

## Química primordial en un modelo no estándar del *Big Bang*

A. Lipovka, J. Saucedo, J. Campos

*Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora*

*Rosales y Blvd. Transversal, Col. Centro, Edif. 3-I 83000, Apdo. Post. 5-088, Hermosillo Sonora, México.*

*e-mail: aal@cajeme.cifus.uson.mx*

Recibido el 11 de enero de 2002; aceptado el 3 de junio de 2002

En el presente trabajo se considera la formación de moléculas en épocas pregalácticas caracterizadas por corrimientos al rojo  $10 < z < 400$ . El cálculo de la abundancia de dichas moléculas se ha hecho suponiendo un modelo no estándar del *Big Bang* que predice abundancias significativas de carbono y oxígeno. Se muestra que para este caso la abundancia relativa de la molécula de *CH* basada en carbono primordial debe alcanzar un valor superior a  $10^{-14}$ , mientras que las abundancias de moléculas basadas en oxígeno primordial resultan ser insignificantes.

**Descriptores:** Procesos químicos; plasma astrofísico; cosmología; cálculos de la dinámica de las moléculas en plasmas

In the present paper the formation of primordial molecules in pregalactic epochs characterized by redshifts  $10 < z < 400$  is considered. The calculation of the abundances of these molecules has been made under the assumption of a Non Standard Big Bang Nucleosynthesis (NBBN) which leads to significant abundances of carbon and oxygen. It is shown that for this case the relative abundance of the molecule *CH* based on primordial carbon should have values higher than  $10^{-14}$ , whereas the molecular abundances of species based on primordial oxygen turn out to be insignificant.

**Keywords:** Chemical processes; astrophysical plasma; cosmology; molecular dynamics calculations in plasmas

PACS: 95.30.F; 95.30.Q; 98.80; 52.65.Y

### 1. Introducción

El estudio de la formación molecular en épocas posteriores a la recombinación inicia con los trabajos pioneros de Zwicky [1] sobre hidrógeno molecular. Pero es en años recientes que este tipo de investigaciones ha comenzado a experimentar su más fuerte desarrollo. Los trabajos de las Refs. 2 y 3 fueron los primeros en indicar la importancia de las reacciones en fase gaseosa en la formación de la molécula de  $H_2$ . La primera descripción completa de la química del hidrógeno fue desarrollada en las Refs. 4- 6 para aplicarla al estudio de nubes de gas pre-galácticas y de formación de galaxias. La química del deuterio y del litio fue tratada por primera vez por Lepp [7], en cuyo trabajo se presenta además, la primera red química que incluye moléculas primordiales tales como el  $H_2$  y el  $HD$ . Posteriormente se han publicado los trabajos señalados en las Refs. 8- 11.

La existencia de una abundancia significativa de moléculas es muy importante en la evolución dinámica de protoestrellas. Debido a que la temperatura de una nube aumenta al contraerse, es necesario que exista un mecanismo de enfriamiento, tal como el que puede lograrse mediante la emisión de radiación por las líneas rotacionales de moléculas. Con la disminución de la temperatura, disminuye la presión, lo que permite que la gravedad domine de nuevo. Es decir, hace posible el colapso continuo de protonubes inestables de Jeans. Este mecanismo de enfriamiento debió de haber sido especialmente importante en la formación de la primera generación de estrellas. La posibilidad teórica de la observación directa de protoestrellas (en épocas  $z > 10$ ) mediante líneas moleculares ha sido tratada en los trabajos de las Refs. 12- 14. El interés por este problema se debe en parte a que dichas ob-

servaciones brindarían la posibilidad de determinar abundancias primordiales de especies tales como el litio y el deuterio, las cuales permitirían imponer restricciones a los modelos de nucleosíntesis. Su importancia se debe además al gran interés que existe por encontrar cantidades observables que proporcionen información sobre la evolución del Universo en épocas tempranas. A este respecto, el problema de la influencia de las moléculas primigéneas en el enfriamiento y evolución de las protoestrellas resulta ser de carácter fundamental. Otro problema que resulta ser de gran interés es que la radiación cósmica de fondo (CMBR) interactúa con la estructura rovibracional de las moléculas, lo que también podría permitir la observación de protoestrellas mediante las líneas de las moléculas anteriormente mencionadas.

Las mediciones recientes de la radiación cósmica de fondo (CMBR) por BOOMERANG, MAXIMA y DASI [15-18] han permitido dar argumentos a favor o en contra (en el caso de la Ref. 18) de un nuevo valor de  $\Omega_b$ . Este nuevo valor invita a reconsiderar modelos de NBBN [19]. Es bien conocido que existen modelos NBBN que predicen abundancias considerables de carbono, nitrógeno y oxígeno primordiales. Por esta razón es importante investigar la posibilidad de detectar líneas de emisión provenientes de moléculas basadas en elementos primordiales pesados (estas moléculas son, por ejemplo:  $CH$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ ,...). Este tipo de estudios podrían utilizarse para restringir modelos de NBBN. A más bajas longitudes de onda, podría esperarse que también se manifestaran líneas moleculares emitidas en épocas  $z \approx 20 - 50$ , por objetos de otros tipos (por ejemplo, en los cascarones de las primeras estrellas). Estas observaciones impondrían restricciones al enriquecimiento del gas primordial debido a elementos pesados, como productos de la evolución de las pri-

meras estrellas en esas épocas.

Como ya se ha mencionado, algunos modelos de NBBN, predicen altas abundancias de nitrógeno, carbono y oxígeno primigenios (algunos alcanzan valores hasta de  $10^{-9}$ , como ha sido sugerido en la Ref. 20). Esta posibilidad se debe a la presencia de micro-inhomogeneidades en la distribución inicial de materia en  $z = 10^9$  (este orden de inhomogeneidad podría aparecer como resultado de transiciones de fase). En cuyo caso, moléculas tales como  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $OH^+$ , etc., pudieron haber sido creadas en cantidades significativas en épocas con corrimiento  $z < 300$ . Por esta razón, la investigación de estas moléculas a muy alto corrimiento es de gran importancia. Si estas fuesen detectadas o por lo menos pudiesen establecerse límites a sus abundancias, no solo sería posible restringir modelos de NBBN, sino que además permitirían estimar el espectro de masa de los primeros objetos, sus parámetros físicos y su época de formación. En caso de existir abundancias significativas de oxígeno y carbono en protoestrellas, su fluorescencia podría permitir emisiones observables en líneas de moléculas tales como  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ , etc.

En el caso de NBBN (ver por ejemplo la Ref. 20, o trabajos de revisión posteriores [21-22]) es muy importante calcular la cinética del gas primordial, incluyendo a moléculas formadas por elementos pesados - carbono y oxígeno. Su importancia se debe a que tales moléculas abren nuevas opciones de investigación. Por un lado, ellas pudieron haber participado en el enfriamiento del gas primordial y por tanto ser capaces de modificar los procesos de colapso de los primeros objetos (tales como las protonubes) y por lo tanto, la historia del Universo observable. La importancia de las moléculas en procesos de enfriamiento y fragmentación de nubes primordiales ha sido discutido en varios trabajos (ver, por ejemplo la Ref. 23). Por otro lado, las moléculas pesadas poseen una estructura de niveles roto-vibracionales muy conveniente para la observación, además de momentos dipolares bastante grandes. Por estas razones, ofrecen la posibilidad de poder observar a los primeros objetos mediante sus líneas de estructura de rotación-vibración.

En el presente artículo se calculan por primera vez las abundancias de moléculas pesadas para el caso de un gas homogéneo en un Universo con NBBN. En la segunda sección se presentan las ecuaciones del problema. En la tercera se presenta el método para resolver el sistema de ecuaciones y los valores de los parámetros iniciales. En la parte final se discuten los nuevos resultados, comparándolos con el cálculo

de abundancias moleculares para el caso homogéneo, de un protoobjeto para el que se espera un fuerte crecimiento molecular, por encontrarse en condiciones fuera de equilibrio.

## 2. Las Ecuaciones de la cinética molecular

El sistema de ecuaciones cinéticas que describen la evolución de la abundancia de las especies está dado por

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j,k} n_j n_k R_{jki} - n_i \sum_{m,n} n_m R_{imn} + \sum_j n_j R_{ji} - n_i \sum_m R_{im}, \quad (1)$$

donde  $t$  es el tiempo,  $n_i$  es la densidad de la especie  $i$ ,  $R_{jik}(T_c)$  son las velocidades de los procesos de choque  $i + j \rightarrow k$  que las especies  $i, j$  y a la temperatura cinética  $T_c$  producen la especie  $k$ ,  $R_{ji}(T_r)$  son las velocidades de los procesos radiativos (formación y destrucción de la especie mediante la ayuda de un fotón de CMBR a la temperatura  $T_r$ ).

En la Ec. (1) los términos positivos son responsables de la creación de la especie  $n_i$ , y los negativos de la destrucción de la misma.

Para resolver el sistema de ecuaciones es conveniente introducir el corrimiento al rojo  $z$ . Las abundancias adimensionales  $x_i$  se definen como

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}}, \quad (2)$$

donde  $n_{tot} = n_o (1 + z)^3$ . El cambio en el tiempo  $dt$  se puede expresar en términos del cambio en el corrimiento al rojo  $dz$  mediante la siguiente ecuación:

$$dt = -\frac{1}{H_0} \frac{dz}{(1+z)^2 \sqrt{1+\Omega_0 z}}. \quad (3)$$

En las Ecs. (2) y (3) los parámetros cosmológicos  $n_o = \Omega_b n_{cr}$ ,  $H_0$  y  $\Omega_0$  son la densidad bariónica en la época actual  $z = 0$ , la constante de Hubble y la densidad adimensional, respectivamente,  $\Omega_b$  es la densidad bariónica adimensional y  $n_{cr}$  es la densidad crítica de materia. Con estas nuevas variables el sistema de Ecs. (1) toma la forma:

$$\frac{dx_i}{dz} = \frac{1}{H_0 (1+z)^2 \sqrt{1+\Omega_0 z}} \left[ n_o (1+z)^3 \left( \sum_{k,l} x_k x_l R_{kli} - x_i \sum_{m,n} x_m R_{imn} \right) + \sum_k x_k R_{ki} - x_i \sum_m R_{im} \right]. \quad (4)$$

Como ya se ha mencionado, las velocidades de reacción  $R_{ijk}$  y  $R_{ij}$  dependen de las temperaturas cinética  $T_c$  y radiativa  $T_r$ , respectivamente. Las temperaturas a su vez, son funciones de varios parámetros y para encontrarlos se debe resolver otro conjunto de ecuaciones diferenciales para la temperatura cinética  $T_c$ , así como para la temperatura de radiación  $T_r$ . La temperatura de radiación se puede obtener de la ecuación de expansión adiabática

$$\frac{dT_r}{dt} = -T_r H_0 (1+z) \sqrt{1+\Omega_0 z}, \quad (5)$$

de donde podemos obtener  $T_r = T_0 (1+z)$ .

Para encontrar la temperatura  $T_c$  debe resolverse la ecuación diferencial

$$\begin{aligned} \frac{dT_c}{dt} = & -2T_m H_0 (1+z) \sqrt{1+\Omega_0 z} \\ & + \frac{8\sigma_t a_b T_r^4}{3m_e c} x_e (T_r - T_c) + \left( \frac{dT_c}{dt} \right)_{mol}, \end{aligned} \quad (6)$$

donde el primer término está relacionado con la expansión del Universo, el segundo se debe a la dispersión de Thomson y el tercero es el cambio de la temperatura cinética debido a las moléculas primordiales:

$$\left( \frac{dT_c}{dt} \right)_{mol} = \frac{2(\Gamma_{mol} - \Lambda_{mol})}{3nk} + \frac{\Theta_{ch}}{3nk} + \frac{2T_c}{3n} \left( \frac{dn}{dt} \right)_{ch}. \quad (7)$$

En la última ecuación  $\Gamma_{mol}$  y  $\Lambda_{mol}$  son las funciones de calentamiento y enfriamiento, respectivamente.  $\Theta_{ch}$  es la función del calentamiento y enfriamiento debido a reacciones químicas que tienen entalpía  $\Delta H_k$ . Por lo tanto tenemos para  $\Theta_{ch}$ ,

$$\Theta_{ch} = \sum_m R_{ijk} n_i n_j \Delta H_m, \quad (8)$$

donde se suma sobre todas las reacciones químicas.

El factor  $(dn/dt)_{ch}$  que aparece en el último término de la Ec. (7) es el cambio de densidad del gas primordial para reacciones químicas que cambian las abundancias (por ejemplo  $A + B \rightarrow C$ , o  $A + B \rightarrow C + D + E$ ).

La Ec. (6) se puede obtener directamente de la relación

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{2}{3n} \frac{dn}{dt} + \text{otras fuentes de la temperatura}, \quad (9)$$

donde

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dt} = -3H_0 (1+z) \sqrt{1+\Omega_0 z} + \frac{1}{n} \left( \frac{dn}{dt} \right)_{ch} \quad (10)$$

es el cambio de la densidad con el tiempo debido a la expansión del Universo y a las reacciones químicas de intercambio entre especies (segundo término).

La solución a las Ecs. (4), (6) y  $T_r = T_{CMBR}(1+z)$  proporciona la respuesta al problema del cálculo de la abundancia de moléculas cosmológicas como función de  $z$ . Sin embargo, presenta el inconveniente de que se requiere una gran cantidad de tiempo de cómputo para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales rígidas (4).

### 3. Los calculos numéricos de la cinética molecular

Los cálculos se han efectuado para un Universo con parámetros  $\Omega_0 = 1$ ,  $\Omega_b = 0.1$ ,  $H_0 = 65 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$ , con  $n_{tot} = \Omega_b n_{cr}$ , donde  $n_{cr} = 9.19 \times 10^{-6} h^2 \text{ cm}^{-3}$  es la densidad crítica. Las velocidades de las reacciones  $R_{ijk}$  y  $R_{ij}$  en la Ec. (4) están dadas por la expresión

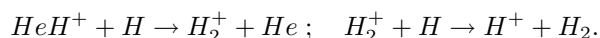
$$R_{ij}; R_{ijk} = \gamma \left( \frac{T}{300} \right)^\alpha \exp \left\{ -\frac{\beta}{T} \right\}, \quad (11)$$

donde los parámetros  $\gamma$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  se presentan en las Tablas I, II y III para el hidrógeno, carbono y oxígeno respectivamente.  $T$  es la temperatura cinética  $T_c$  para el caso de  $R_{ijk}$  (reacciones de choques) y es igual a la temperatura de radiación para el caso de  $R_{ij}$  (procesos radiativos). La leyenda  $a(b)$  en las tablas, significa  $a$  multiplicado por 10 a la potencia  $b$ .

Se debe enfatizar que los términos que aparecen en las Ecs. (7) y (10), que dan el cambio de la temperatura cinética debido a procesos químicos (aquellos que tienen subíndice  $ch$ ), sólo son significativos para especies abundantes (tales como  $H_2$  y  $HD$ ). Para las especies que se calculan en este trabajo ( $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$ ,  $OH^+$ , ...) los términos que aparecen en el lado derecho de la Ec. (7) son pequeños (debido a sus bajas abundancias) y por lo tanto pueden ser ignorados. Por lo que es suficiente con que se consideren funciones de enfriamiento y calentamiento correspondientes a especies ligeras.

Para realizar estos cálculos se utilizan valores iniciales de  $H$  y  $He$ , con abundancias acordes con el modelo estándar (ver por ejemplo la Ref. 24). No se consideran elementos como el  $D$  y el  $Li$ , ya que por un lado, no participan en la formación de las moléculas que se están considerando (como  $CH$ ,  $CH^+$ ,  $OH$ ,  $OH^+$  y otras más complejas), ni tampoco en la del hidrógeno molecular. Por otro lado, las abundancias moleculares basadas en el deuterio y el litio son sumamente importantes y merecen ser investigadas de forma independiente. Existe varios trabajos donde este tema ya ha sido tratado (ver, por ejemplo la Ref. 10, y algunas otras referencias que allí se mencionan).

De cualquier forma, el helio sí tiene que ser incluido en los cálculos, ya que la molécula  $HeH^+$  juega un papel importante en la formación del hidrógeno molecular  $H_2$ , mediante cadenas de reacciones tales como:



En la Tabla I se muestran los parámetros (velocidades) de los procesos elementales que se requieren para hacer el

TABLA I. En esta tabla se presentan los parámetros de las velocidades de reacción que se requieren para hacer el cálculo de las abundancias de las moléculas basadas en H y He. Las columnas 2-6 nos especifican las especies que participan en cada reacción. Las velocidades de reacción se calculan de acuerdo con la expresión (11), en término de los parámetros  $\gamma$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  que aparecen en las columnas 7, 8 y 9, respectivamente. La columna 10 nos da el valor de la entalpía. Por último la columna 11 nos dice la cita de dónde fueron tomados los valores.

N	Reaction				$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta$ H	Cita
1	H+	e-	H	$\gamma$	3.61(-12)	-.75	.00		[27]
2	H	e-	H-	$\gamma$	3.00(-16)	1.00	.00		[28]
3	H	H+	H2+	$\gamma$	1.80(-18)	1.5	.00		[29], [30]
4	H-	H+	H	H	2.30(-07)	-0.50	.00		[31]
5	H-	H+	H2+	e-	8.83(-15)	-0.32	.00		[31]
6	H-	H	H2	e-	1.50(-09)	.00	.00		[32]
7	H2	e-	H	H	e-	1.11(-10)	0.50	139000.00	[33]
8	H2	H+	H2+	H	3.00(-10)	.00	21050.00	-1.827	[34]
9	H2	H	H	H	H	1.16(-07)	-0.50	51944.00	
10	H2	H2+	H3+	H	2.08(-09)	.00	.00	1.694	[35]
11	H2+	e-	H	H	1.68(-08)	-0.29	.00	10.947	[33]
12	H2+	H	H+	H2	6.40(-10)	.00	.00	1.827	[36]
13	H2+	H-	H2	H	2.30(-07)	-0.50	.00		[27]
14	H2+	H2	H3+	H	2.08(-09)	.00	.00	1.694	[35]
15	H3+	e-	H2	H	1.50(-07)	-.50	.00	9.252	[37]
16	H3+	H	H2+	H2	2.08(-09)	.00	19700.00	-1.694	[38]
17	H2+	$\gamma$	H+	H	1.63(07)	.00	32400.0		[39]
18	H-	$\gamma$	H	e-	1.35(04)	2.4	8750.0		[40]
19	HE	H+	HEH+	$\gamma$	1.00(-20)	.00	.00		[41]
20	HEH+	e-	HE	H	2.00(-08)	-0.50	.00		[42]
22	HEH+	H	H2+	HE	9.10(-10)	.00	.00		[36]
23	HEH+	H2	H3+	HE	1.26(-09)	.00	.00		[43]
24	HEH+	$\gamma$	H+	HE	3.53(03)	1.5	22750.00		[44]

cálculo de las abundancias moleculares que involucran únicamente al hidrógeno y al helio. Para integrar los parámetros de las reacciones contenidas en la Tabla I, se han utilizado los datos más recientes encontrados en la literatura (ver la cita en la última columna). Para calcular las abundancias de las moléculas basadas en el carbono y el oxígeno, además de la Tabla I, se utilizan, respectivamente, los parámetros contenidos en las Tablas II y III.

Antes de utilizar el programa para resolver los problemas centrales que se plantean en este trabajo, se hicieron cálculos para probar el método numérico y el programa para un caso bien conocido. El primer cálculo consistió en encontrar las abundancias de las moléculas compuestas por H y He más importantes. De hecho, estos cálculos efectuados principalmente para verificar el programa poseen también un interés científico, ya que al usar datos más recientes y confiables para describir los procesos elementales, podrían haberse encontrado diferencias entre nuestros resultados y los que ya han sido reportados por otros investigadores. Los resultados de la solución numérica a este problema de las abundancias de moléculas en un universo temprano, se pueden ver en la Fig. 1.

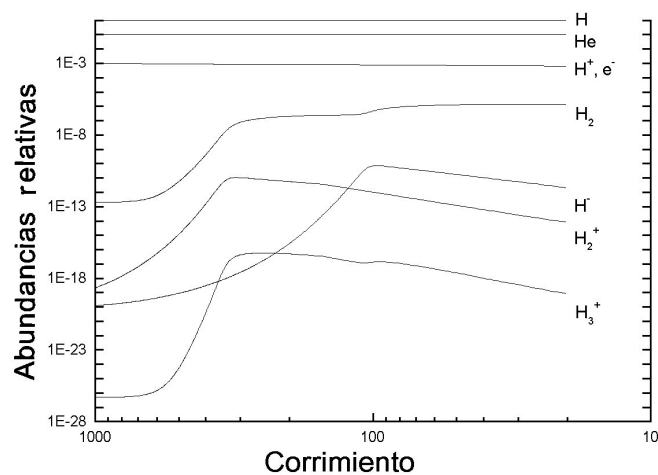


FIGURA 1. Abundancias relativas (medidas con respecto al hidrógeno) de moléculas primordiales dentro de un modelo estándar de Universo con parámetros  $\Omega_0 = 1$ ,  $\Omega_b = 0.1$ ,  $H_0 = 65 [km/(sMps)]$  y  $n_{cr} = 9.19 \times 10^{-6} h^2 [cm^{-3}]$ .

TABLA II. En esta tabla se presentan los parámetros de las velocidades de reacción que se requieren para hacer el cálculo de las abundancias de las moléculas basadas en el carbono (nota: para este cálculo deben también incluirse las reacciones de la Tabla I). Las columnas 2-5 nos especifican las especies que participan en cada reacción. Las velocidades de reacción se calculan de acuerdo con la expresión (11), en término de los parámetros  $\gamma$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  que aparecen en las columnas 6, 7 y 8, respectivamente. La columna 9 nos da el valor de la entalpía. Los valores fueron tomados de la Ref. 25.

N	Reaction				$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta H$
1	C	H	CH	PHOTON	1.00(-17)	.00	.00	
2	C	H2	CH	H	1.16(-09)	.50	14100.00	-1.008
3	CH	H2	CH2	H	2.38(-10)	.00	1760.00	-0.170
4	CH	H	C	H2	1.16(-09)	.50	2200.00	1.008
5	CH2	H	CH	H2	4.70(-10)	.00	370.00	.170
6	C+	H	CH+	PHOTON	7.00(-17)	.00	.00	
7	C+	H2	CH2+	PHOTON	4.00(-16)	-.20	.00	
8	C+	H2	CH+	H	1.50(-10)	.00	5000.00	-0.387
9	CH+	H	C+	H2	8.00(-10)	.00	.00	.387
10	CH+	H2	CH2+	H	1.20(-09)	.00	.00	.189
11	CH2+	H	CH+	H2	1.20(-09)	.00	2700.00	-0.189
12	H+	CH	CH+	H	1.90(-09)	.00	.00	2.956
13	H+	CH2	CH+	H2	1.40(-09)	.00	.00	3.126
14	H+	CH2	CH2+	H	1.40(-09)	.00	.00	3.316
15	H2+	C	CH+	H	2.40(-09)	.00	.00	3.775
16	H2+	CH	CH+	H2	7.10(-10)	.00	.00	4.783
17	H2+	CH	CH2+	H	7.10(-10)	.00	.00	4.972
18	H2+	CH2	CH2+	H2	1.00(-09)	.00	.00	5.143
19	H3+	C	CH+	H2	2.00(-09)	.00	.00	2.081
20	H3+	CH	CH2+	H2	1.20(-09)	.00	.00	3.278
21	C+	ELECTR	C	PHOTON	4.00(-12)	-.61	.00	
22	CH+	ELECTR	C	H	2.89(-07)	-.50	.00	7.172
23	CH2+	ELECTR	CH	H	2.50(-07)	-.50	.00	5.974
24	CH2+	ELECTR	C	H2	2.50(-07)	-.50	.00	6.982

Después de inspeccionar las curvas de abundancias, encontramos que nuestros resultados coinciden bastante bien con los de otros autores [10] para las especies más importantes ( $H_2$ ,  $H^-$ ,  $H_2^+$ ,  $H_3^+$ ...). Con lo cual puede concluirse que los resultados con parámetros más recientes para secciones transversales y velocidades de reacción no muestran cambios significativos para los cálculos a bajas temperaturas ( $T_c < 1000$ ) prevalentes en épocas pregalácticas con  $z < 400$ .

El resultado del cálculo de las abundancias de  $CH$  y  $CH^+$  se puede ver en la Fig. 2. El cálculo se hizo utilizando los parámetros de procesos elementales dados en las Tablas I y II para hidrógeno con helio y carbono [25]. La Tabla 2 incluye a moléculas y iones más complejos, tales como  $CH_2$ ,  $CH_2^+$ . Con el propósito de explorar que moléculas son las más relevantes, también se incluyeron a la lista especies tales como  $CH_n$ ,  $CH_n^+$ ,  $C_2$ ,  $C_2^+$ , etc.. Pero todas las especies complejas resultaron tener abundancias relativas tan

pequeñas, que no fue necesario seguir considerandolas dentro del juego de reacciones más importantes.

La Fig. 2 muestra una abundancia relativa bastante grande de  $CH$  ( $\approx 10^{-15}$ ), aún cuando los cálculos fueron hechos con un parámetro inicial  $[C]/[H] = 10^{-10}$ , el cual es un tanto conservador dentro de los valores que predicen los modelos de NBBN ( $[C]/[H]$  llega a ser hasta  $10^{-9}$ ). Por lo que el valor de  $[CH]/[H]$  expresado anteriormente es un límite inferior aun para el caso del gas homogéneo. Pero dentro de una protoestrella, donde la densidad del gas es mucho mayor, la cinética molecular debe cambiar y puede esperarse que la abundancia molecular que entra en la expresión de la profundidad óptica alcance un valor aun mayor y nuestro resultado en este caso es una estimación a un valor mínimo (límite inferior).

Como puede observarse en las Tablas II y III, el número de reacciones para el carbono y el oxígeno son 24 y 20, res-

TABLA III. Esta tabla es muy similar a la Tabla II, la única diferencia es que aquí se presentan los parámetros de las velocidades de reacción que se requieren para hacer el cálculo de las abundancias de las moléculas basadas en el oxígeno. Los valores fueron tomados de la Ref. 25.

N	Reaction				$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta H$
1	O	H2	OH	H	1.55(-13)	2.80	2980.00	-.082
2	OH	H	O	H2	7.00(-14)	2.80	1950.00	.082
3	OH	H2	H2O	H	9.54(-13)	2.00	1490.00	.638
4	H2O	H	OH	H2	5.24(-12)	1.90	9265.00	-.638
5	O+	H	H+	O	6.00(-10)	.00	.00	.020
6	O+	H2	OH+	H	1.20(-09)	.00	.00	.536
7	OH+	H2	H2O+	H	1.01(-09)	.00	.00	1.026
8	OH+	H	O+	H2	1.20(-09)	.00	4060.00	-.536
9	H2O+	H	H+	H2O	8.20(-09)	.00	11460.00	-.987
10	H+	O	O+	H	6.00(-10)	.00	227.00	-.020
11	H+	OH	OH+	H	2.10(-09)	.00	.00	.599
12	H+	H2O	H2O+	H	8.20(-09)	.00	.00	.987
13	H2+	O	OH+	H	1.50(-09)	.00	.00	2.344
14	H2+	OH	OH+	H2	7.60(-10)	.00	.00	2.426
15	H2+	H2O	H2O+	H2	3.90(-09)	.00	.00	2.814
16	H3+	O	OH+	H2	8.00(-10)	.00	.00	.650
17	H3+	OH	H2O+	H2	1.30(-09)	.00	.00	1.758
18	O+	ELECTR	O	PHOTON	3.40(-12)	-.63	.00	
19	OH+	ELECTR	O	H	7.50(-08)	-.50	.00	8.603
20	H2O+	ELECTR	OH	H	4.00(-07)	-.50	.00	7.494

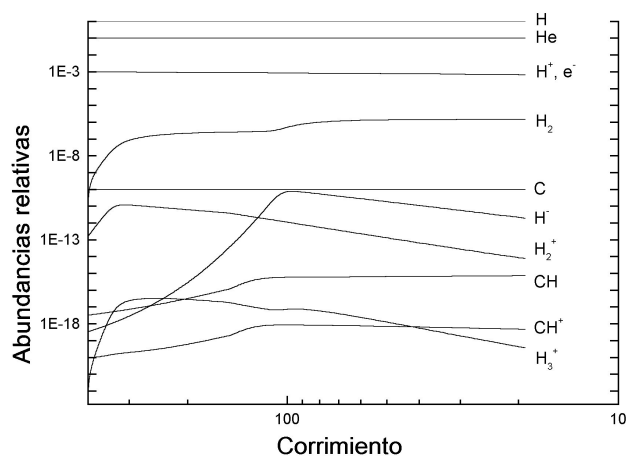


FIGURA 2. Abundancias relativas (medidas con respecto al hidrógeno) de moléculas compuestas de carbón, adoptando un modelo NBBN de Universo con los mismos parámetros que en la Fig. 1, pero suponiendo  $[C]/[H] = 10^{-10}$ .

pectivamente. El método numérico y el programa elaborado no tienen ninguna restricción sobre el número de especies o el de las reacciones. Tampoco existen restricciones relacionadas con el tiempo de cálculo. Pero como no existe la necesidad de encontrar abundancias para las especies comple-

jas, por ser tan pequeñas y de poco interés para este estudio, podemos cortar la Tabla II y dejar sólo las reacciones más importantes. A este grupo de reacciones lo definimos como juego minimal. Para este trabajo, las especies de mayor interés son  $C$ ,  $C^+$ ,  $CH$  y  $CH^+$ . También es útil encontrar los canales más importantes de formación y destrucción de dichas especies. El hacer este ejercicio resulta ser valioso a la hora de analizar e interpretar los resultados de los cálculos. Al juego minimal se le exige que nos de un error que no resulte ser mayor al 5 % con respecto a los resultados exactos. Para  $H$ ,  $D$ ,  $Li$  los juegos minimales se ofrecen en la Ref. 10. En este trabajo discutiremos la cinética de las moléculas diatómicas para el carbono y el oxígeno.

El juego minimal para el carbono está constituido por las 8 reacciones representadas en la Fig. 3. La notación  $A(B, C)D$  denota a una reacción  $A + B \rightarrow C + D$  (tal como se usa comúnmente en física nuclear), donde las especies  $A$  y  $D$  son las de mayor interés en nuestro caso, por contener al carbono. En esta figura únicamente se incluyen los canales más rápidos y fuertes, que controlan (definen) las abundancias relativas de  $C$ ,  $C^+$ ,  $CH$  y  $CH^+$ .

Para poder comparar las velocidades, debe fijarse la temperatura, lo cual puede hacerse más cómodamente tomando  $T_c = 300K$ , que corresponde a  $z \approx 100$ . Se puede ver que

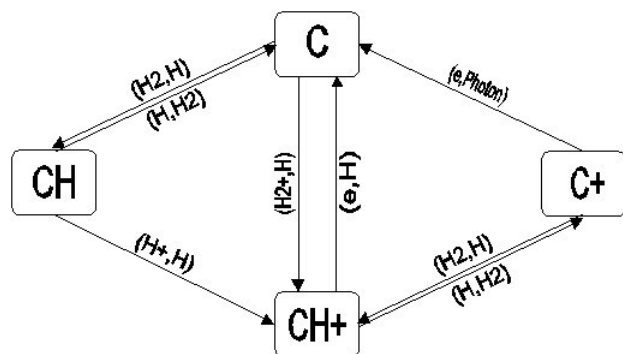


FIGURA 3. Juego minimal para el carbón, compuesto por las 8 reacciones más rápidas que determinan las abundancias relativas de  $C$ ,  $C^+$ ,  $CH$ , y  $CH^+$ .

el canal de formación de  $CH$  es una reacción  $C(H_2, H)CH$  que en nuestro caso (para  $z \approx 100$ ) tiene la velocidad total

$$[C][H_2]R_{C,H_2,CH} = 10^{-10}10^{-6}10^{-9} = 10^{-25} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1},$$

donde  $[X]$  ha sido redefinida como la abundancia relativa al hidrógeno (con el propósito de abreviar escritura). La molécula  $CH$  se destruye más rápidamente mediante su reacción inversa  $CH(H, H_2)C$  que tiene la velocidad total

$$[CH][H]R_{CH,H,C} = 10^{-15}10^{-9} = 10^{-24} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}.$$

La formación de  $CH^+$  se debe a dos canales competitivos:  $CH(H^+, H)CH^+$  con velocidad total

$$[CH][H^+]R_{CH,H^+,CH^+} = 10^{-27} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1},$$

y  $C(H_2^+, H)CH^+$  con velocidad

$$[C][H_2^+]R_{C,H_2^+,CH^+} = 2 \times 10^{-30} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$$

(tenemos que considerar este canal, porque la primer reacción depende de  $[CH]$  y, por lo tanto, de  $z$ ).

Es muy importante enfatizar que no existe una reacción inversa para  $CH(H^+, H)CH^+$ . Como se explica en la Ref. 36, esta reacción no fue detectada con un valor de velocidad menor que  $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  (y la velocidad de proceso directo es  $R_{CH,H^+,CH^+} = 10^{-9}$ ). Por lo tanto podemos concluir que existen tres ciclos de flujo para el carbono:

- 1)  $C \rightarrow CH \rightarrow C$ ,
- 2)  $C \rightarrow CH \rightarrow CH^+ \rightarrow C$  y
- 3)  $C \rightarrow CH \rightarrow CH^+ \rightarrow C^+ \rightarrow C$ .

Como se verá más adelante, para el caso del oxígeno el resultado es completamente similar y no conduce a cambios substanciales, cuando la abundancia de  $OH^+$  es mayor que la de  $OH$ .

La química molecular del oxígeno aplicado al universo temprano fue discutido por primera vez por Dubrovich [26] para el caso de la molécula de  $H_2O$ . Esta molécula es muy

estable (el potencial de ionización es igual a 12.6 eV) y por lo tanto, como fue mencionado en el artículo de Dubrovich, podría esperarse que la abundancia relativa fuera bastante grande para esta molécula en el caso de NBBN, o después de la evolución de las primeras estrellas, cuando la densidad del carbono, oxígeno y nitrógeno aumentaron considerablemente. Por lo tanto los cálculos de cinética de las moléculas basadas en oxígeno son de gran interés.

En este trabajo calculamos las abundancias de  $OH$ ,  $OH^+$ ,  $H_2O$ ,  $H_2O^+$  utilizando los parámetros de las Tablas I y III. Como se hizo para el caso del carbono, también para el oxígeno se consideraron moléculas y iones complejos. Pero los cálculos han mostrado que las abundancias de dichas especies resultan ser insignificantes y por esta razón han sido excluidas del juego minimal.

La Fig. 4 muestra las abundancias de  $OH$  y  $OH^+$  como función de  $z$ . No se incluyen en la figura las abundancias calculadas para  $H_2O$ , porque resultaron ser insignificantes (alcanzan un valor máximo en  $z = 290$ , como  $[H_2O]/[H] = 10^{-27}$ , y después se destruyen rápidamente hasta un valor inferior a  $10^{-30}$  para  $z < 30$ ).

Puede observarse que las moléculas o iones moleculares que forma el oxígeno en un universo homogéneo con abundancias significativas son el  $OH$  y el  $OH^+$ . La abundancia de  $OH^+$  es  $10^{-18}$  en la época  $z = 200$ , y para la molécula  $OH$  tenemos un valor aproximadamente tres órdenes de magnitud más pequeño.

Este resultado no es tan extraño como pudiera parecer a primera vista. De hecho, la pareja de moléculas  $LiH$  y  $LiH^+$  muestra un comportamiento muy similar. Como comentan Galli y Palla [10], la cinética de litio conduce a una abundancia del ion molecular  $LiH^+$ , que resulta ser más de dos órdenes de magnitud superior a la abundancia de la molécula neutra  $LiH$ .

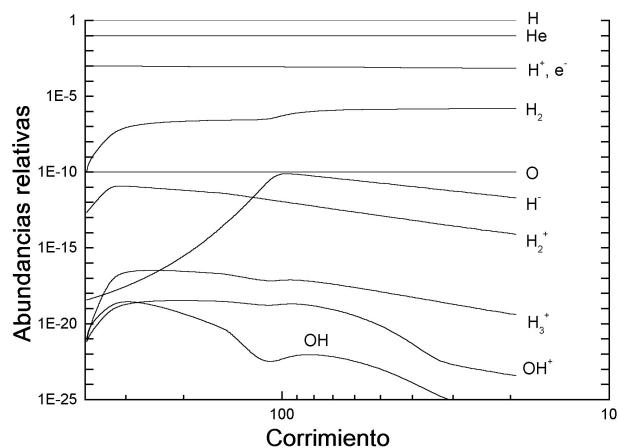


FIGURA 4. Abundancias relativas (medidas con respecto al hidrógeno) de moléculas compuestas de carbono, adoptando un modelo NBBN de Universo con los mismos parámetros que en la Fig. 1, pero suponiendo  $[O]/[H] = 10^{-10}$ .

Es fácil explicar este resultado con la ayuda de un modelo (juego) minimal compuesto de manera similar a la que se hizo para el carbono. En la Tabla III tenemos 20 reacciones para la cinética molecular del oxígeno, pero por ahora consideraremos sólo las 9 reacciones más importantes que se muestran en la Fig. 5.

Para comparar las velocidades, tal como se hizo en el caso anterior, se fija la temperatura cinética  $T_c = 300K$ . En este caso el canal de formación de  $OH$  es una reacción  $O(H_2, H)OH$  (tal como teníamos para  $CH$ ) con la velocidad total

$$[O][H_2]R_{O,H_2,OH} = 10^{-10}10^{-6}10^{-13} = 10^{-28}cm^3s^{-1}$$

(nótese que es cuatro órdenes de magnitud más pequeña que para el caso de la reacción  $C(H_2, H)CH$ ).

La molécula  $OH$  se destruye más rápidamente debido al proceso  $OH(H^+, H)OH^+$  con la velocidad total

$$\begin{aligned}[OH][H^+]R_{OH,H^+,OH^+} &= 10^{-21}10^{-32} \times 10^{-9} \\ &= 2 \times 10^{-33}cm^3s^{-1}.\end{aligned}$$

Y el canal  $OH(H, H_2)O$  es más débil, como por cuatro órdenes de magnitud en comparación con el caso del carbono, el cual tiene una velocidad total

$$[OH][H]R_{OH,H,O} = 10^{-21}7 \times 10^{-14} = 7 \times 10^{-35}cm^3s^{-1}.$$

El ion molecular  $OH^+$  está formando por dos canales competitivos. El canal más fuerte es  $O(H_2^+, H)OH^+$  con velocidad

$$[O][H_2^+]R_{O,H_2^+,OH^+} = 10^{-31}cm^3s^{-1},$$

y el más débil es  $OH(H^+, H)OH^+$  con una velocidad total

$$[OH][H^+]R_{OH,H^+,OH^+} = 2 \times 10^{-33}cm^3s^{-1}.$$

Como se ha hecho para el caso de  $CH$ , se tiene que tomar en consideración el primer canal.

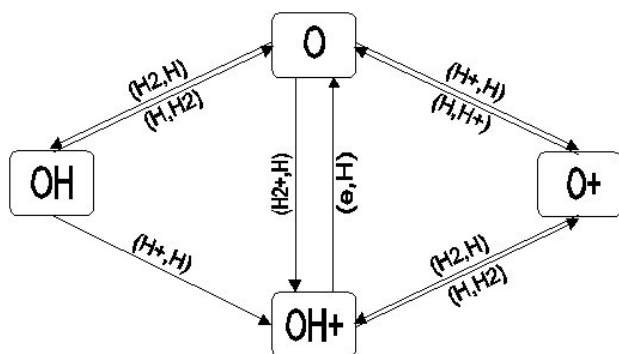
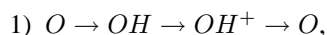


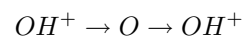
FIGURA 5. Juego minimal para el oxígeno, compuesto por las 9 reacciones más rápidas que determinan las abundancias relativas de  $O$ ,  $O^+$ ,  $OH$ , y  $OH^+$ .

La destrucción de  $OH^+$  se debe a los canales  $OH^+(H, H_2)O^+$  y  $OH^+(e, H)O$ , que tienen velocidades aproximadamente iguales, con un valor de  $10^{-27}$ . Como se encontró para la cinética del carbono, para el caso del oxígeno tampoco existe la reacción inversa para  $OH(H^+, H)OH^+$ . Esto puede explicarse de la siguiente manera: Usando el principio de balance detallado para los valores de procesos elementales y tomando en cuenta que las velocidades de reacciones  $CH \rightarrow CH^+$  y  $OH \rightarrow OH^+$  son iguales, se puede concluir que la velocidad del proceso  $OH^+(H, H^+)OH$  es también menor que  $10^{-11}$  (como se explica en el artículo de Karpas, Anicich y Huntress [36] para la reacción  $CH^+(H, H^+)CH$ ). Este valor da una velocidad total menor que  $10^{-29}cm^3s^{-1}$  para el proceso  $OH^+(H, H^+)OH$ , comparándolo con el valor  $10^{-27}$  para  $OH^+ \rightarrow O$  y  $OH^+ \rightarrow O^+$ , podemos concluir que es insignificante.

Por lo tanto, podemos concluir que existe una diferencia entre la cinética del carbono y la del oxígeno. En el caso del oxígeno tenemos dos ciclos de flujo:



De la cinética del oxígeno se puede concluir que la abundancia de  $OH^+$  está controlada por las reacciones



Con este resultado se pueden explicar los resultados para el oxígeno (que  $OH$  sea mucho menor que  $OH^+$ ).

Para concluir esta sección tenemos que enfatizar que el juego minimal ofrecido en las Figs. 3 y 5 se puede aplicar sólo para un universo temprano y homogéneo.

## 4. Conclusiones

1) Para calcular las abundancias relativas de las especies moleculares más conocidas se han utilizado los datos para velocidades de reacciones más recientes en la literatura. Se encuentra que a bajas temperaturas no hay un cambio significativo de las abundancias para las especies más importantes y que nuestros resultados concuerdan con los de otros autores (Fig. 1).

2) Se calculan por primera vez las abundancias de moléculas pesadas basadas en carbono y oxígeno que pudieron haber existido en cantidades significativas en la época pregaláctica, de acuerdo con modelos no-estándar de nucleosíntesis. Las abundancias han sido obtenidas para un gas homogéneo y con expansión, como solución a un conjunto de ecuaciones diferenciales (ecuaciones cinéticas para cada una de las especies junto con las ecuaciones para las temperaturas).

3) Las moléculas pesadas más abundantes (y por lo tanto más interesantes) en el universo homogéneo resultan ser  $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$ ,  $OH^+$ . El resto de las moléculas pesadas



que se observan en el medio interestelar no resultaron tener abundancias significativas.

4) La sugerencia de Dubrovich [26] de que la molécula  $H_2O$  es muy abundante en relación con otras moléculas pesadas, porque tiene una energía de disociación alta, resulta ser incorrecta para el caso del gas homogéneo en el universo temprano. Se ha encontrado que durante los procesos evolutivos estudiados no hay suficiente tiempo para formarlo en cantidades significativas y por lo tanto resultan ser más abundantes las moléculas que tienen energías de amarre más pequeñas, como es el caso de las moléculas  $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$ , y  $OH^+$ .

5) Se encuentra que la abundancia del ion molecular  $OH^+$  es más grande que la abundancia de la molécula neutra  $OH$ . Este resultado se debe a dos factores. El primero es que no existe (o bien, tiene una velocidad muy lenta) la reacción  $OH^+(H, H^+)OH$ . El segundo es que la reacción

de formación de  $OH$  por medio de  $O(H_2, H)OH$ , es muy débil (es cuatro órdenes de magnitud menor que la reacción  $CH^+(H, H^+)CH$  en el caso de carbón) y tiene una velocidad de  $10^{-13}$ , por lo que es muy difícil formar la molécula de  $OH$  en el universo temprano para el caso homogéneo.

6) Enfatizamos que en casos cuando existen inhomogeneidades en la densidad o en la temperatura de cualquier tipo (como es el caso de las protoestrellas), las abundancias moleculares deben ser mucho mayores y por lo tanto nuestros resultados son un límite inferior para las protonubes.

## Agradecimientos

Los autores agradecen al árbitro por sus comentarios y sugerencias, los cuales han ayudado a mejorar substancialmente este artículo.

1. F. Zwicky, *PASP* **71** (1959) 468.
2. W. Saslaw, D. Zipoy, *Nature* **216** (1967) 967.
3. P. J. E. Peebles, R. Dicke, *ApJ* **154** (1968) 891.
4. T. Hirasawa, K. Aizu, M. Taketani, *Prog. Theor. Phys.* **41** (1969) 835.
5. H. Takeda, H. Sato, T. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **41** (1969) 840.
6. T. Matsuda, H. Sato, H. Takeda, *Prog. Theor. Phys.* **41** (1969) 219.
7. S. Lepp, M. Shull, *ApJ* **280** (1984) 465.
8. W. Latter, J. Black, *ApJ* **372** (1991) 161.
9. D. Puy *et al.*, *Astron. Astroph.* **267** (1993) 337.
10. D. Galli, F. Palla, *Astron. Astroph.* **335** (1998) 403.
11. P. Stancil, S. Lepp, A. Dalgarno, *ApJ* **509** (1998) 1.
12. V. K. Dubrovich, *Astron. Astroph. Transactions* **5** (1994) 57.
13. P. De Bernardis *et al.*, *Astron. Astroph.* **271** (1993) 683.
14. M. Signore *et al.*, *ApJ supp* **92** (1994) 535.
15. P. De Bernardis *et al.*, *Nature* **404** (2000) 955.
16. A. Jaffe *et al.*, astro-ph/0007333 (2000).
17. R. Stompor, *et al.*, *ApJ* **561** (2001) L7.
18. C. Pryke, *et al.*, astro-ph/0104490 (enviado a la *ApJ*) (2001).
19. S. Burles, K. Nollett, M. Turner, astro-ph/0008495 (2000).
20. T. Rauscher, J. H. Applegate, J. J. Cowan, F. K. Thielemann, H. Wiescher, *ApJ* **429** (1994). 499.
21. R. A. Malaney, G. J. Mathews, *Phys. Rep.* **229** (1993) 145.
22. S. Sarkar, *Rept. Prog. Phys.* **59** (1996) 1493.
23. J. Silk, *Ap. J.* **211** (1977) 638.
24. M. S. Smith, L. H. Kawano, R. A. Malaney, *ApJS* **85** (1993) 219.
25. J. Le Bourlot, G. Pineau des Forêts, E. Roueff, D. R. Flower, *Astron. Astrophys.*, **267** (1993) 233.
26. V. K. Dubrovich, *Proceeding of the IAU Symp.* No 178 (Leiden, The Netherlands, 1996).
27. S. S. Prasad, W. T. Huntress, *ApJS* **43** (1980) 1.
28. T. de Jong, *Astron. Astroph.* **20** (1972) 263.
29. D. E. Ramaker, J. M. Peek, *Phys. Rev. A* **13** (1976) 58.
30. P. C. Stancil, J. F. Babb, A. Dalgarno, *ApJ* **414** (1993) 672.
31. G. Poulaert, F. Brouillard, W. Claeys, J. W. McGowan, G. Van Wassenhove, *J. Phys. B* **11** (1978) L671.
32. J. M. Launay, M. Le Dourneuf, C. J. Zeippen, *Astron. Astroph.* **252** (1991) 842.
33. I. F. Schneider, O. Dulieu, A. Giusti-Suzor, E. Roueff, *ApJ* **424** (1994) 983 (errata in *ApJ* 486, 580).
34. M. G. Holliday, J. T. Muckerman, L. Friedman, *J. Chem. Phys.* **54** (1971) 1058.
35. L. P. Theard, W. T. Huntress, *J. Chem. Phys.* **60** (1974) 2840.
36. Z. Karpas, V. Anicich, W. T. Huntress, *J. Chem. Phys.* **70** (1979) 2877.
37. G. Sundström, J. R. Mowat, H. Danared *et al.*, *Science* **263** (1994) 785.
38. K. S. Sidhu, S. Miller, J. Tennyson, *Astron. Astroph.* **255** (1992) 453.

- 39. F. Von Busch, G. H. Dunn, *Phys. Rev. A* **5** (1972) 1726.
- 40. A. W. Wishart, *MNRAS* **187** (1979) 59.
- 41. M. Kimura, N. F. Lane, A. Dalgarno, R. G. Dixson, *ApJ* **405** (1993) 801.
- 42. F. B. Yousif, J. B. A. Mitchell, *Phys. Rev. A* **40** (1989) 4318.
- 43. O. J. Orient, *Chem. Phys. Lett.* **52** (1997) 264.
- 44. W. Roberge, A. Dalgarno, *ApJ* **255** (1982) 489.