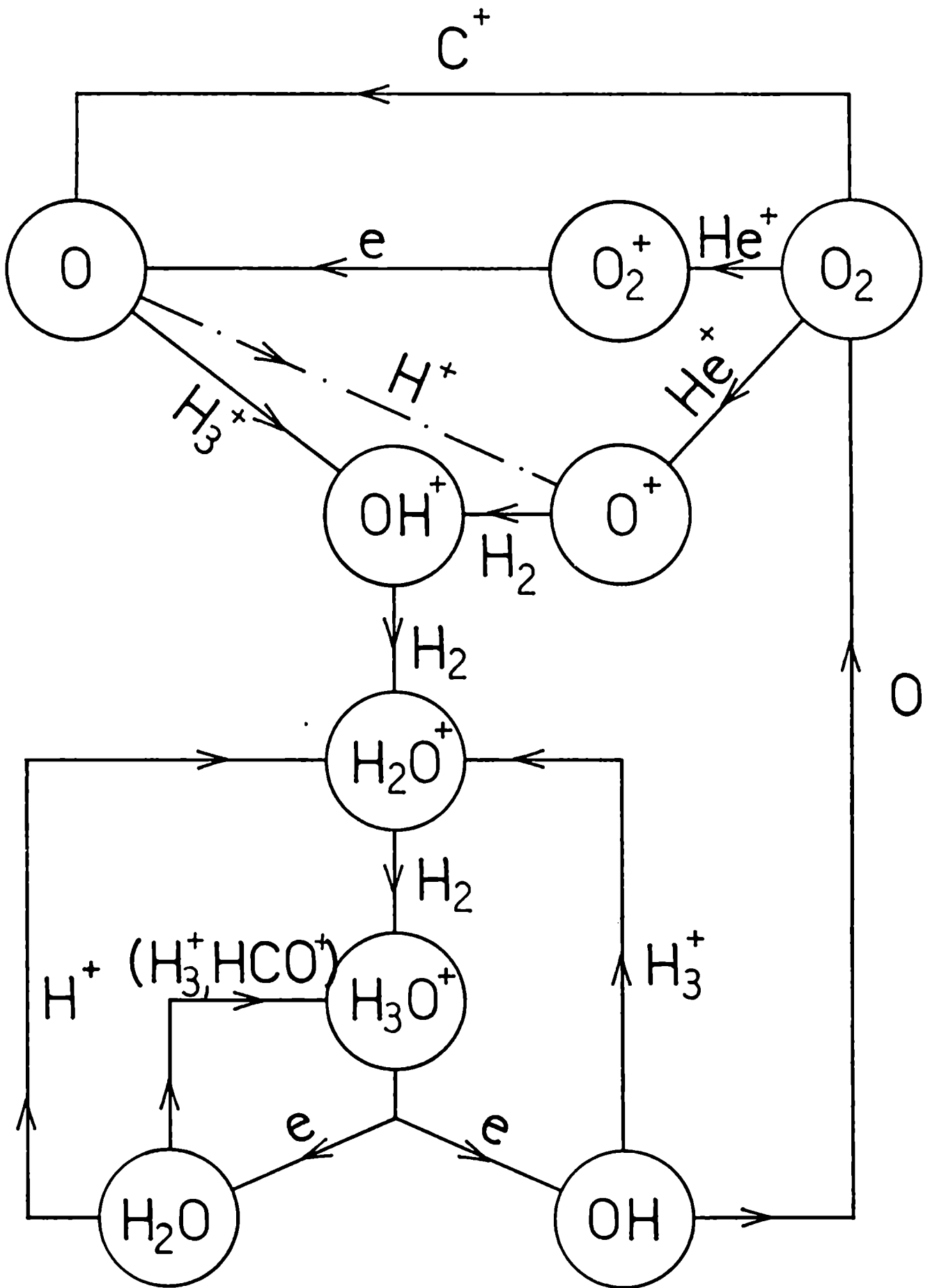


Fig. 4

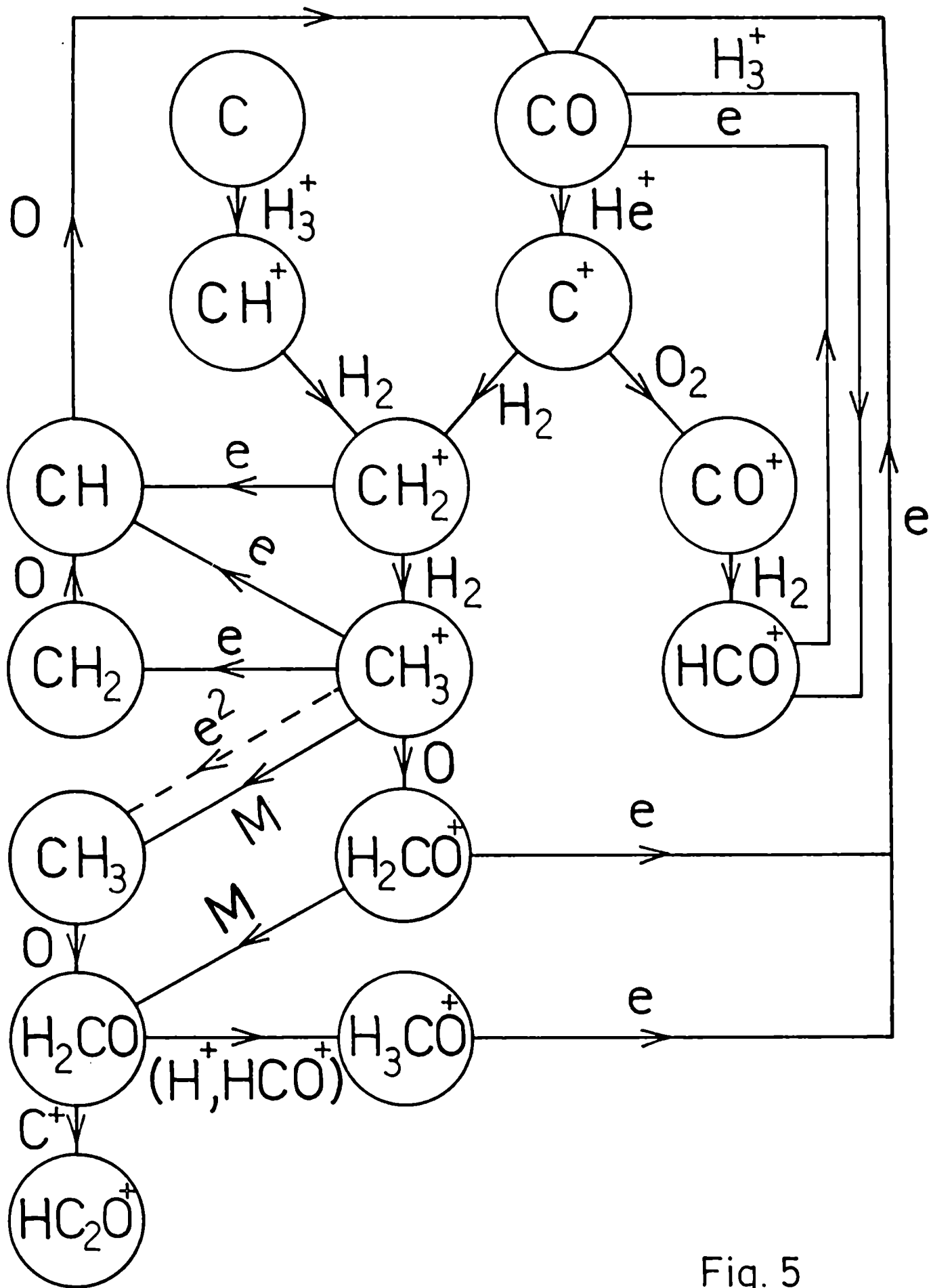


Fig. 5

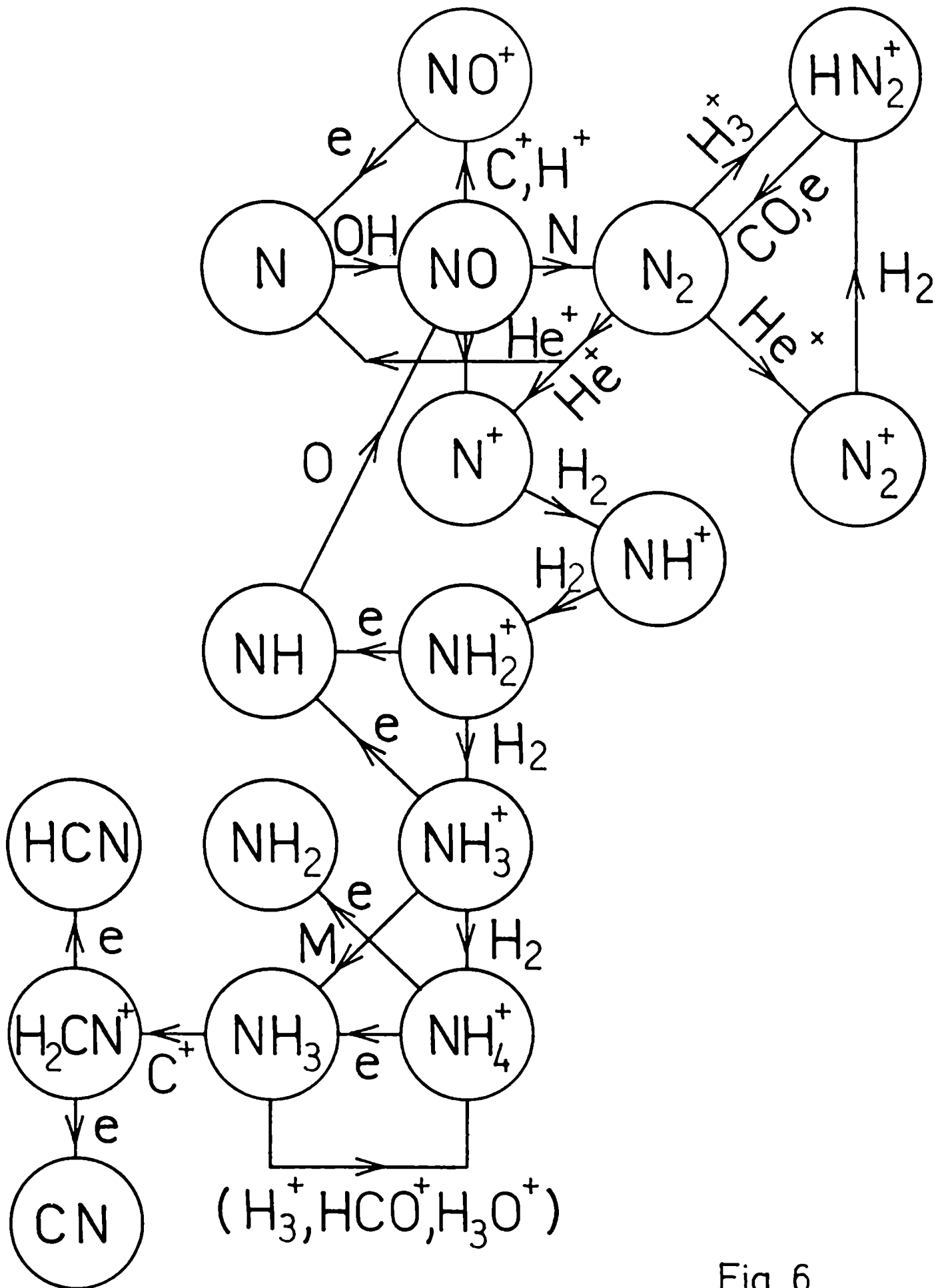


Fig. 6

TIEMPO (años)

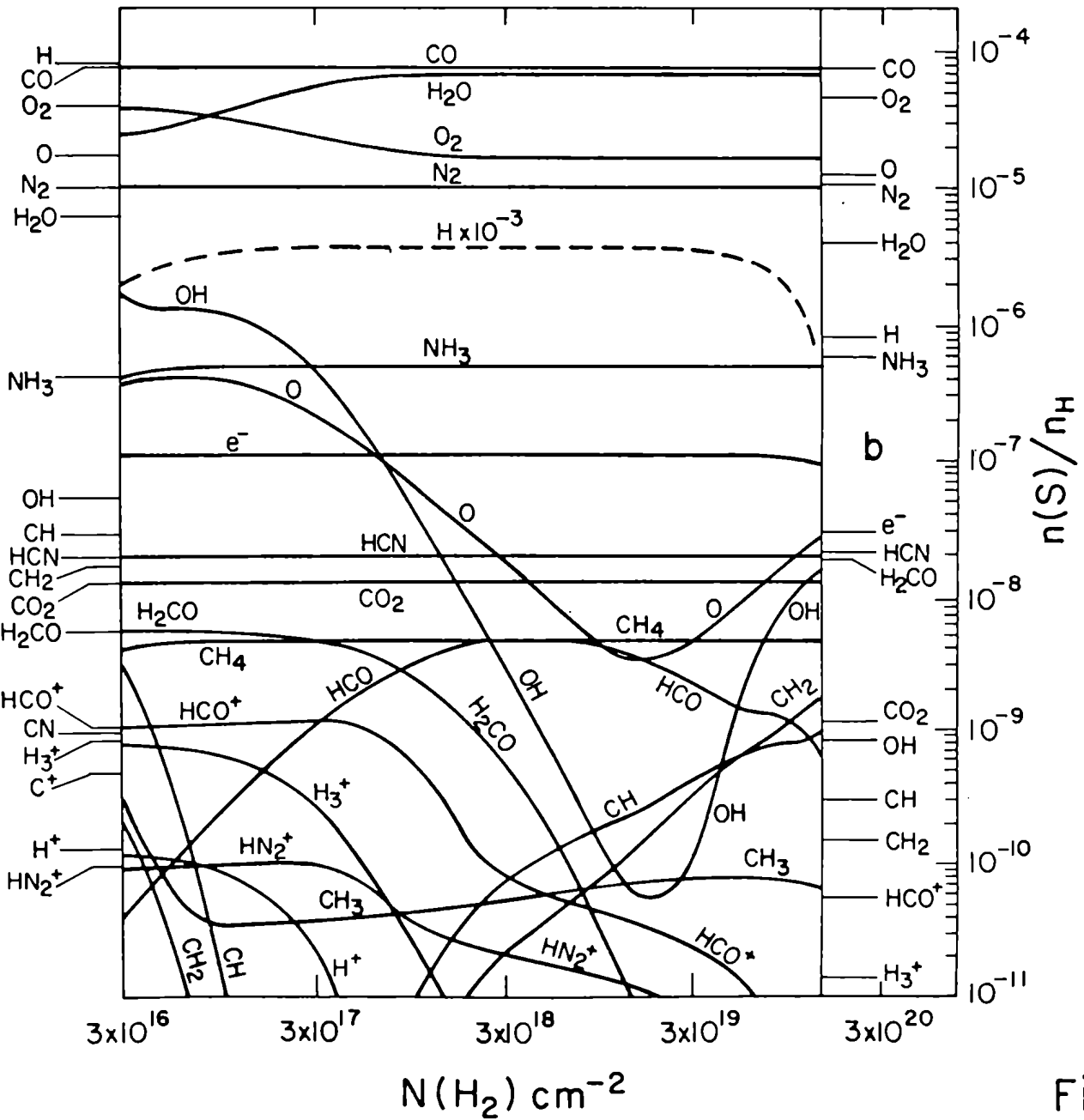
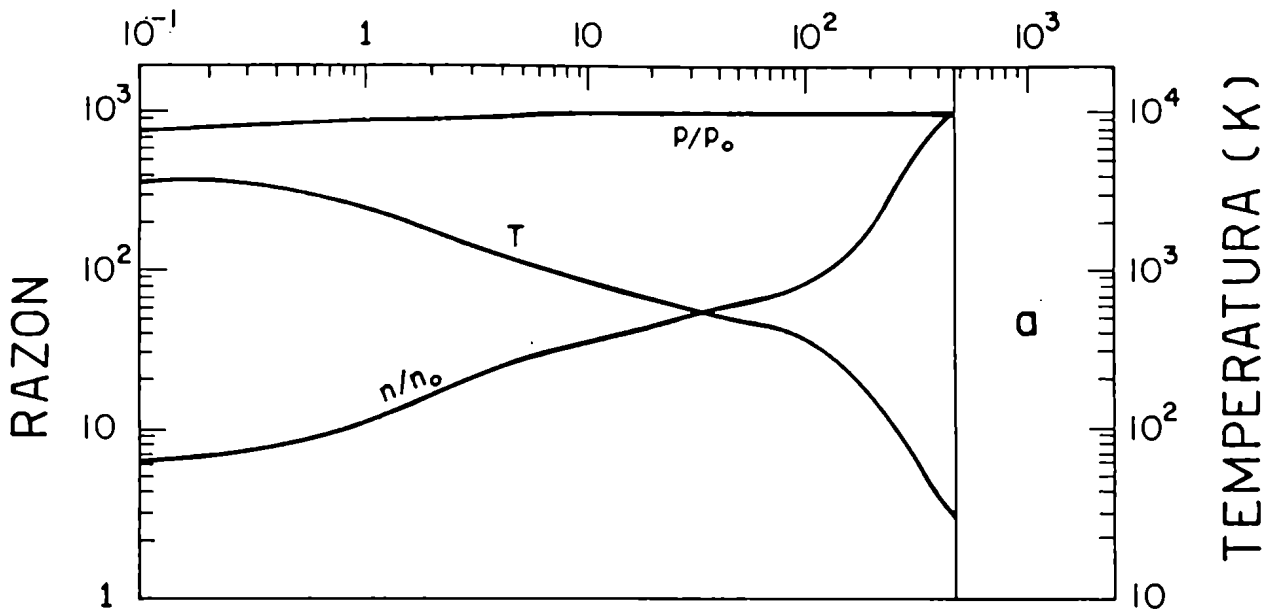


Fig. 7