

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica II



**COMPLEJIDAD QUÍMICA EN LAS NUBES
MOLECULARES DEL CENTRO DE LA GALAXIA**

**MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR**

Miguel Ángel Requena Torres

Bajo la dirección del doctor
Jesús Martín-Pintado Martín

Madrid, 2007

- **ISBN: 978-84-669-3036-9**

Trabajo de Tesis

Complejidad química en las nubes moleculares del centro de la Galaxia

Miguel Angel Requena Torres

Programa de Doctorado “Astrofísica y Ciencias de la Atmósfera”

Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica II

Facultad de Ciencias Físicas

Universidad Complutense de Madrid

Madrid, 2007

Complejidad Química en las nubes moleculares del centro de la Galaxia

TESIS DOCTORAL realizada por:

Miguel Angel Requena Torres

DIRECTOR

Prof. Jesús Martín-Pintado Martín

Departamento de Física de la Tierra, Astronomía y Astrofísica II
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense de Madrid
Consejo Superior de Investigaciones Científicas
Instituto de Estructura de la Materia
Departamento de Astrofísica Molecular e Infrarroja

TUTOR: Prof. Jesús Gallego Maestro

Madrid, 2007

Preface

The physical and the chemical properties of the molecular clouds in center of the Galaxy are very different than those in the Galactic disk. The Galactic center (GC), a very outstanding region, where very extreme physical processes are taken place, constitutes an unique laboratory for studying the effects on the chemical complexity produced by the energetic events like supernova remnants, photo-dominated regions, highly turbulent medium, high mass star formation or the presence of a black hole. One of the more interesting processes is the presence of widespread shocks, that produce a dramatic change of the gas phase abundances by the ejection of complex molecules from the grain mantles. This affects the chemistry in those regions, like happens in the hot molecular cores where the grain mantles are evaporated due to the high temperatures produced by the proto-stars. There are also regions in the GC where the photo-dissociation of molecules by the UV radiation from clusters of massive stars strongly change the chemistry.

The IRAM 30-m and the Green Bank telescopes have been used to establish that the limit of the chemical complexity in the Universe is found in the GC. Therefore the GC is one of the best laboratories to study the properties of the chemistry of the complex organic molecules (COMs). In this work several regions distributed in a 200 pc region along the Galactic plane have been studied in detail. The COMs studied in this work, containing mainly C, O and H, cover several families, like the alcohols or the aldehydes containing up to 3 carbon atoms.

It has been found that these COMs show very large abundances respect to H_2 in the GC regions, even higher than the observed in Galactic hot cores. The abundances of the COMs seem to be affected also by the photo-dissociation regions producing different trends in the abundances of some molecules when the clouds are affected by the UV radiation from the stellar clusters in the GC.

The relative abundances between COMs found in the GC are constant within a factor of ~ 4 in all the GC regions, discarding the chemical evolution predicted by several chemical models in gas phase. We propose that all the COMs are ejected from the grain mantles by shocks. For the alcohols related molecules we also find similarities between the abundances in the GC regions and in hot molecular cores that initially lead us to propose that there is an “Universal” grain mantle composition in the whole Galaxy for molecules bearing 2 carbon atoms.

The comparison with other regions in the Galactic disk that contain MOCs like the hot cores associated with low mass star formation (hot corinos), show clear differences. These could no be explained by the different composition of the grain mantles in dark clouds that harbor low-mass star formation. Likely the differences are due to chemical processes that can be produced in the more internal regions of the hot corino during the star formation.

In the study of more complex molecules such as aldehydes with 3 carbon atoms we also find large abundances and similar relative abundances between MOCs in the GC

molecular clouds. The saturation of the molecules by hydrogenation on the grain mantles seems to be very efficient in the GC clouds. The chemistry driving the formation of these large molecules seems to be different in hot cores and in the GC molecular clouds, based on the comparison of related molecules like the isomers or the aldehyde/alcohol pairs in these two kind of objects. For the most complex COMs we do not find a “Universal” grain mantle composition in the whole Galaxy. However we do find a “Uniform” mantle composition for the GC clouds. The chemical complexity found in the molecular clouds in the GC regions make this region one of the best for the detection of even more complex molecules.

In the search of molecular tracers for different types of chemistry in external galaxies, we have found that HNCO seems to be a very good tracer for the study of the photodissociation regions within the center of our Galaxy. This molecule, due to its simple spectra and its large abundances in external galaxies can be used to establish the importance of the UV heating of the ISM in the nuclei of galaxies.

The results obtained in this work open several lines of investigations that have been just started, useful for the understanding of the physics and the chemistry that control the large chemical complexity found in the molecular clouds in the inner part of our Galaxy.

Agradecimientos

Muchas han sido las personas que han aportado su pequeño granito de arena al trabajo al que he dedicado cuatro años de mi vida y que se presenta en esta tesis. No sólo me refiero a la parte científica, sino en la faceta personal. Pero no puedo incluir aquí el nombre de cada uno de los que me han aportado algo, ya que la lista sería muy larga. A todos los que he conocido en este tiempo les agradezco lo que han hecho por mi.

Sí quiero poner un poco de énfasis en los que han pasado más tiempo conmigo y que han gozado y sufrido de mi persona. Entre ellos, en primer lugar debo agradecer a mi director, el Prof. Jesús Martín-Pintado, por toda su ayuda para que este trabajo saliese adelante. Se que más de una vez le habré dado dolores de cabeza y problemas, pero su, cada vez más cercana, presencia ha hecho que me gusten mucho la radioastronomía y las moléculas que inicialmente eran extrañas y confusas para mi. Agradezco también al Prof. Jesús Gallego su ayuda como tutor y enlace dentro de la Universidad Complutense de Madrid.

Y cómo no, quisiera agradecer su ayuda, comentarios y buenos ratos a todas y cada una de las personas que han formado parte en algún momento del DAMIR, a su director José Cernicharo; a los miembros de mi grupo Izaskun, Arturo, Arancha, David y Eduardo; a los que se quedan, Carmen, Almudena, M^a Luisa, Alicia, Paco, Juan Ramón, Luis, Santiago y Alvaro; a los que se van dentro de poquito, Helena, Belén, Tanio, Marce; a los que acaban de llegar, Nuria, Fabian, Julia, Alejandro, Michael; y a los que ya se han ido, Pablo, Chusa, Fabrice, Javi Goicoechea, Javi Corrales, Irma, David Tessier, Laura, Angela y Luis Merino. Quiero recordar también aquí a mis colaboradores y colegas como Nemesio, Sergio, Bérengère y Silvia, con los que he compartido muy buenos momentos y muchas dudas. Y también quiero recordar a las personas de UCLA y del MPIfR que me acogieron durante varios meses y que me trataron muy bien, sobre todo agradezco a Mark Morris y a Karl Menten que me ofrecieran la oportunidad de trabajar con ellos por unos meses.

Y por último y quizás a los que más les debo. Quiero agradecer a mi familia, la posibilidad de haber llegado hasta aquí y sobre todo quiero agradecer a Maca su ayuda y apoyo en los buenos y en los malos momentos de este camino que hemos recorrido juntos.

Finalmente, debo agradecer al Ministerio de Educación y Ciencia por la beca financiada por el Plan de Formación de Personal Investigador (Convocatoria de becas predoctorales del año 2003)

Miguel Angel Requena Torres
Madrid, 2007

Índice de Materias

Portada	i
Agradecimientos	1
Índice de Materias	1
Acrónimos	3
I Introducción	5
1 El centro Galáctico	7
1.1 Distribución general del gas molecular	7
1.2 Estructuras morfológicas del centro Galáctico	8
1.3 Contenido estelar	13
1.4 Cinemática	14
1.5 Condiciones físico-químicas del gas neutro	17
2 Química de las moléculas orgánicas complejas	25
2.1 Introducción	25
2.2 Reacciones químicas del medio interestelar	26
2.3 Modelos químicos	36
2.4 Química típica de diferentes regiones del medio interestelar	39
2.5 Química de las moléculas orgánicas complejas (MOCs)	44
II Química de choques en centro de la Vía Láctea	53
3 Química de los alcoholes	55
3.1 Introducción	55
3.2 Observaciones	56
3.3 Resultados	58
3.4 Análisis de los datos	59
3.5 Comparación con objetos del disco Galáctico	73
3.6 Discusión	77
3.7 Conclusiones del capítulo	89
4 Los primeros estadios de la química de choques	91
4.1 Introducción	91
4.2 Fuentes	92
4.3 Observaciones	93

4.4	Resultados	93
4.5	Discusión	99
4.6	Conclusiones del capítulo	101
III	En los límites de la complejidad química en el centro Galáctico	103
5	Química de los aldehídos, isomerización y saturación de las moléculas en el CG	105
5.1	Introducción	105
5.2	Observaciones y análisis de datos	107
5.3	Discusión	114
5.4	Conclusiones	120
IV	Del centro Galáctico a otros centros de galaxias	123
6	Trazadores químicos en galaxias	125
6.1	Introducción	125
6.2	Observaciones y resultados	127
6.3	Razones de abundancia de HNCO	132
6.4	Del centro Galáctico a otras galaxias	137
6.5	Conclusiones	140
7	Conclusiones y Perspectivas	141
7.1	Conclusions	141
7.2	Perspectives	143
A	Propiedades espectroscópicas de las moléculas orgánicas complejas	145
A.1	Generalidades	145
A.2	Moléculas con rotaciones internas	146
A.3	Propiedades espectroscópicas de algunas moléculas	152
B	Función de Partición-Q	169
C	Parámetros observacionales del capítulo 3	171
	Bibliografía	189
	Figuras y Tablas	201
	Lista de Figuras	201
	Lista de Tablas	204

Acrónimos

A&A	<i>Astronomy and Astrophysics</i>
A&AS	<i>Astronomy and Astrophysics Series</i>
AJ	<i>Astronomical Journal</i>
ApJ	<i>Astrophysical Journal</i>
ApJS	<i>Astrophysical Journal Series</i>
ARA&A	<i>Annual Review of Astronomy and Astrophysics</i>
ATR	<i>Arcos Térmicos en Radio (Thermal radio arches)</i>
CG	<i>Centro Galáctico</i>
CLASS	<i>Continuum and Line Analysis Single-dish Software</i>
DG	<i>Disco Galáctico</i>
ETL	<i>Equilibrio Termodinámico Local</i>
FNT	<i>Filamento No Térmico</i>
FT	<i>Filamento Térmico</i>
GBT	<i>Green Bank Telescope</i>
GILDAS	<i>Grenoble Image and Line Data Analysis System</i>
IAU	<i>International Astronomical Union</i>
IR	<i>InfraRed (Infrarrojo)</i>
IRAM	<i>Institut de Radio-Astronomie Millimétrique</i>
LSR	<i>Local Standard of Rest (Sistema de referencia local)</i>
MHD	<i>MagnetoHidroDinámico</i>
MI	<i>Medio Interestelar</i>
MNRAS	<i>Monthly Notices of the Royal Astrophysics Society</i>
MOCs	<i>Moléculas Orgánicas Complejas</i>
LVG	<i>Large Velocity Gradient (Gran gradiente de velocidad)</i>
PDR	<i>Photo-Dissociation Region (Región de fotodisociación)</i>
RIL	<i>Resonancia Interna de Lindblad</i>
Sgr	<i>Sagitario</i>
MHD	<i>MagnetoHidroDinámico</i>
UV	<i>UltraVioleta</i>
VLA	<i>Very Large Array</i>
XDR	<i>X-ray Dominated Regions (Región dominada por rayos-X)</i>
ZMC	<i>Zona Molecular Central</i>

Parte I

Introducción

Capítulo 1

El centro Galáctico

El centro Galáctico (CG) se encuentra a una distancia de ~ 8.5 kpc del Sol (Reid 1993). A esta distancia 1° corresponde a ~ 150 pc o lo que es lo mismo, 1 pc corresponde a $\sim 24''$. Entre el Sistema Solar y el CG hay una gran cantidad de polvo que extingue la radiación óptica y ultravioleta (UV) procedente del CG, limitando su observación entre el infrarrojo (IR) cercano y los rayos-X blandos.

El CG fue detectado por primera vez en 1932 en observaciones radio por el pionero de la radioastronomía Karl Jansky, quien detectó una radio fuente muy intensa en el centro de nuestra Galaxia. Gracias a diferentes radio telescopios se han podido obtener observaciones con mejor resolución angular. Una de las imágenes más impresionantes en radio es el mosaico de imágenes de LaRosa et al. (2000), observado con el telescopio Very Large Array (VLA) (Fig. 1.1). En esta imagen están marcadas las estructuras más importantes que se desglosarán en la Sec. 1.2; lo más llamativo a primera vista son los arcos o filamentos que se encuentran en gran parte de la imagen y las burbujas que son restos de supernovas.

En los diferentes capítulos de este trabajo se van a estudiar posiciones selectas dentro de la zona molecular central de nuestra Galaxia, en la que se engloban condiciones físicas muy diferentes. Para ver las condiciones generales que se observan en esta región, en los diferentes apartados de este capítulo se darán a conocer las condiciones físicas y químicas de la materia interestelar (MI) que se encuentra en el centro de la Galaxia, que son muy diferentes a las que se derivan de las del disco Galáctico (DG). En la Tab. 1.1 se hace un resumen comparativo entre las propiedades del MI del DG y del CG.

1.1 Distribución general del gas molecular

El 10% del gas neutro de la Galaxia se encuentra en los ~ 450 pc centrales, en lo que Morris & Serabyn (1996) denominaron Zona Molecular Central (ZMC). Se observa una distribución del gas molecular asimétrica, donde aproximadamente 3/4 partes del gas se encuentra a longitudes galácticas positivas. Tampoco existe simetría en las velocidades de las nubes, con aproximadamente 3/4 partes del gas con velocidades positivas. La masa total del gas molecular es $10^8 M_\odot$ (Güsten & Philipp 2004; Mayer-Hasselwander et al. 1998 y Dahmen et al. 1998) y representa del orden de un 2.5% de la masa estelar total en la región. La mayor parte de la masa se encuentra formando grandes complejos de nubes moleculares con tamaños de hasta ~ 50 pc. En la Fig. 1.2 podemos ver la distribución de el gas molecular a través de trazadores de gas difuso (CO), denso (CS, $n > 10^4 \text{cm}^{-2}$) y de regiones de choques

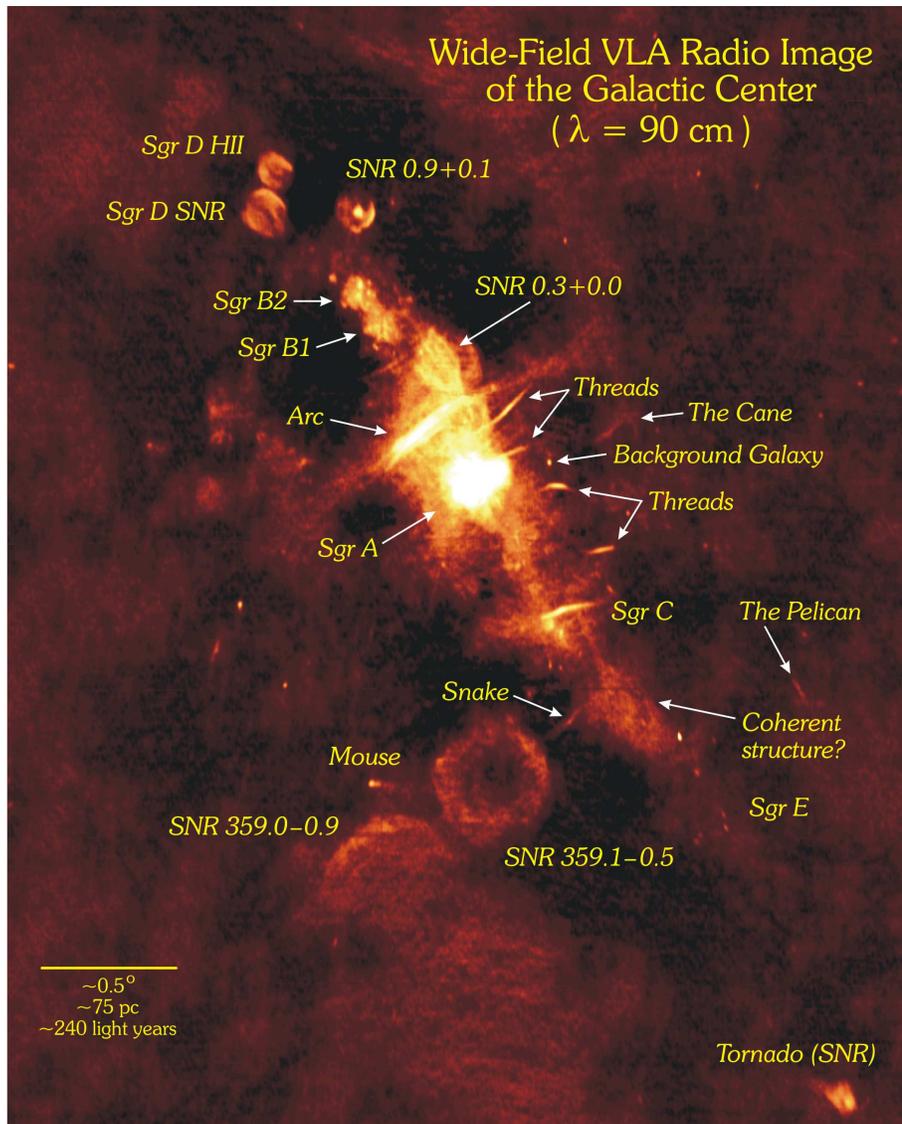


FIGURA 1.1: Mosaico de imágenes del continuo a 90 cm del CG obtenidas con el VLA. Figura de LaRosa et al. (2000).

(SiO, Martín-Pintado et al. 2000). Se aprecia como el gas molecular se condensa en los distintos complejos moleculares concentrándose cada vez más según se observen regiones más densas. Las grandes abundancias de SiO que se observan en las diferentes regiones del CG han sido atribuidas a la existencia de choques de velocidades pequeñas que afectan a las nubes moleculares erosionando los la superficie de los granos de polvo eyectando átomos de Si o directamente moléculas de SiO al MI. Como veremos en los próximos capítulos, estas regiones presentarán también grandes abundancias en moléculas orgánicas complejas (MOCs) debido a la formación o condensación de éstas en las superficies de los granos.

1.2 Estructuras morfológicas del centro Galáctico

A continuación se presentan las principales estructuras morfológicas que se pueden observar en la Fig. 1.1, estas son:

TABLA 1.1: PROPIEDADES GLOBALES

	Disco Galáctico	500 pc centrales
Gas atómico [M_{\odot}]	10^9	$10^{6.4}$
Gas molecular [M_{\odot}]	10^9	$10^{7.9}$
Componente estelar [M_{\odot}]	10^{11}	$10^{9.8}$
Fracción HI/H ₂	~ 2	~ 0.05
Fracción $\mu = M_{gas}/M_{\star}$	~ 0.01	~ 0.01
Densidad promedio del gas $\langle n \rangle_v$ [cm^{-3}]	1–2	100
Densidad superficial [$M_{\odot} \text{pc}^{-2}$]	~ 5	≥ 100
Flujo de fotones Lyman [s^{-1}]	$10^{53.3}$	$10^{52.3}$
Tasa formación estelar ϕ [$M_{\odot} \text{año}^{-1}$]	~ 5.5	0.3–0.6
Eficiencia ϕ/M_g [año^{-1}]	10^{-9} – 10^{-8}	5×10^{-9}
Luminosidad IR [L_{\odot}]	10^{10}	$10^{9.1}$
	nubes del Disco	nubes centrales
Tamaño promedio [pc]	–	20–30
Espectro de masas: $dN/dM \propto M^{-\gamma}$	1.6–1.7	$\gamma \sim 1.6 (\geq 10^4 M_{\odot})$
Dispersión de velocidades [km s^{-1}]	≤ 5	15–30
Vel. de dispersión-tamaño ΔV [km s^{-1}]	$2R^{0.5}$	$12R^{0.5}$
Densidad media del gas [cm^{-3}]	$\sim 10^{2.5}$	$\sim 10^{4.0}$
Temperatura del gas [K]:	~ 15	50–70/200
Temperatura del polvo [K]:	15–22	21
Campo magnético [mG]	≤ 0.1	2
Abundancias Isotópicas		
$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$	75	25
$^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$	500	250
$^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$	400	1000

NOTA- Comparación de las propiedades globales de los 500 parsecs centrales de la Galaxia y de las nubes moleculares con las propiedades del DG. Datos obtenidos de Güsten & Philipp (2004) y de Mezger et al. (1996).

1.2.1 Sgr A

En este complejo se encuentra en el centro dinámico de la Galaxia, y se pueden observar en su interior varias estructuras importantes (Mezger et al. 1996) entre las que destacan :

- Sgr A*: es una fuente compacta de radiación sincrotrón situada muy cerca, o en el mismo centro dinámico de la Galaxia. Estudiando la dinámica de las estrellas que orbitan a su alrededor se deduce que la masa central es de $\sim 3.7 \times 10^6 M_{\odot}$, siendo el mejor candidato a agujero negro masivo que se conoce en la actualidad (Genzel et al. 2000).
- Sgr A Oeste: es la región HII central, en cuyo centro se encuentra Sgr A*. Parte del gas ionizado presenta una estructura espiral que se puede ver en la imagen de la emisión de Pa α en el CG, Fig. 1.3 (Scoville et al. 2003).

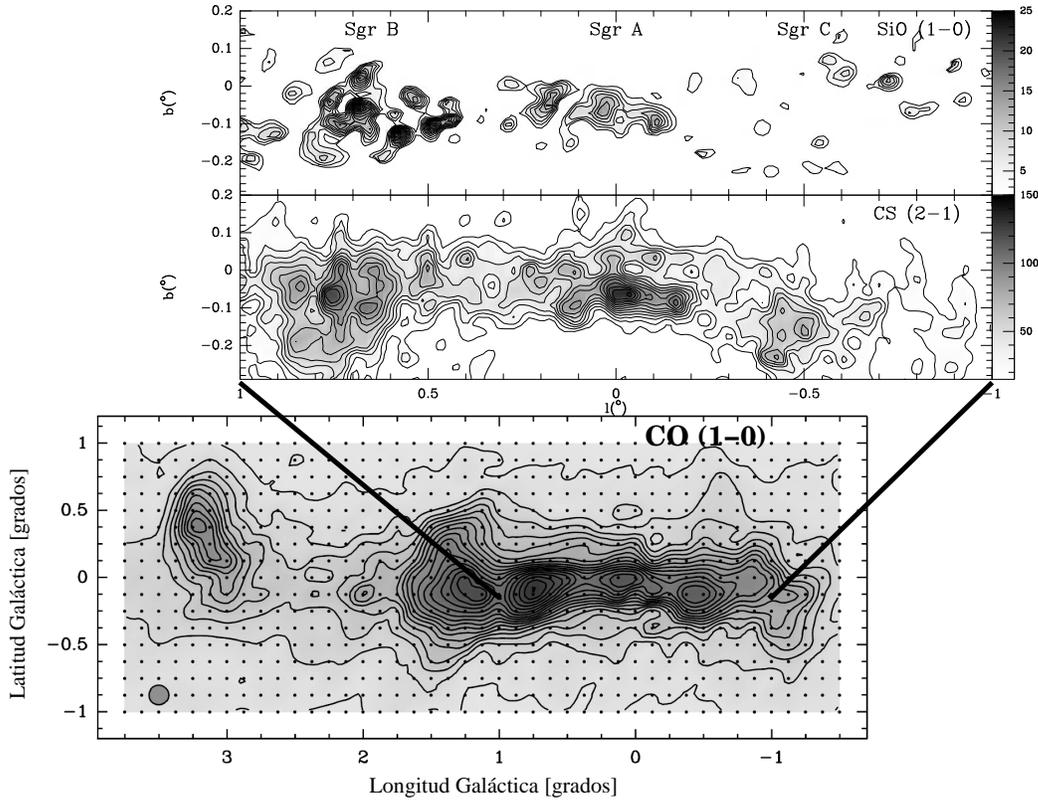


FIGURA 1.2: Mapas de la emisión de CO, CS y SiO en el CG. El CO traza el gas molecular difuso, el CS el gas un poco más denso y el SiO las regiones de choques. Figuras obtenidas de Dahmen et al. (1998) y Martín-Pintado et al. (2000).

- El Disco Circunnuclear: se trata de un anillo de gas neutro que rodea a Sgr A Oeste. El material rota en torno al agujero negro con una velocidad de $\sim 110 \text{ km s}^{-1}$ y un periodo de $\sim 10^5$ años. Observaciones de NH_3 (Coil & Ho 1999) parecen probar que hay gas molecular cayendo desde el disco circunnuclear hacia Sgr A*.
- Sgr A Este: es un resto de supernova que emite radiación sincrotrón y que probablemente explotó hace $\sim 5 \times 10^4$ años.
- M-0.13 y M-0.02-0.07: son las nubes que constituyen el complejo molecular de Sgr A y se las denomina como las nubes de $+20 \text{ km s}^{-1}$ y $+50 \text{ km s}^{-1}$ respectivamente. En M-0.02-0.07 tuvo lugar la explosión que creó Sgr A Este y se presenta comprimida por efecto de la misma.

1.2.2 Sgr B

Este complejo, situado a unos 80 pc del agujero negro, está compuesto por las fuentes conocidas como Sgr B1, G0.6-0.0 y Sgr B2.

- Sgr B1: presenta una emisión de radio continuo de origen térmico, dominado por fuentes extensas (Mehringer et al. 1992). Sgr B1 está interaccionando parcialmente con una nube molecular que lo rodea y parece estar expandiéndose. Sofue (1990) ha estimado que esta nube molecular empezó a expandirse hace $\sim 10^6$ años y ha sugerido que la causa puede ser un brote de formación estelar en Sgr B1.

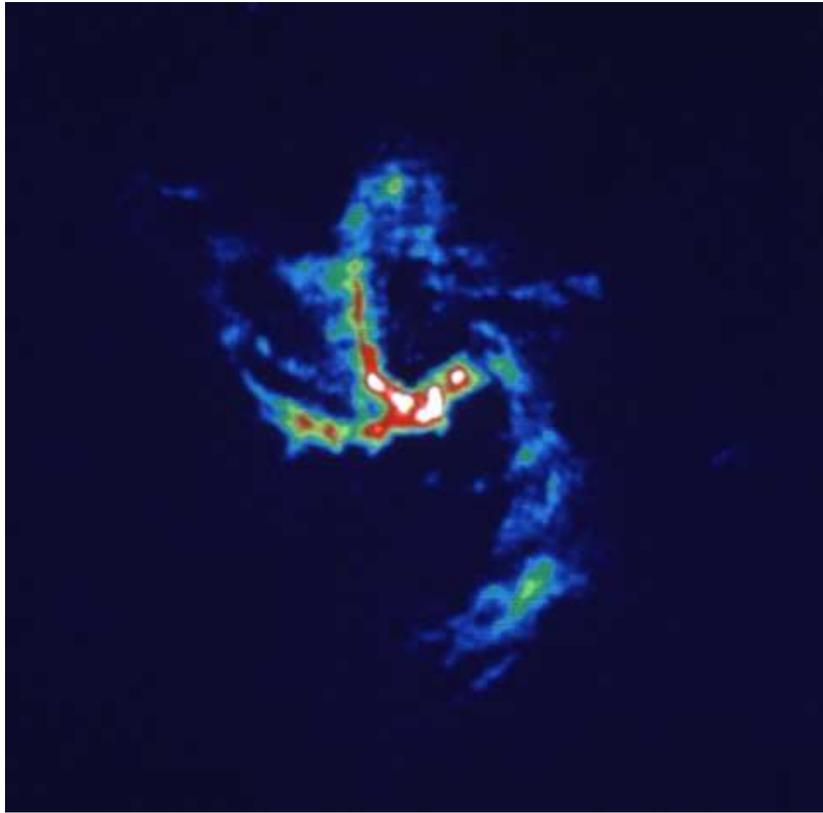


FIGURA 1.3: *Imagen de la emisión de Pa α en el CG corregida de extinción; esta imagen ha sido obtenida por Scoville et al. (2003) mediante el Hubble Space Telescope. Figura cortesía de NRAO/AUI.*

- G0.6–0.0: se compone de una estructura extensa con forma de arco que parece conectar Sgr B1 con Sgr B2 y contiene al menos cuatro regiones HII ultracompactas (Mehringer et al. 1992). La velocidad del material ionizado de G0.6–0.0, medida con observaciones de líneas de recombinación de hidrógeno, es intermedia entre la de Sgr B1 y B2, lo que podría suponer que ambos complejos están en realidad asociados y su proximidad no se debe simplemente a una coincidencia geométrica.
- Sgr B2: complejo de radio continuo y de emisión molecular, es una de las regiones de formación estelar más activa de la Galaxia. Las fuentes más intensas son Sgr B2M y Sgr B2N; son luminosas en el IR y presentan formación estelar reciente; otra concentración, algo menos intensa, que también se puede observar en esta región es Sgr B2S. Observaciones con el VLA han resuelto en Sgr B2M y B2N 19 regiones HII ultracompactas (Gaume & Claussen 1990). Junto con estas regiones HII, el gas se concentra en núcleos calientes y densos (10^7 cm^{-3}) de tamaños $\sim 0.2 \text{ pc}$ y que están siendo calentados por la estrella o estrellas que están naciendo en su interior (de Vicente et al. 1997). Rodeándolos, y aparentemente asociada a Sgr B2N y B2M nos encontramos una nube ambiente de gas moderadamente denso (10^{5-6} cm^{-3}) que se extiende unos 2.5 pc en dirección Este-Oeste y 5 pc en dirección Norte-Sur (Hüttemeister et al. 1993a). A $\sim 4 \text{ pc}$ de las condensaciones centrales y con una anchura de 1.6 pc se observa un anillo caliente molecular (de Vicente et al. 1997). Una extensa envoltura molecular de densidad más pequeña ($\lesssim 10^4 \text{ cm}^{-3}$), y que se extiende unos $15'$, envuelve Sgr B2 y es la nube que

podemos observar en la emisión de CO del CG que se presenta en la Fig. 1.2. El conjunto forma una nube molecular gigante con un tamaño de ~ 45 pc y una masa total de $\sim 7 \times 10^6 M_{\odot}$, considerada el mayor complejo molecular de la Galaxia. La emisión en esta fuente es producida principalmente por fuentes individuales, no por una estructura extensa como Sgr B1. Este hecho sugiere que ambas regiones están en distinto estado evolutivo, siendo Sgr B1 aproximadamente 10^6 años más vieja que Sgr B2. La existencia de los dos núcleos calientes muy activos, que producen una química muy rica en MOCs por la evaporación de los mantos de los granos de polvo, han hecho de esta fuente una de las más interesantes para la detección de nuevas moléculas.

1.2.3 Sgr C

Junto con Sgr B y Sgr A, Sgr C es otro de los complejos moleculares más grande del CG, y está situado a $l \sim -0^{\circ}.55$, simétrico a Sgr B2 con respecto al CG. Observaciones del VLA (Liszt & Spiker 1995) han encontrado pequeñas estructuras tipo cáscara (posiblemente restos de supernova), filamentos y varias fuentes compactas, que en su mayoría son de tipo térmico. Entre las fuentes de tipo no-térmico destaca un filamento largo y estrecho similar a los que constituyen el Arco próximo a Sgr A y que veremos a continuación. Este filamento podría estar asociados con el borde de una nube molecular (Bally et al. 1989) que está siendo calentada por una fuente térmica. La masa del material neutro es de $\sim 5 \times 10^5 M_{\odot}$ (Liszt & Spiker 1995; Lis & Carlstrom 1994), su densidad de H_2 de $\sim 6 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ y la densidad de columna de H_2 puede llegar a $2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$.

1.2.4 Los filamentos no térmicos

La consecuencia más directa de los intensos campos magnéticos en la estructura y propiedades del CG es la existencia de unos filamentos largos, muy estrechos y bastante rectos, que se conocen como Filamentos Rectos o Filamentos No-Térmicos (FNT). Estas estructuras, sólo observadas en el CG, se pueden encontrar en solitario o en agrupaciones paralelas. Son estructuras que emiten radiación no-térmica polarizada de unas decenas de parsecs de longitud pero una fracción de parsec de anchura. Todos los FNT observados exceptuando el Pelicano (Lang et al. 1999) son prácticamente perpendiculares al plano de la Galaxia. Se cree que los filamentos están orientados según la dirección de un campo magnético poloidal que se extendería en la misma escala que la ZMC. Los FNT serían tubos de flujo magnético iluminados al emitir radiación sincrotrón por la inyección de partículas relativistas procedentes de una fuente local aún desconocida. Una característica interesante de estos filamentos es que muchos, si no todos, están interaccionando con alguna nube molecular. El hecho de que, a pesar de la interacción con nubes moleculares, los filamentos no muestren ninguna deformación da idea de la intensidad del campo magnético (Morris 2007). Destaca de entre todos los FNT el Arco que es una estructura ligeramente arqueada perpendicular al plano Galáctico, situado a $l \sim 0^{\circ}.17$. Está formado por varios FNT y superpuesta a éstos aparece la emisión térmica de dos nubes moleculares que por sus formas se conocen como La Hoz (“The Sickle”) y La Pistola (“The Pistol”).

1.2.5 La cresta de polvo

Entre el Arco y las regiones HII de Sgr B1 nos encontramos una estrecha cresta de emisión de polvo observable en el continuo a $800\ \mu\text{m}$ de Lis & Carlstrom (1994). Esta cresta presenta subestructuras, coincidiendo la condensación más significativa con el máximo de NH_3 , $M+0.25+0.01$. A pesar de la gran masa de material molecular Lis et al. (2001) no han hallado ninguna evidencia de que el polvo esté siendo calentado desde el interior de las nubes ni de que haya formación estelar masiva.

1.2.6 Los filamentos térmicos

Entre el Arco y Sgr A existe un “puente” molecular ionizado que los une y que, al contrario que los FNT, emite radiación térmica en el continuo. La ionización de los arcos es debida a un cúmulo estelar cercano a los filamentos. Este “puente” está constituido por varios filamentos arqueados que se conocen como Filamentos Térmicos (FT) o Arcos Térmicos en Radio (ATR, “thermal radio arches”). A continuación, en la Sec. 1.3 se presentan las fuentes que son origen de la emisión térmica que afecta a nubes moleculares como los filamentos.

1.3 Contenido estelar

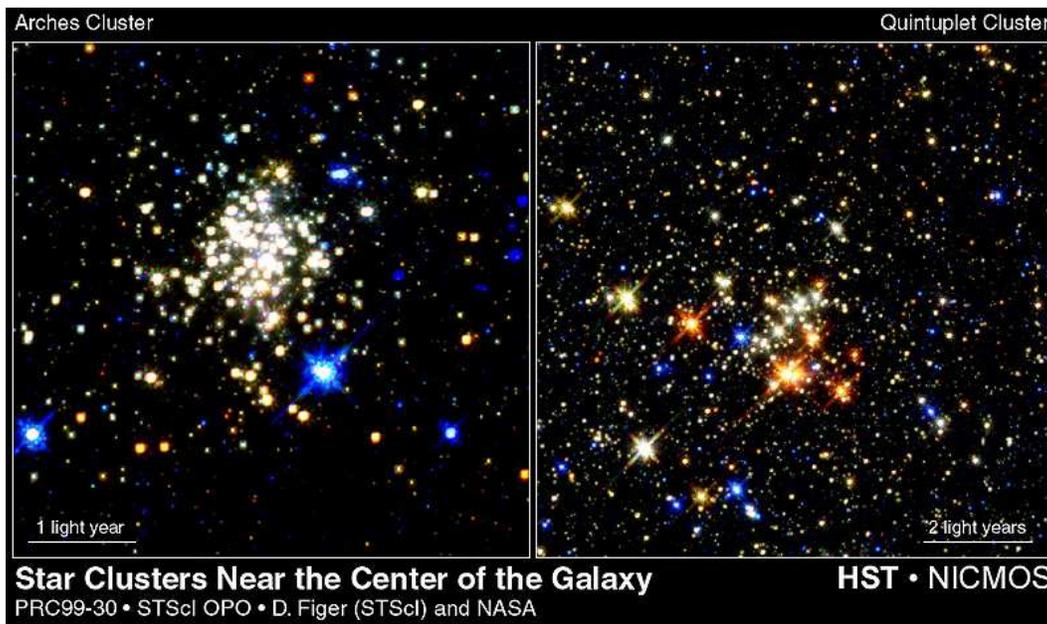


FIGURA 1.4: *Cúmulos de Los Arcos y del Quintuplete.*

Además de las estructuras moleculares que se observan en radio, e interaccionando fuertemente con ellas, se observan: tres cúmulos estelares, llamados Cúmulo Central, cúmulo de Los Arcos y cúmulo del Quintuplete (Figer et al. 2004a); y una estrella supermasiva, La Pistola. El Cúmulo Central está situado en el parsec central de la Galaxia y contiene unas 30 estrellas masivas. A sólo 30 parsecs del CG se encuentra el cúmulo de los Arcos, que contiene al menos 150 estrellas de tipo O en un diámetro de unos $0.6\ \text{pc}$ (el más denso de la Galaxia). Este cúmulo está calentando los ATR, como se ha comentado anteriormente. El cúmulo del

Quintuplete se encuentra muy cerca del de los Arcos, con al menos 30 de las estrellas más masivas de hasta $120 M_{\odot}$ (Figer et al. 1999b, Figer 2004b). Este cúmulo está calentando la nube molecular de La Hoz. Las edades de estos cúmulos son de $\sim 3\text{--}5 \times 10^6$ años para el Quintuplete y el Cúmulo Central (Figer et al. 1999a), y de 2.5×10^6 años para el de Los Arcos (Figer et al. 2002). La Pistola, situada cerca del cúmulo del Quintuplete, se cree que es una estrella supergigante muy masiva (con una masa inicial estimada en $200\text{--}250 M_{\odot}$, Figer et al. 1998), o un sistema binario muy masivo. Esta estrella ioniza una pequeña nube molecular con su mismo nombre.

Las condiciones extremas presentes en el CG deben influir en la formación estelar; la tasa de formación estelar actual en el CG es 10 veces menor que en el DG, a la vez que contiene una fracción más elevada de estrellas masivas que el DG. Observaciones en el IR-lejano y en radio sugieren que gran parte de la población estelar del CG surgió en un brote de formación estelar instantáneo hace unos 10^7 años (Morris & Serabyn 1996). Para que se produzca actualmente la formación estelar en el CG, debido a la elevada dispersión de velocidades, es necesario que la masa de la nube molecular sea mayor que la masa de Jeans ($\sim 10^{5-7} M_{\odot}$). Solamente hay nubes que superen esta masa de Jeans en la región de Sgr B2, y es aquí donde se está produciendo formación estelar. Pueden existir además mecanismos externos que pueden ser iniciadores del colapso de las nubes en el complejo de Sgr B2 y de cualquier otro complejo en el CG, como choques entre nubes o por interacción con restos de supernovas (Morris & Serabyn 1996).

Actualmente, la formación de cúmulos masivos de estrellas en el CG se concentra sobre todo en dos regiones, Sgr B2 y Sgr C. Hay regiones HII donde se pueden estar formando algunas estrellas masivas (Sgr D, E, A Oeste), pero son fuentes débiles que pueden estar ionizadas por estrellas tipo-B o tipo-O tardías, o ser regiones de ionización extensas y con densidades pequeñas. Estudios actuales de la formación estelar indican una historia de formación estelar continua con una tasa de formación estelar $\sim 0.02 M_{\odot} \text{ año}^{-1}$. Los cúmulos jóvenes que se ven actualmente se debieron formar hace unos 5×10^6 años con una tasa de formación estelar de unos $0.001 M_{\odot} \text{ año}^{-1}$ (Figer et al. 2004a).

1.4 Cinemática

En la Fig. 1.5 (Binney et al. 1991) se muestra un diagrama (longitud(l)-velocidad(v)) de la emisión de CO $J=1 \rightarrow 0$. Se observa que existe una clara distribución en forma de paralelogramo con una diagonal. El gas sobre la diagonal representaría nubes con velocidades sobre órbitas aproximadamente circulares, en ella nos encontramos con nubes densas del disco del CG que contienen el 85% de la masa de la ZMC. El resto de las nubes que se observan en la figura son menos densas y presentan velocidades de órbitas no circulares, que pueden explicarse mediante la existencia de un potencial barrado que produciría desviaciones en el movimiento circular y aparición de choques por la intersección de órbitas. El modelo que presentan Binney et al. (1991) muestra una barra que rota en el mismo sentido que la Galaxia con un patrón de velocidad de $\sim 60 \text{ km s}^{-1} \text{ kpc}^{-1}$ e inclinado $\sim 16^{\circ}$ con respecto a la línea de mira. Existen otros modelos que intentan explicar la dinámica del disco de HI, como los de Fux (1999), Englmaier & Gerhard (1999) y Weiner & Sellwood (1999), que difieren de los resultados de Binney derivados para la ZMC. En éstos se obtienen velocidades de $\sim 45 \text{ km}$

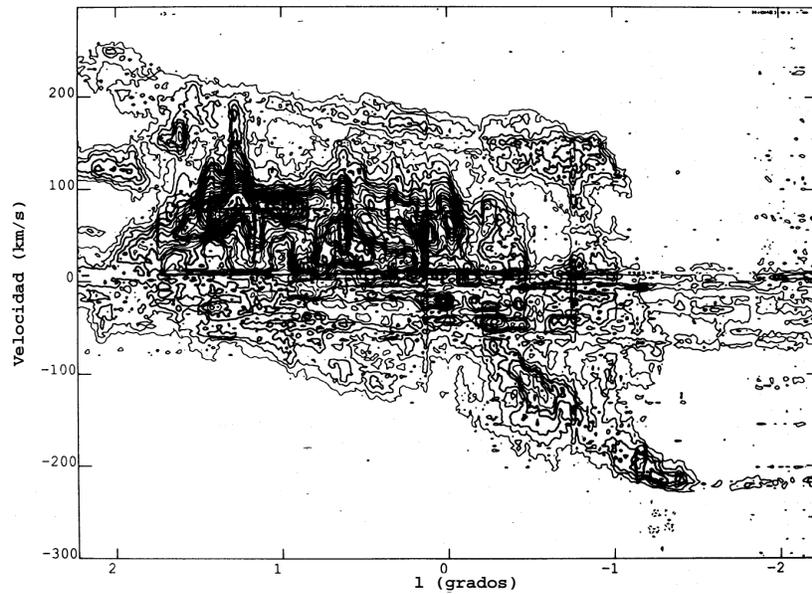


FIGURA 1.5: Diagrama de distribución de velocidades de la emisión de CO de Bally et al. (1987) para el intervalo de latitud $|b| < 0^\circ.1$. Los contornos representan la intensidad en unidades de temperatura y están regularmente espaciados en 1 K. Figura de Binney et al. (1991).

$s^{-1} \text{ kpc}^{-1}$, una orientación de $\sim 30^\circ$ respecto a la línea de mira y un radio de corrotación de $\sim 4 \text{ kpc}$. En todos estos modelos de dinámica existen dos familias de órbitas diferentes

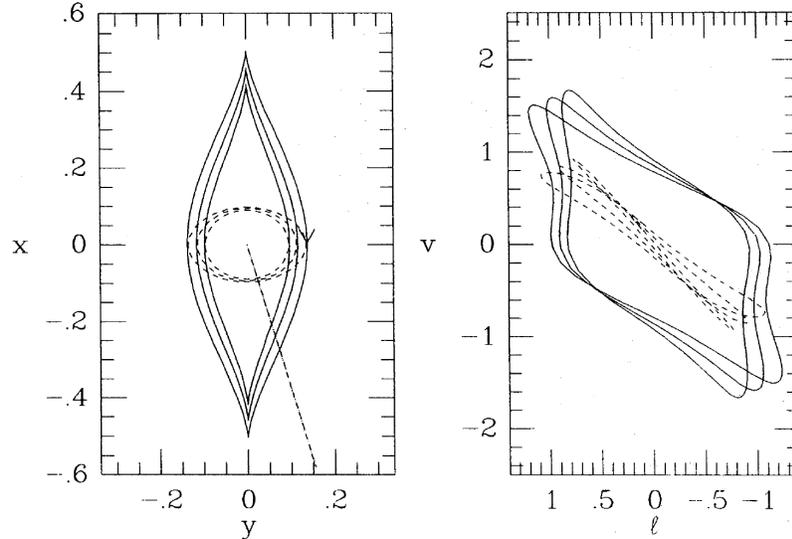


FIGURA 1.6: Izq: Órbitas x_1 (líneas continuas) y x_2 (líneas discontinuas) para un potencial barrado. La línea recta indica la línea de mira desde el Sol. Dcha: Predicción del diagrama l - v observando desde el Sol. Figuras de Binney et al. (1991).

alrededor del CG, x_1 y x_2 (Fig. 1.6 Izq.), que se cruzan en lo que se llama Resonancia Interna de Lindblad (RIL). La familia de órbitas x_1 rota entre la RIL y el radio de corrotación en órbitas elongadas entorno al eje mayor de la barra. Estas órbitas podrían dar lugar a la estructura con forma de paralelogramo que encontramos en los diagramas (l, v) (Fig. 1.6 dcha.). Anteriormente a esta explicación se suponía que existía, alrededor de la condensación

central de Sgr, un anillo molecular en expansión (EMR, “Expanding Molecular Ring”), ver Sawada et al. (2004). Las órbitas x_1 interiores empiezan a ser menos estables cayendo parte de su gas a las órbitas x_2 , casi circulares y más internas girando alrededor del eje menor de la barra. Estas órbitas son las que provocan la existencia de la distribución diagonal de gas en el diagrama (l,v) . La formación de nubes moleculares estaría producida por la coalescencia del gas en las diferentes órbitas del potencial barrado y la formación estelar por la compresión en la frontera entre las nubes. En este modelo los choques producidos en las regiones donde se cortan las órbitas x_1 y x_2 podrían producir una pérdida de energía cinética y de momento angular, haciendo caer material al centro de la Galaxia. Morris & Serabyn (1996) estimaron que la cantidad de gas que atraviesa la RIL es de $\sim 0.4 M_\odot \text{ año}^{-1}$; esta cantidad de gas es del mismo orden que la tasa de formación estelar en la ZMC ($0.3\text{--}0.6 M_\odot \text{ año}^{-1}$). Aunque este modelo de barra pura (modo $m=2$, cuadrupolo) explique bastante bien las propiedades cinemáticas observadas en el CG, podrían existir perturbaciones $m=1$ (Combes 1996) producidas por una segunda barra más pequeña que explicaría la distribución asimétrica del gas alrededor del CG.

A partir de observaciones de la emisión de CO y de la absorción de OH, Sawada et al. (2004) derivan la estructura que debe tener el CG a lo largo la línea de mira. En el panel de la izquierda de la Fig. 1.7 la representación del gas del CG concuerda con la existencia de una barra interior. En el panel de la derecha de esta misma figura se presenta un esquema del CG donde las principales nubes moleculares son brazos entorno al CG.

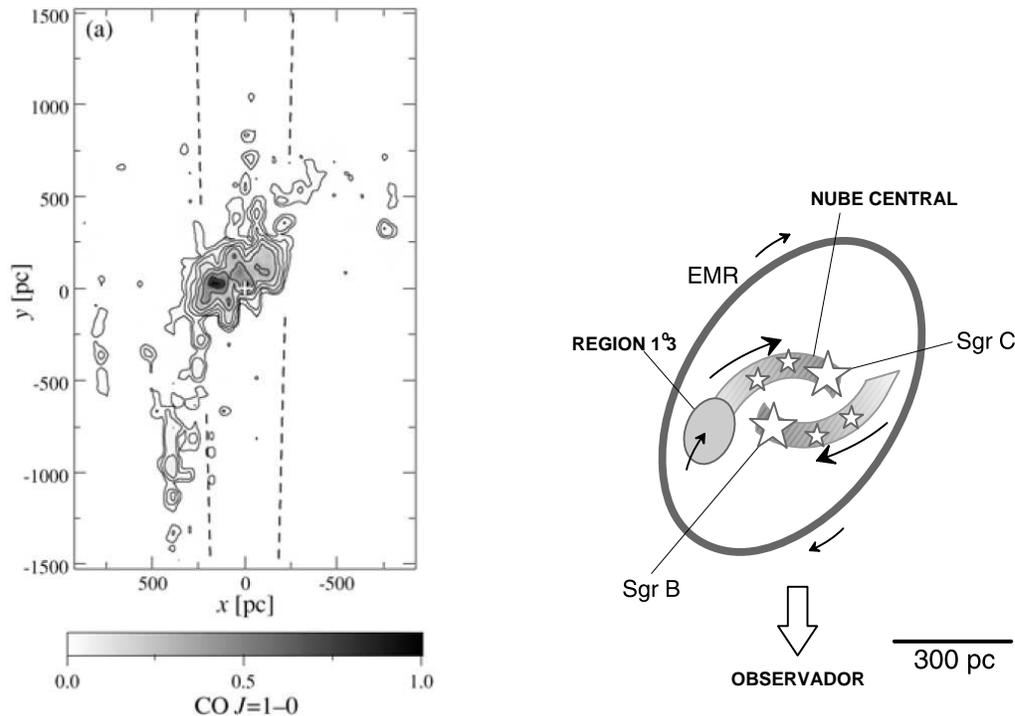


FIGURA 1.7: Izq: Disposición de las nubes del CG a lo largo de la línea de mira obtenidas a partir de observaciones de CO y de OH. Dcha: Esquema de la distribución de los complejos de nubes en la zona interna del CG. Figuras de Sawada et al. (2004).

Una nueva perspectiva de la forma que podrían tener las nubes moleculares, a una escala un poco mayor a la que ofrecían Sawada et al. (2004), ha sido presentada por

Rodríguez-Fernández et al. (2006). En la Fig. 1.8 se observan otra vez los mapas de longitud galáctica-velocidad para diferentes rangos de latitud galáctica (izquierda) y los respectivos esquemas de las fuentes que se pueden observar (en la parte superior derecha) y de cómo estarían distribuidas las fuentes con respecto a la línea de mira (figura inferior derecha).

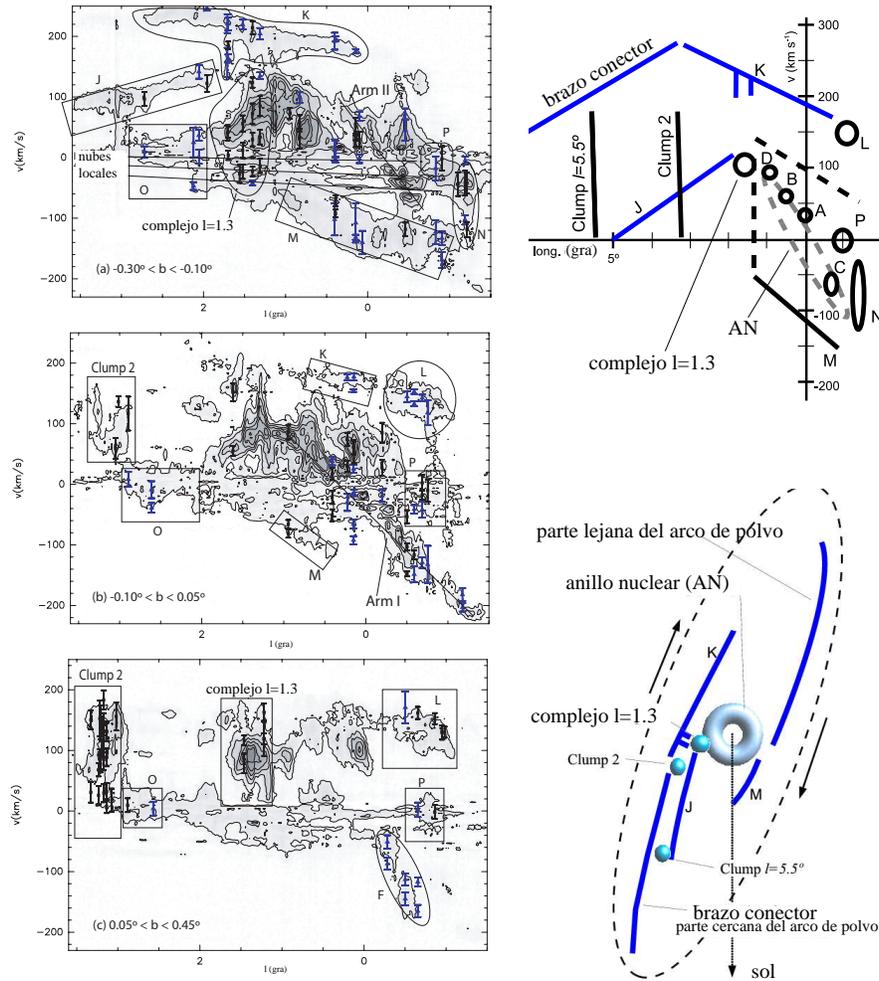


FIGURA 1.8: Izq: Diagramas de la velocidad respecto a la longitud galáctica para diferentes rangos de latitud galáctica de la emisión de CO(1-0). En estas figuras se marcan los principales complejos moleculares que a continuación podremos ver distribuidos en los esquemas de la derecha. Drcha. Arriba: Esquema que ilustra todas los complejos moleculares. Las letras de la A a la D representan los complejos moleculares Sgr A–Sgr D. Drcha. Abajo: Esquema de la distribución de las nubes moleculares que se comentaban anteriormente con respecto a la línea de mira. Figuras adaptadas de Rodríguez-Fernández et al. (2006).

1.5 Condiciones físico-químicas del gas neutro

Como ya se ha mencionado, en el CG encontramos gran cantidad de gas molecular concentrado en nubes con masas de 10^4 – $10^6 M_\odot$, densidades $\geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$ y temperaturas cinéticas entre 30 y 200 K. En el espacio internube el gas tiene densidades $\sim 10^2 \text{ cm}^{-3}$. A continuación veremos algunas propiedades importantes de este gas.

1.5.1 Turbulencia y balance de presiones

Las anchuras de las líneas espectrales en el CG, son en la mayoría de los casos $\sim 20 \text{ km s}^{-1}$, un orden de magnitud mayores que en el DG. Estas anchuras nos indican que la nubes del CG se deberían disipar por la turbulencia en tan solo 10^6 años (Güsten 1989), debido a que las velocidades del gas son fuertemente supersónicas en este medio (la velocidad del sonido en un gas de H_2 a $T_k=50 \text{ K}$ es de $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$). Morris & Serabyn (1996) analizan el equilibrio de presiones encontrando que para campos magnéticos de 1 mG , que como veremos se pueden encontrar en el CG, la presión magnética sea comparable con la presión turbulenta ($\sim 10^{-8} \text{ erg cm}^{-3}$). Proponen que los choques y colisiones que se producen al moverse una nube por un medio magnetizado menos denso genera ondas magneto hidrodinámicas (MHD) que producen la turbulencia que ensancha los perfiles de las líneas.

1.5.2 Densidad

Estudios realizados utilizando diferentes trazadores de gas denso ($n_{\text{H}_2} \geq 10^4 \text{ cm}^{-3}$) como SiO (Martín-Pintado et al. 1997), CS y H_2CO (Zylka et al. 1992), CO (Kim et al. 2000), CH_3CN (Bally et al. 1987), HNCO (Dahmen et al. 1997) y HCN (Jackson et al. 1996) demuestran que el gas de la ZMC tiene densidades moderadamente grandes (10^4 – 10^5 cm^{-3}), concentrándose el gas más denso en los complejos moleculares Sgr A, Sgr B2, Sgr C y en el complejo a $l=1^\circ.5$. Estas densidades son necesarias para que las fuerzas de marea existentes, debidas al potencial barrado de la Galaxia, no dispersen las nubes. Güsten (1989) proporciona la densidad mínima que debe tener una nube molecular en el CG para sobrevivir a las fuerzas de marea:

$$n_{\text{H}_2}(\text{cm}^{-3}) \geq 10^4 \left(\frac{75 \text{ pc}}{R_{gc}} \right)^{1.8} \quad (1.1)$$

donde R_{gc} es el radio galactocéntrico de la nube y $R_{gc}^{-1.8}$ es la dependencia radial propuesta por Becklin & Neugebauer (1968). Este criterio hace que las nubes del CG sean más densas que las del DG, la excitación colisional de moléculas con alto momento dipolar (las que trazan el gas más denso) es lo suficientemente importante como para poderlas observar. De cualquier forma las envolturas de estas nubes densas pueden estar siendo dispersadas por las fuerzas de marea.

1.5.3 Temperatura del gas molecular. Mecanismos de calentamiento

El estudio de la emisión de NH_3 y de H_2 en las nubes del CG ha demostrado que el gas neutro tiene temperaturas en el rango de 30 – 200 K pudiendo haber regiones con temperaturas de hasta 500 K (Hüttemeister et al. 1993a, Rodríguez-Fernández et al. 2001a). Junto con este gas coexiste polvo relativamente frío $T_{\text{polvo}} \simeq 10$ – 30 K (Odenwald & Fazio 1984; Cox & Laureijs 1989, Rodríguez-Fernández et al. 2004) lo cual excluye el calentamiento por radiación estelar de los granos de polvo y el subsecuente calentamiento del gas por las colisiones gas-polvo. Otras formas de calentamiento, como los de tipo mecánico son los choques de velocidades pequeñas producidos por la turbulencia, que pueden explicar el calentamiento del gas (Martín-Pintado et al. 1997). Rodríguez-Fernández et al. (2001a) explican la existencia de nubes muy calientes por medio de choques tipo-C (ver Cap. 2) y por medio de la radiación UV que generan regiones de foto-ionización (PDR) de menor densidad. Para regiones con temperaturas $\sim 150 \text{ K}$ se necesitarían choques de velocidades

pequeñas ($\sim 7 \text{ km s}^{-1}$) en densidades del orden de $\sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$, o varias PDRs de menor densidad ($\sim 10^3 \text{ cm}^{-3}$) o una mezcla de ambos. La temperatura de esta componente se puede explicar comparando el calentamiento por disipación de la turbulencia supersónica con el enfriamiento mediante la moléculas de H_2 y CO (Rodríguez-Fernández et al. 2001a).

1.5.4 El campo magnético

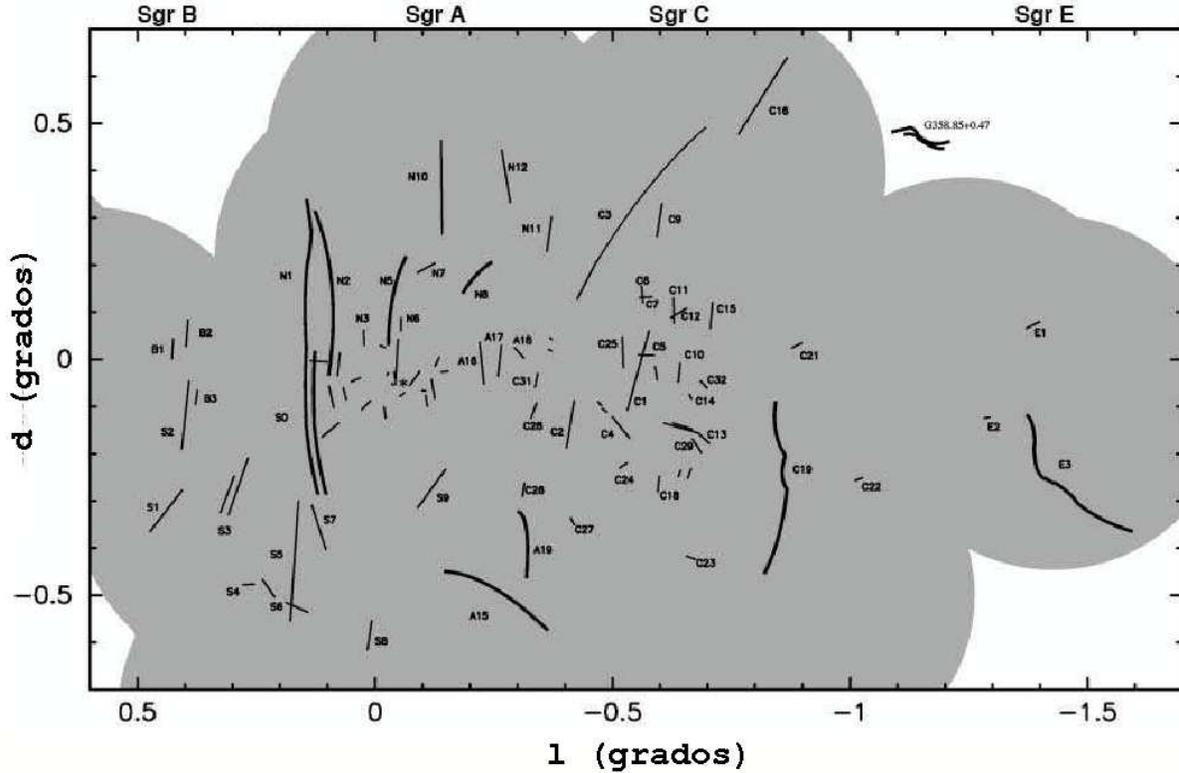


FIGURA 1.9: Mapa donde se encuentra un esquema de todos los FNT que se pueden encontrar en el CG. Figura adaptada de Morris et al. (2006).

La consecuencia más directa de los intensos campos magnéticos en la morfología del CG es la existencia de los FNT. En la Fig. 1.9 podemos ver como se extiende a lo largo de toda la zona molecular del CG y que predominan los que son perpendiculares al plano Galáctico.

Del equilibrio entre las presiones de las nubes y la presión magnética se deriva que la intensidad del campo magnético en el CG debe de ser de $\sim 2 \text{ mG}$ (Yusef-Zadeh & Morris 1987; Morris & Serabyn 1996) un campo más intenso que el que se observa en el DG ($\lesssim 1 \mu\text{G}$). De las medidas del efecto Zeeman en observaciones de máseres de OH se deriva que la magnitud de la componente del campo magnético paralela a la línea de mira también es de $\sim 2 \text{ mG}$ (Killen et al. 1992; Yusef-Zadeh et al. 1996). Como vemos en la Fig. 1.10 nos encontramos con otro tipo de orientación en el campo magnético del CG. En el panel de la izquierda se presenta la polarización a $60 \mu\text{m}$ observada a través de la región HII conocida como G0.18-0.04 (relacionada con la Hoz) sobre una imagen del radio continuo a 6 cm y los contornos de la intensidad de la emisión de CS. En esta figura se observa cómo el campo magnético (perpendicular a esta polarización) es paralelo al plano Galáctico y perpendicular al campo magnético que muestran los filamentos no térmicos del Arco, que se observan en

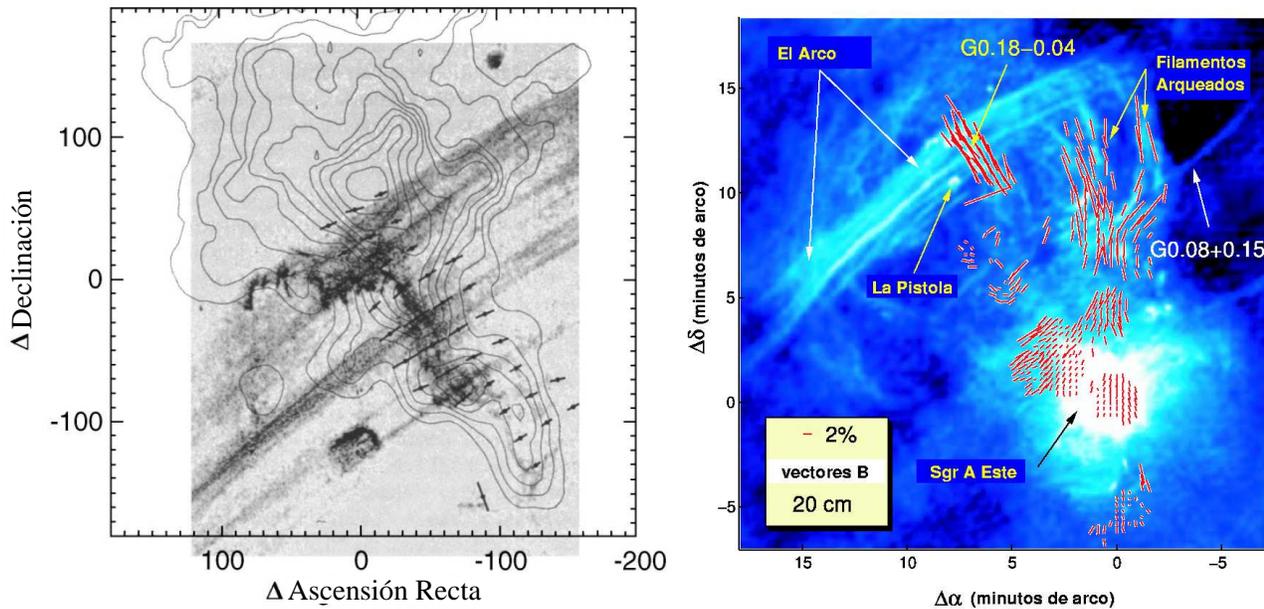


FIGURA 1.10: Polarización del campo magnético en los parsecs centrales de la galaxia. En la figura de la izquierda se observa la polarización a $60\mu\text{m}$ sobre una imagen del radio continuo a 6 cm y contornos de la emisión de CS $J=3-2$. Figura de Morris & Serabyn (1996). La figura de la derecha representa la polarización del polvo (IR, $60\mu\text{m}$ y $350\mu\text{m}$) sobre una imagen de radio continuo a 20 cm. Figura de Chuss et al. (2003).

radio continuo. En el panel de la derecha de la Fig. 1.10, sobre una imagen del radio continuo a 20 cm, se muestran los vectores de campo magnético de la emisión térmica (IR, $60\mu\text{m}$ y $350\mu\text{m}$) de los granos de polvo, alineados magnéticamente en las nubes moleculares del CG (Chuss et al. 2003). A partir de estos datos se obtiene una intensidad del campo magnético del orden de los mG. El campo magnético relacionado con el polvo de esas nubes parece tener una orientación paralela al plano Galáctico; claramente La Hoz (G0.18-0.04) presenta una polarización diferente que el Arco. La posible existencia de un campo magnético toroidal (que se podría observar en nubes de material denso) a la vez que poloidal (como se puede observar en el medio internube que representarían los arcos no térmicos) puede ser explicada mediante recombinación magnética, Chuss et al. (2003).

Recientemente Morris et al. (2006) han observado una estructura en forma de doble hélice que parece ser generada en la nube central de nuestra Galaxia (Fig. 1.11), observando en IR a $24\mu\text{m}$ con el telescopio espacial SPITZER. Esta estructura ha sido relacionada con la actividad magnética que afecta el MI, al poder ser una onda de Alfvén que se va torciendo al propagarse debido a la rotación del disco circunuclear.

1.5.5 Plasma caliente

La presencia de un plasma muy caliente (10^7-8 K) ha sido detectada gracias a observaciones en rayos-X. El mapa del CG que se presenta en la Fig. 1.12 ha sido obtenido mediante diferentes observaciones del satélite Chandra por Wang al. (2002), cada color representa una banda en rayos-X diferente, 1-3 keV, 3-5 keV y 5-8 keV (Fig. 1.12). Nos encontramos en esta imagen que el CG presenta zonas muy energéticas, pero además se observan una gran cantidad de rayos-X difusos en diferentes nubes. Existen gran cantidad de emisores de rayos-X que no se conocían anteriormente, probablemente asociados a sistemas binarios y formación estelar reciente, que generan gran cantidad de explosiones de supernovas. Los puntos más

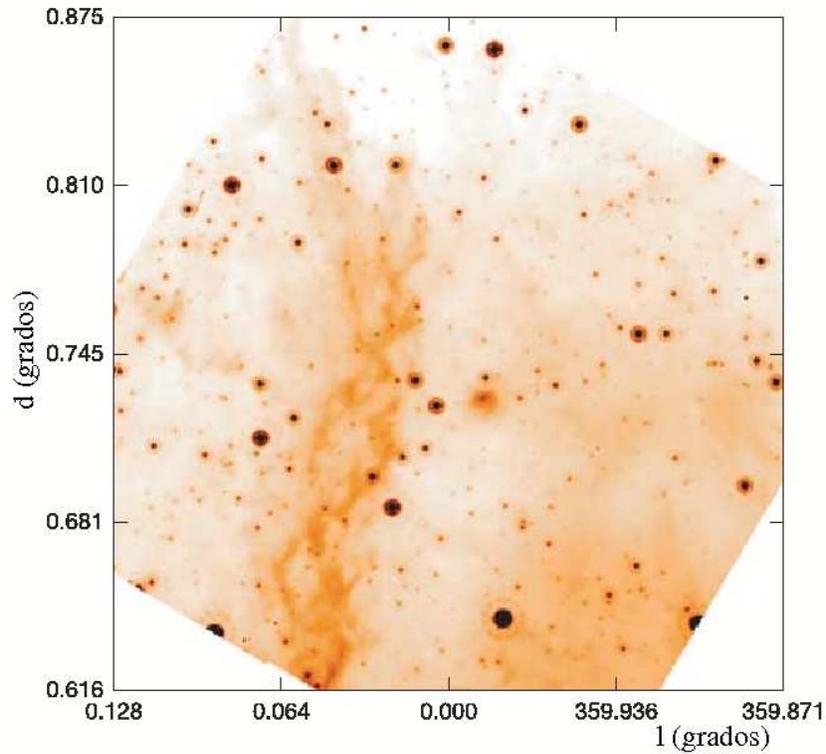


FIGURA 1.11: *Nébulas de doble hélice, detectada en IR a $24\mu\text{m}$ con el instrumento MIPS del telescopio espacial SPITZER. Figura adaptada de Morris et al. (2006).*

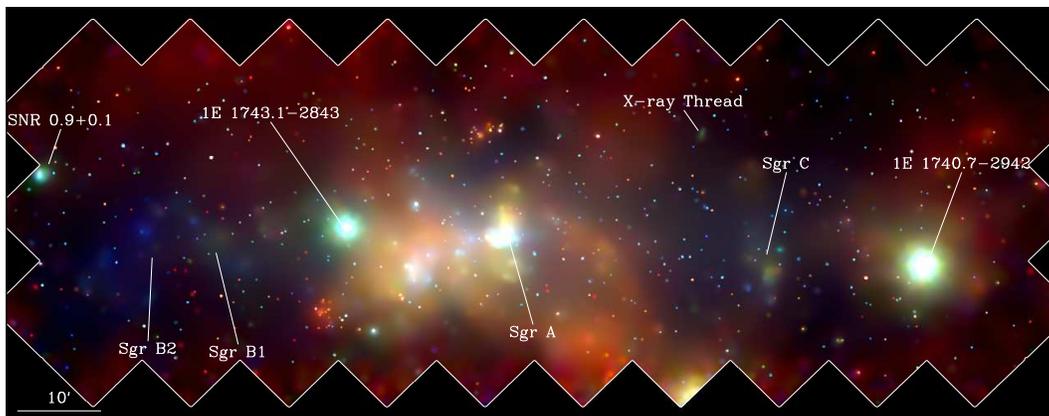


FIGURA 1.12: *Mosaico del CG en rayos-X. Se representan diferentes rangos de energías con colores diferentes: 1-3 keV en rojo, 3-5 keV en verde y 5-8 keV en azul. Figura de Wang et al. (2002).*

brillantes son las binarias de rayos-X 1E 1740.7-2942 y 1E 1743.1-2843, la estrella próxima HD316314, AX J1744.3-2940 y el cúmulo de Los Arcos. Una comparación de los diferentes componentes presentes en el CG se puede ver en la Fig. 1.13 en la que se combinan las emisiones de Radio, IR y rayos-X. La emisión de rayos-X difusa presenta una correlación con la emisión IR de los cúmulos estelares masivos del CG y con las regiones de formación estelar de Sgr B2 y Sgr A. Por lo tanto, la emisión en rayos-X se deberá a explosiones de supernovas o a los vientos muy intensos que se producen en las regiones de formación estelar masiva. En el caso de Sgr B2 existen actualmente varias hipótesis para la emisión de los rayos-X, en la

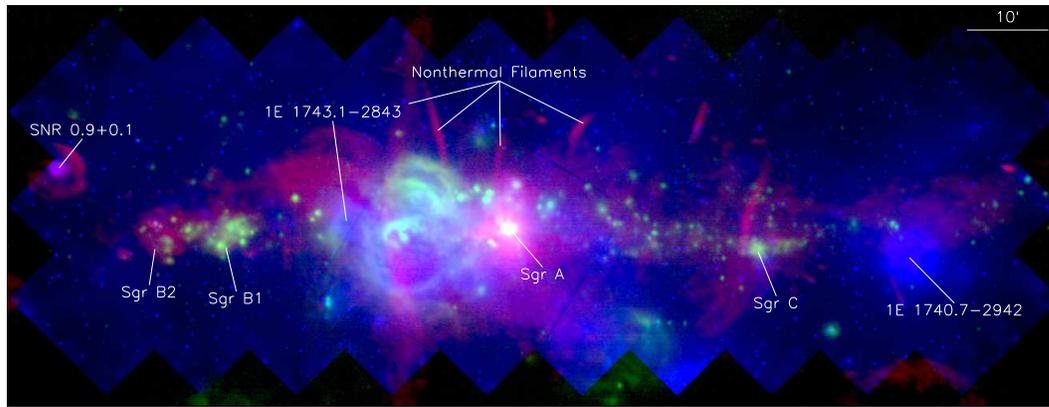


FIGURA 1.13: *Combinación de las emisiones Radio (rojo, 90cm VLA; LaRosa et al. 2000), IR medio (verde, MSX; Price et al. 2001) y rayos-X (azul, 1–8keV Chandra; Lang et al. 2002). Figura de Lang et al. (2002).*

primera esta emisión sería producida internamente, por procesos energéticos de las regiones de formación estelar o por una colisión entre dos nubes (Sato et al. 2000). La otra hipótesis explica la emisión difusa en rayos-X diciendo que Sgr B2 es una nebulosa de reflexión en rayos-X, y que la verdadera fuente de energía que la produce proviene de una explosión de supernova que se produjo hace cientos de años en Sgr A (Fryer et al. 2006). Más reciente es la explicación que dan Yusef-Zadeh et al. (2007) donde la emisión de rayos-X estaría disparada por los rayos cósmicos que se detectan en la ZMC. La correlación entre las fuentes de rayos-X y la emisión molecular está todavía en estudio. Por ejemplo, para el filamento magnético G359.54+0.18 que se observa en radio (“X-ray Thread”, en la Fig. 1.12) se puede encontrar una contrapartida en las observaciones de rayos-X (Lang 2002). Además se pueden encontrar contrapartidas entre ambas emisiones en Sgr B2 y Sgr A* (Requena-Torres et al.; Amo-Balandron et al., en preparación). Estos estudios servirán para entender la aceleración de las partículas en este tipo de estructuras.

1.5.6 Complejidad química del CG

En el siguiente capítulo se estudiarán de las moléculas que se pueden encontrar en MI dando énfasis a las MOCs que se pueden encontrar en el CG. Como hemos visto a lo largo de este capítulo, el CG es una zona muy especial, además de las variaciones en las condiciones físicas, la química también varía en estas regiones con respecto a la química del DG. En el CG la metalicidad de las regiones HII es ~ 2 veces mayor que la metalicidad solar y también existe una variación en las abundancias isotópicas con respecto al resto de la Galaxia (ver Tab. 1.1).

Veamos a continuación el comportamiento de algunas moléculas en las nubes moleculares del CG:

- Las abundancias moleculares con respecto al H_2 son grandes para diferentes moléculas trazadoras de la presencia de choques, como SiO, o de núcleos calientes, como C_2H_5OH . Estas moléculas se observan con abundancias del orden de 10^{-9} y 10^{-8} respectivamente y morfologías similares en el CG (Martín-Pintado et al. 1997, 2001; Hüttemeister et al. 1998).

- El CH_3CN presenta abundancias del orden de $\sim 5 \times 10^{-11}$ parecidas a las presentes en los núcleos calientes (de Vicente et al. 1997).
- La emisión de HNCO difiere de la de CO y de HCO^+ (Minh et al. 2005) y parece presentar una correlación con la emisión de SiO en el CG (Zinchenko et al. 2000), lo cual indicaría que también está ligada a los granos.
- HOCO^+ ha sido estudiado en diferentes regiones de la Galaxia por Minh et al. (1988), y sólo se ha podido detectar en el CG siendo necesario para ello grandes abundancias de CO_2 y H_3^+ . La existencia de grandes abundancias de H_3^+ podría deberse a un flujo de rayos cósmicos importante.
- El NH_3 también presenta abundancias muy grandes y ha servido para diferenciar dos componentes distintas en la temperatura cinética en el CG, una ~ 200 K y otra de ~ 25 K (Hüttemeister et al. 1993a).
- Martín (2006a) ha obtenido rastreos espectrales en frecuencia de 13 regiones de la ZMC, detectando grandes abundancias de muchas moléculas, entre ellas CH_3OH , SO , HNCO , OCS , NH_2CN .
- También recientemente se han observado moléculas muy complejas (por ejemplo glicol aldehído o propanal, Hollis et al. 2000, 2004b) en los núcleos calientes de Sgr B2. Lo más interesante es que la emisión de estas moléculas parece provenir de una envoltura que cubre los núcleos moleculares calientes.

Las grandes abundancias de muchas de estas moléculas no pueden ser explicadas por la química en fase gaseosa dadas las condiciones del CG, como se podrá ver en el siguiente Capítulo, así que se debe de producir la eyección de las moléculas de los granos a la fase gaseosa. Las temperaturas del polvo en el CG no son lo suficientemente grandes como para evaporar los mantos de los granos. Sólo en los núcleos moleculares calientes como Sgr B2N o B2M se podrían evaporar los mantos debido a que las temperaturas de los granos en su interior son elevadas. En el CG la eyección de moléculas se debe producir por procesos mecánicos que erosionen los mantos de los granos. La erosión de los mantos de los granos se podría explicar mediante choques generalizados, con velocidades menores de 10 km s^{-1} , producidos por las colisiones entre nubes moleculares, por vientos de estrellas masivas evolucionadas, por explosiones de supernovas o por la turbulencia del CG (Hüttemeister et al. 1998; Martín-Pintado et al. 1997, 2001). Tendremos además nubes asociadas con cúmulos estelares en las que la foto-disociación será importante; en este caso las moléculas pueden presentar abundancias menores debido a la absorción de fotones UV que las disociarán o las ionizarán.

Capítulo 2

Química de las moléculas orgánicas complejas

En este capítulo se estudiarán los diferentes procesos químicos que se producen en el medio interestelar (MI). Regiones con condiciones físicas dispares pueden evolucionar químicamente de forma diversa, formándose moléculas complejas ricas en diferentes elementos según la región.

2.1 Introducción

La química en el Universo comienza con la nucleosíntesis primordial y continúa en las estrellas; en éstas se forman, a partir del hidrógeno primigenio, los diferentes elementos que son expulsados posteriormente por medio de los vientos estelares y por explosiones de supernovas. La formación de moléculas debió comenzar a partir de la segunda generación de estrellas cuando las abundancias de los elementos más pesados que el hidrógeno ya formaban parte de la materia interestelar. En la etapa de estrella evolucionada la formación de moléculas va a estar influenciada por la formación de pequeños conglomerados de materiales refractarios como los silicatos o grafitos. Estos conglomerados forman pequeños granos de polvo que van a jugar un papel fundamental en la creación de moléculas además de ser el lugar donde se van a pegar y conservar las moléculas en las regiones frías. El gas molecular se concentra en nubes moleculares como las presentes en el CG. Estas nubes pueden ser desestabilizadas por diferentes fenómenos y pueden comenzar a colapsar para formar nuevas estrellas. Durante la formación de estas estrellas existen diferentes estadios evolutivos en los que la química va a ser muy importante y donde se crearán nuevas moléculas, muchas veces con ayuda de los granos de polvo. Una vez creadas las estrellas, éstas también van a afectar a la química de otras regiones debido a la radiación que emiten, creando regiones de foto-disociación (PDRs), en las que la química va a variar debido a la gran cantidad de fotones foto-disociantes. También los rayos-X procedentes de procesos energéticos, como explosiones de supernovas o binarias de rayos-X, pueden afectar a la química, creando las regiones XDRs.

Un gran número de las moléculas que se han detectado en el MI han sido encontradas en las nubes moleculares oscuras (ver Fig. 2.1). Estas regiones, observadas inicialmente en el óptico, parecían estar vacías ya que no emiten en esos rangos de frecuencias, pero emiten en



FIGURA 2.1: *Nube oscura Barnard 68 observada en el óptico. Figura de Herbst (2001).*

otros. En estas nubes oscuras existen gran cantidad de moléculas, que pueden emitir radiación en un amplio rango de frecuencias; las transiciones electrónicas, se observan desde el rango UV al visible; las vibracionales, entre el IR cercano, medio y lejano; y las transiciones rotacionales entre el IR lejano y el rango radio. Gracias al estudio de las transiciones rotacionales en radio, se pueden estudiar zonas muy frías a la vez que contienen gran cantidad de polvo interestelar, que enmascara la radiación en otros rangos de longitud de onda, como pasa en las nubes oscuras.

La molécula más abundante en el MI es el H_2 , seguida por CO, y con la mejora de los instrumentos a lo largo de los años se descubren cada vez más moléculas que aumentan nuestro conocimiento de la complejidad química que uno se encuentra en el MI. En la Tab. 2.1 se muestran las moléculas que se han observado hasta Junio del 2007 en el medio interestelar y circunestelar, según la base de datos de la Universidad de Colonia (Müller et al. 2005) y la compilación de moléculas observadas en el MI realizada y actualizada por Dr. D. E. Woon (http://www.astrochymist.org/astrochymist_ism.html).

2.2 Reacciones químicas del medio interestelar

Las condiciones físicas que nos encontramos en el MI molecular son muy diferentes a las que nos podemos encontrar en la Tierra. Dependiendo de la región se pueden tener temperaturas que varían entre 10 y 300 K, y densidades tan pequeñas que no se pueden obtener en los mejores vacíos producidos en laboratorios terrestres.

En la Sec. 2.3 se mostrarán los modelos químicos que se han desarrollado hasta el momento para explicar la formación de moléculas. Se necesitan conocer las tasas o velocidades de reacción a las que se producen las diferentes reacciones en el MI. Estas tasas suelen depender de la temperatura y a veces de la extinción, en el caso de las reacciones de foto-disociación. Cuando no se conocen, utilizan aproximaciones en las constantes de las reacciones. Se deben diferenciar los procesos químicos en dos fases, una “gaseosa” y otra en estado “sólido” en los mantos de los granos. La existencia de reacciones químicas sobre los granos de polvo ha abierto nuevas vías para entender la complejidad química del MI. Aunque todavía existen muchas dudas sobre qué tipo de reacciones se producen exactamente sobre

TABLA 2.1: MOLÉCULAS EN EL ESPACIO

2 átomos	3 átomos	4 átomos	5 átomos	6 átomos	7 átomos	8 átomos
H ₂	C ₃	c-C ₃ H	C ₅	C ₅ H	C ₆ H	CH ₃ C ₃ N
AlF	C ₂ H	l-C ₃ H	C ₄ H	l-H ₂ C ₄	CH ₂ CHCN	HCOOCH ₃
AlCl	C ₂ O	C ₃ N	C ₄ Si	C ₂ H ₄	CH ₃ C ₂ H	CH ₃ COOH
C ₂	C ₂ S	C ₃ O	l-C ₃ H ₂	CH ₃ CN	HC ₅ N	C ₇ H
CH	CH ₂	C ₃ S	c-C ₃ H ₂	CH ₃ NC	CH ₃ CHO	H ₂ C ₆
CH ⁺	HCN	C ₂ H ₂	CH ₂ CN	CH ₃ OH	CH ₃ NH ₂	CH ₂ OHCHO
CN	HCO	HCCN	CH ₄	CH ₃ SH	c-C ₂ H ₄ O	l-HC ₆ H
CO	HCO ⁺	HCNH ⁺	HC ₃ N	HC ₃ NH ⁺	H ₂ CCHOH	CH ₂ CHCHO?
CO ⁺	HCS ⁺	HNCO	HC ₂ NC	HC ₂ CHO	C ₆ H ⁻	CH ₂ CCHCN
CP	HOC ⁺	HNCS	HCOOH	NH ₂ CHO		
SiC	H ₂ O	HOCO ⁺	H ₂ CNH	C ₅ N		
HCl	H ₂ S	H ₂ CO	H ₂ C ₂ O	l-HC ₄ H		
KCl	HNC	H ₂ CN	H ₂ NCN	l-HC ₄ N		
NH	HNO	H ₂ CS	HNC ₃	c-H ₂ C ₃ O		
NO	MgCN	H ₃ O ⁺	SiH ₄	H ₂ CCNH		
NS	MgNC	NH ₃	H ₂ COH ⁺			
NaCl	N ₂ H ⁺	c-SiC ₃	C ₄ H ⁻			
OH	N ₂ O	CH ₃				
PN	NaCN					
SO	OCS					
SO ⁺	SO ₂					
SiN	c-SiC ₂					
SiO	CO ₂					
SiS	NH ₂	9 átomos	10 átomos	11 átomos	12 átomos	13 átomos
SiO	CO ₂					
CS	H ₃ ⁺	CH ₃ C ₄ H	CH ₃ C ₅ N	HC ₉ N	C ₆ H ₆	HC ₁₁ N
HF	H ₂ D ⁺ , HD ₂ ⁺	CH ₃ CH ₂ CN	(CH ₃) ₂ CO	CH ₃ C ₆ H	C ₂ H ₅ OCH ₃ ?	
SH	SiCN	(CH ₃) ₂ O	(CH ₂ OH) ₂ ?			
HD	AlNC	CH ₃ CH ₂ OH	CH ₃ CH ₂ CHO			
FeO?	SiNC	HC ₇ N				
O ₂ ?	HCP	C ₈ H				
CF ⁺		CH ₃ C(O)NH ₂				
SiH?						

NOTA- Moléculas presentes en el MI, una gran mayoría se han encontrado en las nubes moleculares oscuras o en los núcleos calientes asociados a estrellas masivas. Obtenido de la base de datos de la Universidad de Colonia (<http://www.ph1.uni-koeln.de/vorhersagen/>) y de Astrochymist (http://www.astrochymist.org/astrochymist_ism.html). Para las moléculas con "?" la detección ha sido tentativa.

estas superficies o cuales son las rutas reales para formar moléculas. Además también existe la dificultad de entender cómo es la interacción gas-grano en las diferentes regiones del MI.

2.2.1 Química en fase gaseosa

Los primeros procesos químicos que se estudiaron en el espacio fueron los que se producen en fase gaseosa. Estas reacciones se producen en todo tipo de regiones pero adquieren mayor importancia en las regiones oscuras y frías donde los mantos de los granos se mantienen congelados. Debido a las pequeñas temperaturas la mayoría de las reacciones deben ser exotérmicas y debido a las pequeñas densidades, los encuentros entre moléculas sencillas son poco probables. Esto limitará en gran medida la química. En regiones con mayores temperaturas y densidades la evolución química será mucho más rápida y ciertas reacciones endotérmicas pueden ser importantes.

En la fase gaseosa las reacciones más importantes que existen son:

- Reacciones entre partícula neutras (átomos o moléculas) como:
 - Asociación radiativa: En la que dos elementos, o dos moléculas, se unen para formar una molécula. El exceso de energía se libera en forma de un fotón. En general estas reacciones son lentas y requieren de densidades elevadas y tiempos muy largos como para ser eficaces.

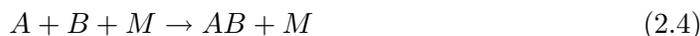


- Foto-disociación: Es la reacción inversa a la anterior. Es muy importante en las PDRs donde existe una fuente de fotones que son capaces de destruir las moléculas que tienen alrededor; esto ocurre en regiones cercanas a estrellas calientes o en los bordes de las nubes moleculares a donde llegan fotones de fuera de la nube.



(2.3)

- Reacciones a tres cuerpos: En estas reacciones el exceso de energía de la creación de una molécula pasará a un tercer cuerpo (M). Serán efectivas en las regiones muy densas donde puedan ser probables los encuentros de tres partículas.



- Disociación colisional: Este proceso de destrucción de una molécula es importante en las regiones con densidades grandes en las que los encuentros entre moléculas son más frecuentes. Pero además, estas reacciones tienen energías de activación grandes por lo que requieren temperaturas elevadas para producirse. La partícula M que colisiona, puede ser otra molécula, un átomo pesado o un rayo cósmico entre otros.



- Intercambio neutro: Esta reacción, como las anteriores, necesita grandes densidades para producirse eficientemente.



- Reacciones iónicas: Estas reacciones serán más probables que las neutras ya que los iones son mucho más reactivos y sus reacciones poseen energías de activación más pequeñas que las correspondientes que involucran elementos neutros.

- Reacciones ion-molécula:



- Reacciones de transferencia de carga:



- Reacciones con iones:



- Reacciones de inserción de carbono: Estas reacciones van a ser importantes para la creación de hidrocarburos.



- Reacciones de foto-ionización: se producen por el encuentro con un fotón. Muy importantes en PDRs y XDRs donde existe una fuente de fotones (UV o de rayos-X). Las velocidades de los electrones eyectados vendrán dadas por las energías de los fotones. En el caso de los rayos-X, no se eyectarán electrones de las capas externas, sino de capas internas, produciendo una caída en cascada de los electrones externos. En estas regiones se suelen ver elementos ionizados varias veces.



- Reacciones de recombinación:

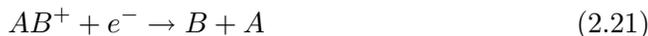
- * Recombinación radiativa:



- * Asociación radiativa:



* Recombinación disociativa:



Las tasas de las reacciones (κ), que representan la velocidades con las que estas reacciones se van a producir, presentan distintas formas según el tipo de reacción:

- Para reacciones entre dos o tres cuerpos:

$$\kappa = \alpha (T/300)^\beta e^{(-\gamma/T)} \quad [cm^3 s^{-1} o cm^6 s^{-1}] \quad (2.22)$$

Como vemos, estas reacciones dependen principalmente de la temperatura (T), los coeficientes α , β y γ , que se estiman por medio de cálculos teóricos o se miden en el laboratorio y se suelen tabular para un rango de temperaturas.

- ionización por rayos cósmicos:

– directa:

$$\kappa = \alpha \quad [s^{-1}] \quad (2.23)$$

– inducida:

$$\kappa = \alpha (T/300)^\beta \gamma / (1 - \omega) \quad [s^{-1}] \quad (2.24)$$

donde α es la tasa de ionización por rayos cósmicos, γ es la probabilidad de que se produzca la foto-reacción con una ionización por rayos cósmicos y ω es el albedo de los granos de polvo en el UV lejano.

- reacciones de foto-disociación:

$$\kappa = \alpha e^{(-\gamma A_v)} \quad [s^{-1}] \quad (2.25)$$

donde α representa la tasa de la reacción en el caso de que los fotones no fuesen atenuados por el medio. A_v es la extinción de los fotones del rango del visible producida por los granos y γ es el parámetro que nos indica cómo va a ser la extinción de los fotones UV respecto a los visibles.

Como se ve en este resumen, las reacciones ion-molécula serán mucho más importantes ya que las densidades suelen ser pequeñas; estas reacciones serán las que tendrán más importancia en la química en fase gaseosa a pequeñas temperaturas.

El H y el H₂, aún siendo muy abundantes, tienen dificultad para reaccionar con otros elementos o moléculas a temperatura pequeñas. Su importancia en la química del MI comienza con la ionización de H₂ por rayos cósmicos que produce H₂⁺. Este ion reacciona muy rápidamente con otra molécula de H₂ en fase gaseosa para formar H₃⁺, que es un ion muy reactivo que intervendrá en muchas de las reacciones de creación de las moléculas de la Tab. 2.1.

Uno de los factores más importantes en esta química en fase gaseosa es la abundancia de elementos como O y C, ya que en muchos casos estos elementos son los que van a guiar la evolución química. La molécula de CO es una de las más estables, con lo que rápidamente el C y el O quedarán atrapados en ella. Si existiese una sobreabundancia de uno de estos elementos en el espacio, éste sería el que produciría la mayoría de las reacciones restantes produciéndose una química más carbonada u oxigenada según el caso.

2.2.2 Química en la superficie de los granos

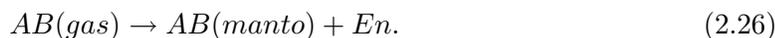
La existencia de los granos de polvo y la posibilidad de que en su superficie se puedan dar reacciones ha producido un avance importante en la comprensión de la complejidad química del MI. Los granos de polvo están compuestos de dos partes, el núcleo y el manto. El núcleo está formado básicamente por materiales refractarios como silicatos y grafitos, que tienen la propiedad de unirse rápidamente y formar compuestos mayores. El manto está constituido por hielos de muy diversas moléculas como H_2O , CH_3OH , NH_3 , CH_4 , CO_2 , C_2H_2 y H_2CO . Poco se sabe de la forma y de las verdaderas características de los granos y de sus mantos. Mediante observaciones en el IR se han podido estimar los tamaños de los granos y las composiciones que pueden tener. Se supone que las superficies de estos granos deben de ser porosas y amorfas; pero en la práctica los modelos químicos utilizan granos con estructuras muy simples para formar sobre ellos las moléculas.

La característica más significativa de la química en granos es la creación de especies hidrogenadas, debido a la facilidad que tiene el hidrógeno atómico para moverse en la superficie del mismo. La molécula más abundante que se crea sobre los granos es el H_2 , su formación no es eficiente en fase gaseosa, pero se observa en el MI, con lo cual se supone su formación en los mantos de los granos. El H también se une muy eficientemente con el C, N y O, formando CH_4 , NH_3 y H_2O . Cuando la abundancia de H_2 es importante con respecto a H atómico se empiezan a tener reacciones con esta molécula. La observación de moléculas más complejas en los granos de polvo, que no sólo contienen moléculas hidrogenadas, como CO , CH_3OH , H_2CO , OCS , HCOOH , etc., indica que las reacciones entre moléculas o átomos más pesados deben producirse en los granos o que se han condensado en los granos después de formarse en fase gaseosa (Ehrenfreund & Charnley 2000 y referencias). Si se aumenta la temperatura de los granos los radicales empiezan a moverse sobre la superficie de los granos tal y como lo hace el hidrógeno, pudiéndose producir una química más rica que todavía está en estudio (Garrod & Herbst 2006). La composición de los granos dependerá en gran medida de las condiciones físicas de las regiones. Se espera que los hielos de los mantos contengan un mayor contenido de moléculas polares (H_2O) en las regiones donde las temperaturas de los granos son grandes, ya que las moléculas no-polares (N_2 , O_2 , CO) son altamente volátiles y se evaporan rápidamente ($T > 20 \text{ K}$) mientras que las polares tienen unas temperaturas de evaporación $\sim 90 \text{ K}$. En las regiones donde las temperaturas son pequeñas nos encontraremos con hielos de moléculas no-polares (Ehrenfreund & Charnley 2000). En otras regiones sometidas a la influencia de fotones UV, rayos-X o cósmicos, la foto-disociación genera radicales que reaccionan rápidamente con otras moléculas dentro de los granos.

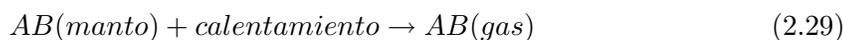
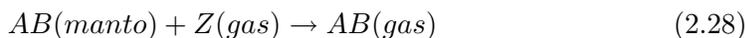
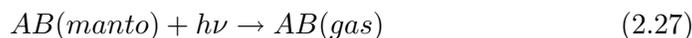
Básicamente, las reacciones que pueden producirse en los granos se esquematizan a continuación:

- **Acreción:** Los elementos más pesados se van condensando alrededor de un núcleo, creciendo hasta formar un grano. La acreción se produce en el medio circunestelar.
- **Reacciones de adsorción:** En este proceso las moléculas en fase gaseosa se adhieren a la superficie de los granos, emitiendo un fotón o cediendo la energía sobrante al grano.

En la sección 2.2.3 se mostrarán las fuerzas que influyen en estos procesos.



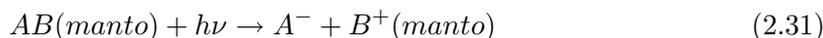
- **Dispersión:** Las moléculas pueden chocar contra los granos y cambiar su velocidad y dirección, obteniendo o perdiendo energía en el proceso. Esto puede calentar los granos de polvo y frenar a las moléculas disminuyendo su temperatura. La dispersión se producirá si la velocidad y la dirección entre el grano y la molécula no son las convenientes para la adsorción de esta última.
- **Reacciones de desorción:** Los átomos y moléculas que se encuentran en los mantos de los granos se liberan al absorber fotones, o al colisionar con partículas pesadas, o se evaporan al calentarse los granos. Cada molécula tiene una temperatura de evaporación diferente con lo cual las capas moleculares que envuelven al grano van a variar de composición según sea la temperatura de éste.



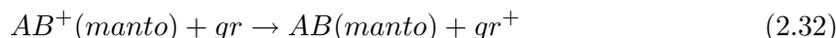
- **Reacciones en la superficie:** Las moléculas o átomos pesados quedan atrapados en las irregularidades de la superficie de los granos, y otros elementos, como el hidrógeno podrán desplazarse por la superficie hasta llegar a una de esas irregularidades y reaccionar con la molécula o átomo atrapado. El exceso de energía que se produce pasará al grano calentándolo. Este proceso es el que va a producir la creación de H₂ de manera eficiente. Cuando existe un incremento de la temperatura de los granos, radicales libres se podrán empezar a mover por la superficie de los granos y reaccionar con otros radicales y moléculas atrapadas.



- **Reacciones con fotones:** Estas reacciones, producidas tanto por fotones como por rayos cósmicos, nos permiten tener radicales libres en las superficies de los granos.



- **Intercambio de carga:** Puede haber un intercambio de carga entre un ion que se encuentre pegado al grano y el mismo grano.



- **Pulverizado o *Sputtering*:** Debido a colisiones del grano con núcleos pesados u otros granos, éste se puede erosionar o llegar a romper, liberando las moléculas del manto y elementos refractarios que formaban parte del núcleo.



Las velocidades de estas reacciones se representarán de forma parecida a las de las reacciones de la química en estado gaseoso, pero además serán necesarios otros parámetros, como los coeficientes de adherencia o de pegado y la movilidad de los elementos y radicales en la superficie de los granos. Estos parámetros dependen de la forma y composición de los granos, entre otras cosas, y son muy difíciles de estimar. Masuda et al. (1998) presentan un estudio de los coeficientes de pegado y de la movilidad del átomo de H sobre la superficie de los granos observando una importante dependencia con la temperatura.

Una vez producida la adsorción, la partícula permanecerá en la posición de la superficie en donde se ha pegado, pero en el caso de la adsorción física (que se explicará en el siguiente apartado), la partícula podrá moverse por difusión entre diferentes pozos de potencial de la superficie, con lo que será más probable alguna reacción química entre diferentes radicales o átomos. De nuevo la difusión dependerá del tipo de superficie que nos encontramos en los granos y de la temperatura de éstos. La ecuación que define este proceso sigue la fórmula de Arrhenius:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_{\text{dif}}}{RT}\right) \quad (2.34)$$

Donde D es el coeficiente de difusión, D_0 es el coeficiente de difusión inicial de la superficie, E_{dif} la energía de activación de la difusión, R la constante de los gases ideales y T la temperatura. A temperaturas muy pequeñas el hidrógeno y el deuterio pueden sufrir efectos cuánticos en las superficies que permiten una difusión no dependiente de la temperatura. A temperaturas suficientemente grandes ($RT \gg E_{\text{dif}}$), las partículas atrapadas podrán moverse libremente por las superficies con un movimiento aproximadamente browniano.

2.2.3 Pegado en los granos

La química de los granos va a venir en gran medida influenciada por cómo son las fuerzas que afectan a la adsorción y eyección de la moléculas. En la Fig. 2.2, vemos los diferentes potenciales típicos en la interacción de una partícula y un adsorbente. Para que una molécula pueda ser atrapada por un grano de polvo, su energía debe sobrepasar un potencial, y dependiendo de su energía de interacción, quedará atrapada con más o menos fuerza en el grano. Cuando una partícula (o molécula) se pega al grano, la adsorción puede ser física o química. En la Fig. 2.2 puede verse como están claramente separadas las energías de adsorción física y química. En el caso de la adsorción física, no existe un intercambio de electrones entre la superficie y la molécula, pero la molécula se polarizará para adaptarse a la superficie y se crearán enlaces de van der Waals, bastante frágiles. En el caso de la adsorción química existe un intercambio de electrones y se crea un enlace químico entre la superficie y la molécula. En todo caso, el posible pegado dependerá sobre todo de la superficie, pudiendo ser esta activa (cuando la adsorción química es muy probable) o pasiva (cuando sólo son posibles las adsorciones físicas). Como se puede ver en la Fig. 2.3 a veces habrá que superar un potencial para que pueda producirse la adsorción. Para la adsorción física lo habitual es que no haya que superar ningún potencial, pero para la adsorción química si. Si la partícula adsorbida atraviesa el potencial para poder producirse la adsorción química, caerá en un mínimo de potencial del que le será difícil salir. Por otro lado el mínimo de la adsorción física es mucho más pequeña y las partículas adsorbidas podrán moverse mucho más fácilmente por la superficie o ser eyectadas con un menor aporte de energía.

Cuando se produce una adsorción química, el enlace que se forma es muy direccional, y la interacción entre la partícula y la superficie dependerá enormemente de la posición y de la interacción con respecto a la superficie. También resultará posible que al incidir la molécula en el grano contacte más de una vez con la superficie de éste, perdiendo energía y resultando así más fácil el enlace entre ambos.

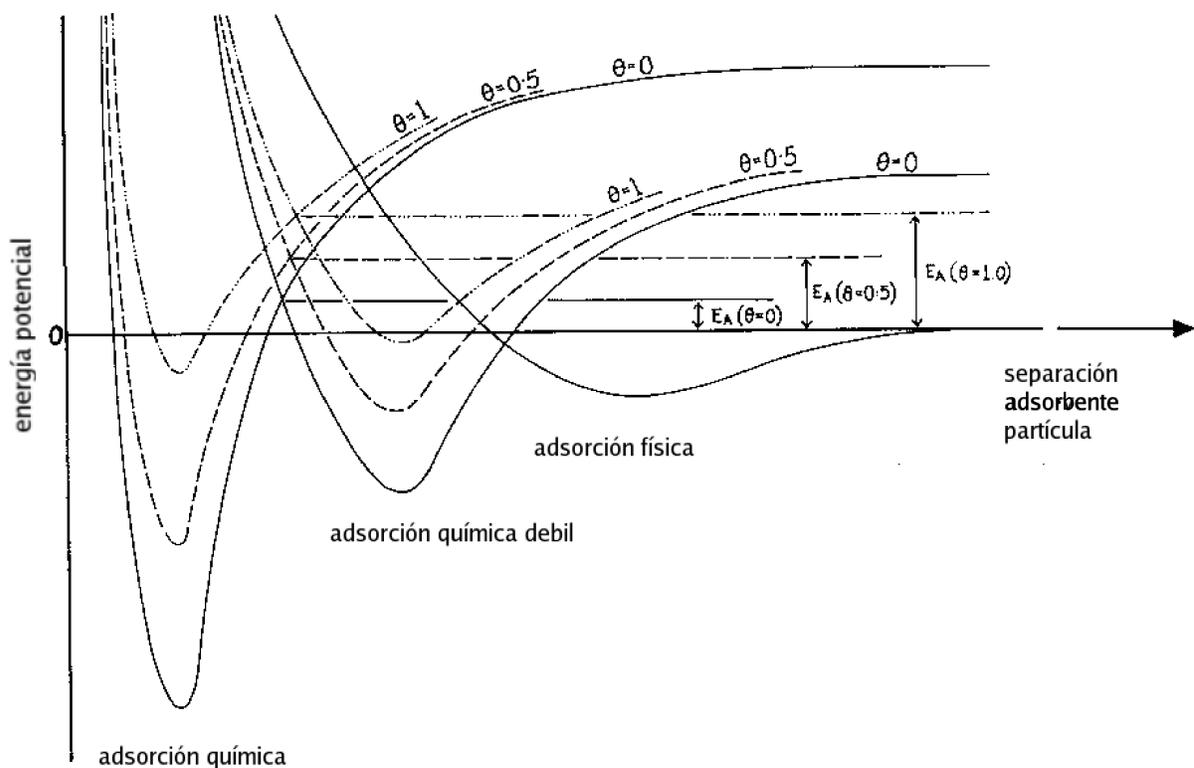


FIGURA 2.2: Energía potencial de interacción entre un adsorbente y una partícula que va a ser adsorbida. En esta se ven los distintos potenciales para la adsorción química, adsorción química débil o adsorción física en función de la cobertura de la superficie, θ . Se muestra también la energía de activación de cada potencial, E_A . Figura adaptada de Jones & Williams (1985).

Un parámetro que juega un papel muy importante es la probabilidad de pegado de las moléculas (S). Leitch-Devlin & Williams estudiaron en 1985 las probabilidades de algunos átomos y moléculas simples de pegarse a diferentes superficies. En la Tab. 2.2 se presentan algunos de sus resultados. En ella se muestra como la adsorción de los átomos se produce más difícilmente en superficies de óxido, y como la probabilidad de una adsorción química del H es más probable que una física. En este trabajo también se obtiene la variación del coeficiente de pegado para diferentes adsorbentes, partículas y temperaturas, tanto del gas como de los granos. Los coeficiente varían bastante dependiendo de todos los parámetros. Jones & Williams (1985) notaron además que este coeficiente va a variar según cuanto se vayan ocupando las posibles posiciones activas. En este caso lo que vamos a tener son capas

TABLA 2.2: COEFICIENTES DE PEGADO MÁXIMO PARA DIFERENTES SUPERFICIES

Especie	enlace	tipo de superficie			
		grafitos	silicatos	H ₂ O/grafitos	óxidos
H	físico	0.2	-	0.07	0.006
H	químico	0.9	0.9	-	0.3
D	químico	1.0	1.0	-	0.5
C	físico	0.4	0.02	0.2	0.00005
H ₂	físico	0.4	0.05	0.1	0.003
HD	físico	0.5	0.05	0.2	0.001
D ₂	físico	0.5	0.05	0.2	0.001

NOTA- Coeficientes de pegado máximos entre la especie incidente y la superficie para temperaturas $<100K$. Para los óxidos los máximos se encuentran a temperaturas mayores, pero son siempre menores a 0.4.

de nuevas moléculas cubriendo la superficie del grano, con características diferentes y por consiguiente, con coeficientes de pegado diferentes.

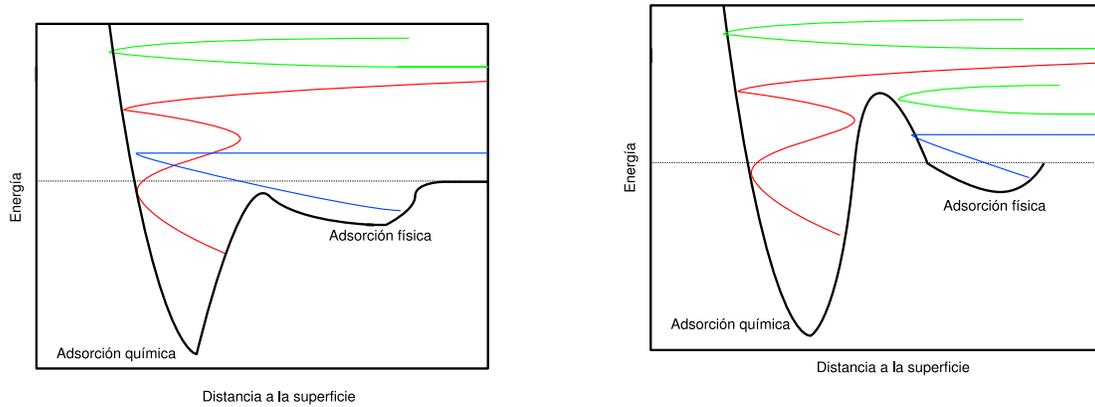


FIGURA 2.3: Pegado o no pegado según la energía relativa y el potencial.

Hollenbach & Salpeter (1970), utilizando un modelo de oscilador armónico simple, obtienen una expresión para el coeficiente de pegado:

$$S = \frac{\gamma^2 + 0.8\gamma^3}{1 + 2.4\gamma + \gamma^2 + 0.8\gamma^3} \quad (2.35)$$

$$\gamma \equiv \Omega(D\Delta E_S)^{1/2}/\kappa_B T \quad (2.36)$$

Donde Ω dependerá de los procesos de dispersión en la superficie, D es el potencial de adsorción atractivo y ΔE_S denota la cantidad de energía que se transfiere al grano en uno de los contactos entre éste y la molécula. Posteriormente, utilizando mecánica cuántica, Buch y Zhang (1991) estudiaron otra aproximación al coeficiente de pegado para átomos de hidrógeno y de deuterio sobre superficies amorfas. Obtuvieron la aproximación:

$$S = \left[\frac{\kappa_B T}{E_0} + 1 \right]^{-2} \quad (2.37)$$

donde κ es la constante de Boltzman, T la temperatura cinética asociada a la velocidad media y E_0 es un parámetro relacionado con el potencial de adsorción atractivo. Esta aproximación ya suponía que podían haber varios contactos consecutivos entre la partícula incidente y el grano, los cuales hacían que fuera mucho más fácil la creación de un enlace entre ambos.

El modelo de grano utilizado por Buch y Zhang era bastante simple (de unos 150 átomos), por lo que Masuda et al. (1998) presentaron un nuevo estudio con un modelo más realista de grano, obteniendo un nuevo ajuste para la ecuación que habían obtenido Buch y Zhang (1991).

Recientemente Al-halabi et al. (2004) han estudiado el coeficiente de pegado de la molécula de CO para superficies amorfas de agua helada, obteniendo valores ~ 1 para las temperaturas observadas en las nubes oscuras del MI (~ 10 K). Esto proporciona a esta molécula unos tiempos de vida en las superficies de los granos muy largos, permitiendo que se produzcan reacciones químicas en sus mantos. Según este estudio, se necesitarían temperaturas bastante superiores ~ 40 K para tener tiempos de vida en los granos más cortos y que se empiece a evaporar a fase gaseosa.

No se han hecho por ahora estudios mucho más detallados del coeficiente de pegado debido a que todavía está en debate cómo son en realidad los granos en el MI, así como sus características.

2.3 Modelos químicos

Para poder estudiar la química que se va a producir en una determinada nube molecular, se utilizan todas las reacciones conocidas para hacer un modelo de las abundancias que se observan, y que serán nuestra única referencia para comparar con las observaciones. La química va a estar muy influenciada por la densidad y por la temperatura en la zona, así como por la abundancia de granos de polvo y por los posibles choques.

En estos modelos la variación de densidad numérica ($n(i)$) de un compuesto “i” vendrá dada por las velocidades de las reacciones que lo crean y las que lo destruyen:

$$\frac{dn(i)}{dt} = \underbrace{\sum_l \sum_j \kappa_{lj} n(l) n(j)}_{l+j \rightarrow i+h} - n(i) \underbrace{\sum_j \kappa_{ij} n(j)}_{i+j \rightarrow l+h} \quad (2.38)$$

Como se puede ver en esta ecuación, la densidad del compuesto i aumentará con todas las reacciones entre compuestos l y j que lo formen en proporción a la constante cinética de las reacciones (κ_{lj}) y a las densidades de los reactivos ($n(l)$, $n(j)$). Al mismo tiempo la abundancia de i disminuirá al reaccionar este compuesto con otro reactivo j .

En los modelos se suelen usar un gran número de reacciones para poder estudiar correctamente la evolución de las abundancias en fase gaseosa. Existen bases de datos de reacciones como la de la Universidad de Manchester, UMIST udfa⁰⁶ (Woodall et al. 2007), y la de Ohio State University osu.2003 (www.physics.ohio-state.edu/~eric/research.html); en las que podemos encontrar miles de constantes cinéticas para reacciones de cientos de especies.

2.3.1 Modelos en fase gaseosa

En general los modelos de química en fase gaseosa del MI pueden ser de dos tipos:

- Modelos estacionarios en el tiempo, variables con la profundidad a lo largo de una estructura. Aplicables en envolturas exteriores de las regiones de formación estelar, envolturas de estrellas evolucionadas o zonas donde existe radiación UV o de rayos-X importante.
- Modelos dependientes del tiempo, que no dependen de la profundidad. Las abundancias varían con el tiempo en una posición determinada en la nube. Estos modelos son utilizados para nubes oscuras, envolturas en colapso y núcleos calientes. Los procesos químicos llegarán a un estado estacionario después de 10^5 a 10^7 años, dependiendo de la tasa de ionización por rayos cósmicos, la temperatura, la densidad y las especies moleculares que se consideren dentro del modelo.

En estos modelos se debe introducir gran variedad de parámetros, como las abundancias de los elementos más importantes (C, O, N, S, metales...) y la tasa de ionización por rayos cósmicos.

Para los modelos estacionarios en el tiempo será necesario también conocer la geometría, la densidad en función de la posición, el campo de radiación incidente y diferentes parámetros de los granos (curva de extinción, albedo y función de dispersión).

Las temperaturas en función de la posición se obtendrán a partir de las reacciones de calentamiento y de enfriamiento, aunque en ocasiones se utilizan temperaturas que se obtienen de las observaciones.

En los modelos dependientes del tiempo es necesario conocer la densidad de H_2 en función del tiempo, la extinción visual (A_v) en la posición de la nube que se esté considerando y las abundancias iniciales de varias especies a $t=0$, normalmente serán todas de especies atómicas excepto H_2 . La temperatura también se obtiene del balance térmico, aunque en muchos casos se suele usar la temperatura observada. Un elemento muy importante en los dos tipos de

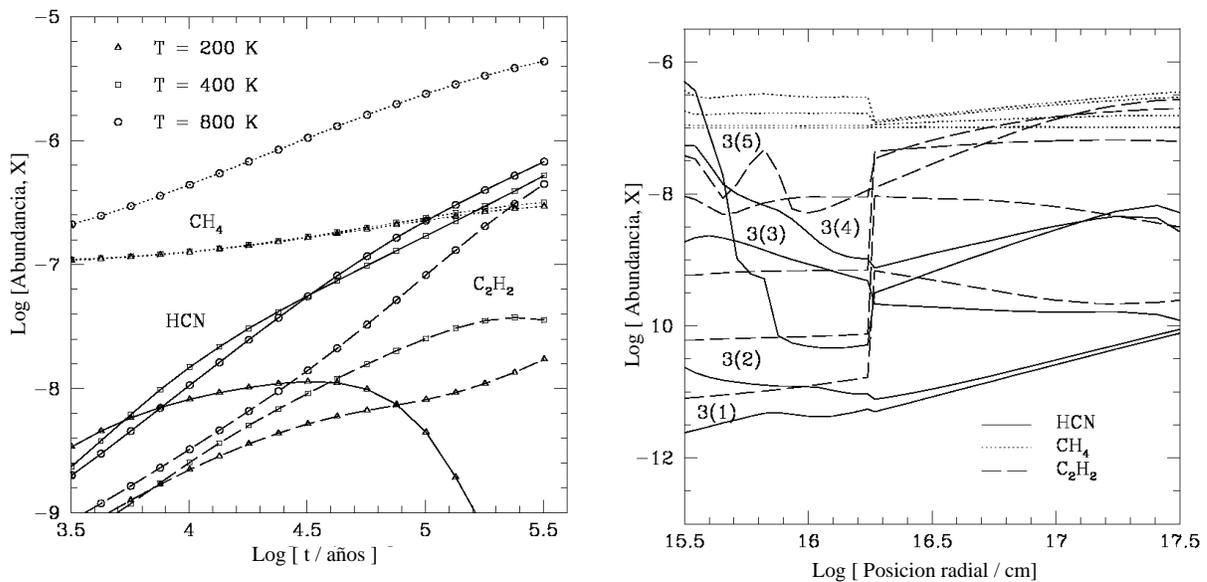


FIGURA 2.4: Modelos de Doty et al. (2002), donde se puede ver la evolución química para algunas moléculas en una región de formación estelar, Izq: con respecto al tiempo y a la temperatura, y Drcha: con respecto a la posición y tiempo ($a(b) = a \times 10^b$ años).

modelos es la abundancia de C en forma atómica o en forma de compuestos moleculares. La

presencia de C atómico es esencial para la creación de moléculas orgánicas complejas (MOCs), pero esto sólo será posible en las fases iniciales de los modelos dependientes del tiempo y a ciertas profundidades en los modelos dependientes de la profundidad, ya que el todo el C tenderá a formar CO.

Con las posibilidades actuales de cálculo se realizan modelos mezclando los dos tipos de modelos, teniendo en cuenta la variación con respecto del tiempo y con respecto de la profundidad. En la Fig. 2.4 se muestra un ejemplo de estos modelos en una región de formación estelar.

2.3.2 Modelos gas-grano

En este caso se tendrán en cuenta las reacciones que se puedan producir en los mantos helados de los granos. Para acoplar la química de los granos y la del gas se suelen hacer dos aproximaciones:

- La química dominada por la velocidad a la que las moléculas son absorbidas por los granos, con tiempos de reacción cortos.
- Las reacciones son las que dominan la química, tendremos siempre reacciones entre moléculas que están atrapadas en los granos.

En estos modelos se modifica la ecuación 2.38, introduciéndose dos términos en los que se representan las posibles adsorciones y desorciones que se pueden producir en los granos:

$$\frac{dn(i)}{dt} = \sum_l \sum_j \kappa_{lj} n(l) n(j) - n(i) \sum_j \kappa_{ij} n(j) - R_{acr}(i) + R_{des}(i) \quad (2.39)$$

Además se utiliza la ecuación de las reacciones en los granos:

$$\frac{dn_s(i)}{dt} = \sum_l \sum_j \kappa_{lj} n_s(l) n_s(j) - n_s(i) \sum_j \kappa_{ij} n_s(j) + R_{acr}(i) - R_{des}(i) \quad (2.40)$$

donde n_s es el número de partículas en granos por unidad de volumen y R_{acr} y R_{des} son las tasas de acreción y de desorción en cada caso.

Estos modelos son muy complejos y los términos R_{acr} y R_{des} variarán dependiendo de los procesos físicos del MI en el que se producen, así como de las propiedades de los granos y de los mantos helados. Habrá zonas en las que las adsorciones y desorciones serán aleatorias, ya que no hay ningún proceso que haga que las transiciones grano-gas sean importantes, y otras regiones donde por calentamiento, enfriamiento o colisiones, los cambios de fase (tanto de sólida a gaseosa como de gaseosa a sólida) serán más importantes. Para nubes oscuras con temperaturas de ~ 10 K los mantos de los granos no podrán evaporarse y para ellos se considera el límite por acreción de la moléculas a los mantos, que puede ser estudiado con el método de Monte Carlo. Para que se produzcan las evaporaciones térmicas deben presentarse unas temperaturas elevadas en el grano > 20 K. La energía que se genera en la creación de algunas moléculas puede ser suficiente como para liberarlas y producir una evaporación puntual, además pueden existir otros procesos de calentamiento puntuales como los debidos a rayos cósmicos o a reacciones exotérmicas de radicales. Algunas moléculas puede pasar a fase gaseosa al ser erosionados de los granos por las colisiones con rayos cósmicos, con átomos pesados o con otros granos a velocidades mayores de 0.1 km s^{-1} . Las eficiencias de estos

procesos dependerán tanto de las propiedades de los granos como de las energías que unen las moléculas a los granos. Además, algunas moléculas son más fáciles de liberar (N_2 , no polar) que otras (H_2O , polar). El pegado de las moléculas en los granos dependerá entre otras cosas del coeficiente de pegado que, como se veía en la sección 2.2.3, depende principalmente de la temperatura de los granos y de la forma y composición química de la superficie; de la densidad y de la temperatura del gas. Cuanto mayor densidad de gas y más fríos los granos, más se pegarán las moléculas. La temperatura del gas que representa la agitación de las moléculas también estará implicada, si la velocidad (temperatura) es muy grande se inhibirá el pegado de las moléculas.

En los modelos actuales, como los de Caselli et al. (1993) se suele comenzar con una química “tranquila”, donde domina la fase gaseosa, se deja evolucionar y cuando se llega a un estado estacionario se tiende a desestabilizar la zona, ya sea por choques o por un aumento de la temperatura en la zona. Ésto hace que las moléculas que se han formado en la superficie de los granos salgan de estos y contaminen las abundancias que han sido procesadas en fase gaseosa. Después de las abundancias químicas evolucionan en fase gaseosa. Si el medio vuelve a enfriarse o si el choque ha pasado muchas de las moléculas volverán a pegarse a los granos, con lo que disminuirán las abundancias de las moléculas en fase gaseosa.

2.4 Química típica de diferentes regiones del medio interestelar

Con el fin de comprender los procesos de formación de las abundancias de las moléculas orgánicas complejas, es necesario introducir la química que se produce en regiones específicas como fases fundamentales en el ciclo de la materia interestelar. El conocimiento de los fenómenos que se producen en estas regiones nos proporcionarán la base para entender la química que se observa en el CG. Las químicas a tener en cuenta son en las que se incluyen las regiones de choques, los núcleos calientes y las PDRs.

2.4.1 Química en nubes moleculares densas y frías (nubes oscuras)

En estas nubes nos encontramos temperaturas pequeñas (~ 10 K) y densidades del orden de 10^{3-4} cm^{-3} . La abundancia de iones es muy importante dado que éstos gobiernan el acoplamiento del gas con los campos magnéticos y por lo tanto intervienen en la capacidad de la nube en colapsar formando estrellas. Además, como se ha visto en la sección 2.2.1, la química de los iones es mucho más rápida y domina sobre otro tipo de reacciones. La abundancia típica respecto al H_2 de iones variará desde 10^{-4} para las partes exteriores hasta 10^{-9} – 10^{-8} de la parte central. Los principales iones deben ser H_3^+ , HCO^+ , H_3O^+ e iones metálicos como Mg^+ y Fe^+ . El método más usual para calcular la fracción de ionización $x(e)=n(e)/n(\text{H}_2)$ es el calcular las razones $\text{DCO}^+/\text{HCO}^+$ en la zona externa y $\text{N}_2\text{D}^+/\text{N}_2\text{H}^+$ en la zona interna de la nube oscura (Caselli 2002).

En estas nubes se suelen encontrar grandes abundancias de cadenas de carbono insaturadas (Ohishi & Kaifu 1998). Estas abundancias son fácilmente explicables mediante la química en fase gaseosa, con moléculas características como C_2S , HC_3N y HC_5N . En el

contexto de la evolución temporal de la química se sugiere que la molécula NH_3 tiene mayores abundancias para nubes más viejas.

Se suelen usar razones moleculares del estilo de $\text{C}_2\text{S}/\text{NH}_3$ para modelar las zonas de gas difuso y los núcleos densos, NH_3 marcaría las zonas más densas y C_2S las partes externas y menos densas. Existen nubes muy homogéneas, que tienen mayores posibilidades de evolucionar hacia una estrella masiva.

Se han estudiado los mantos helados de los granos en estas nubes oscuras y se han podido detectar H_2O , CO y CO_2 , indicando que muchos de los elementos pesados estarán en forma sólida. Otra razón de abundancias interesante en estas nubes resulta ser HNC/HCN que es un trazador de temperaturas bastante bueno para estas regiones.

2.4.2 Química en regiones con choques

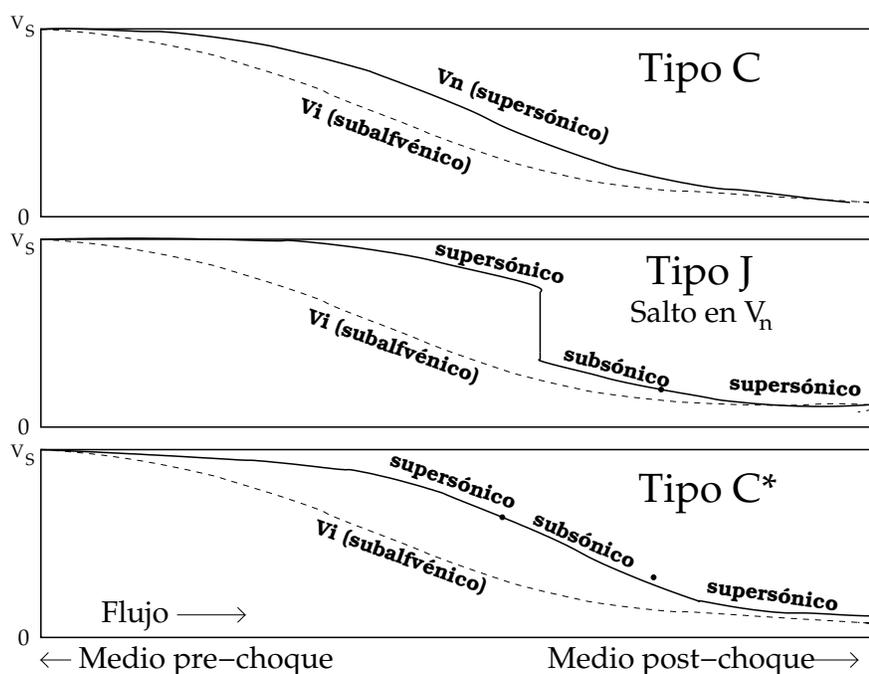


FIGURA 2.5: Diferentes tipos de choque. Figura de Draine & McKee (1993).

El escenario más frecuente donde se puede encontrar esta química lo proporcionan los flujos bipolares de materia que generan las estrellas al formarse. Estos flujos consisten en materia que es acelerada desde las partes más internas de la región de formación, lo que produce una química típica, que se denomina de choques, al interaccionar el viento rápido con la envoltura molecular y la nube ambiente. El tipo de choques que se produzcan provoca una diferenciación química; los choques pueden ser de tipo-J (de salto, “*jump*”) o de tipo-C (continuo, “*continuos*”) que difieren en la velocidad del choque, en la fuerza del campo magnético y en la fracción de ionización del gas antes del choque. Normalmente nos encontraremos con un choque intermedio, en la Figura 2.5 vemos la variación de la velocidad del gas a medida que se propaga el choque en la nube ambiente para choques tipo-C, tipo-J y los tipo-C*, Draine & McKee (1993). Los choques tipo-C* son una mezcla de los de tipo-C y de los de

tipo-J, en el que se pasa de un estado supersónico a subsónico sin ninguna discontinuidad.

En los choques de tipo-J la temperatura que se alcanza es muy grande de $\sim 10^5$ K con lo que todas las moléculas se disociarán. En este tipo de choques se forman tres regiones bien diferenciadas (Fig. 2.6). En la primera zona existirá radiación UV generada por el choque que foto-disociará las moléculas antes de que se produzca el choque. Esta región se conoce como el precursor radiativo del choque tipo-J. A continuación nos encontramos con el frente de choque, que constituye una discontinuidad en las características del gas neutro y del gas ionizado. Después del choque las moléculas se irán formando en una zona templada que este deja a su paso y en la que el gas se está enfriando rápidamente por efecto de las desexcitaciones y recombinaciones de moléculas e iones.

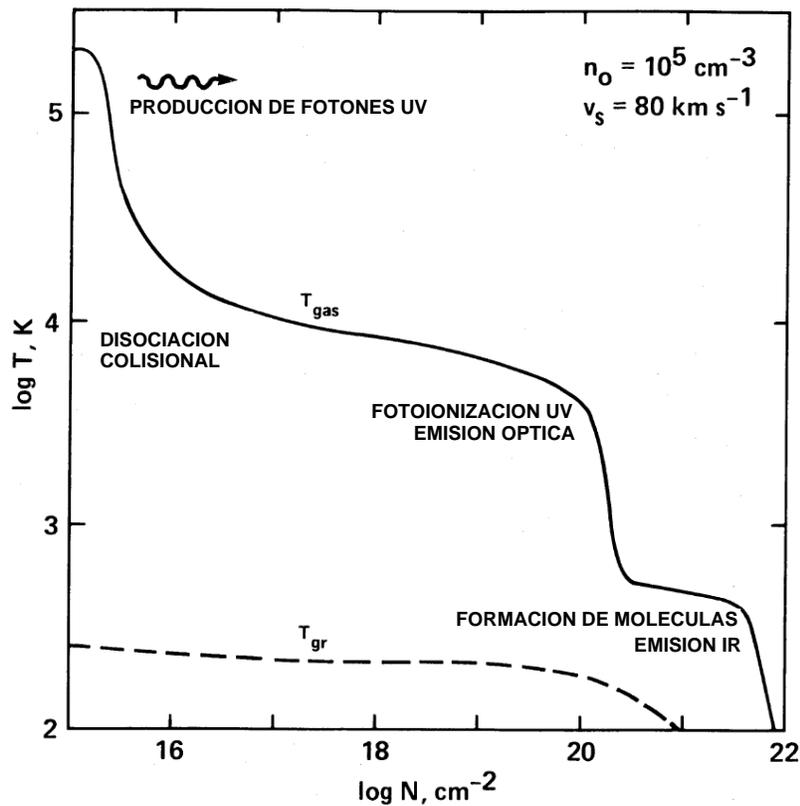


FIGURA 2.6: *Diferentes regiones de los choques tipo-J. Figura de Hollenbach & McKee (1989).*

En este caso (tipo-J) el precursor, la radiación UV, puede producir cambios considerables en la química posterior (Shull & McKee 1979). Además de estos procesos que se producen en fase gaseosa encontraremos una química rica en moléculas complejas debido a la erosión que produce la onda de choque en los granos de polvo y sus mantos. Con los choques tipo-J se obtienen grandes abundancias de elementos refractarios como el Si y el Fe al destruirse por completo los granos o al erosionarse sus núcleos.

Dependiendo de la densidad del gas y de los campos magnéticos, el acoplamiento de los iones y electrones con el gas neutro mediante colisiones puede ser diferente. Por regla general los dos fluidos, el iónico y el neutro, están acoplados, y los campos magnéticos que pudiesen existir estarían a su vez acoplados a ambos fluidos. En el caso de un gas poco denso,

el número de colisiones será menor, y podremos tener desacoplados los fluidos iónicos con respecto a los neutros; el campo magnético se podría acoplar al fluido iónico, pero no tendría en cuenta al neutro. Este último caso es el que produce la existencia de los choques tipo-C o no disociativos.

En el MI la fracción de ionización es pequeña y los choques entre iones y átomos neutros no son suficientemente numerosos como para acoplarlos en escalas de tiempo cortas. En este caso el gas molecular se podrán tratar los neutros y los iones como dos fluidos diferentes y el campo magnético quedará acoplado sólo al material ionizado. En estos choques tipo-C existirá un precursor magnético (Draine 1980), los iones son capaces de percibir la perturbación antes de que éste sea percibido por los neutros. Por ello, no se producirá ningún cambio brusco en las condiciones del medio. En los choques tipo-C, el desacoplamiento de las velocidades de iones y átomos neutros provoca que la temperatura no aumente tanto como en los choques tipo-J. Esta temperatura alcanzará los 2000–4000 K, demasiado pequeña como para que la foto-ionización sea importante, pero permitiendo algunas reacciones endotérmicas como $O+H_2 \rightarrow OH \rightarrow H_2O$; que ocurren muy rápidamente en fase gaseosa convirtiendo todo el oxígeno en H_2O (Pineau des Forêts et al. 1993). Otras reacciones como $S+H_2 \rightarrow SH \rightarrow H_2S$, también endotérmica, necesitarían temperaturas aún mayores para poder producirse. La presencia de H_2S en las regiones con choques de tipo-C parece debida a la eyección de esta molécula de los granos (Charnley et al. 1997). Estos compuestos también se pueden destruir con las reacciones inversas por lo que habrá un balance entre O, OH y H_2O que dependerá de la razón H/H_2 en el choque. El OH, al reaccionar con elementos como S, Si y N, puede producir de manera efectiva SO, SiO y NO. En los choques tipo-C lo que se produce es una erosión de estos mantos o de los núcleos de los granos, muchas átomos más pesadas que el He pueden pasar a la fase gaseosa e influir en la química.

2.4.3 Núcleos calientes (Hot Cores)

Cuando una proto-estrella masiva comienza a calentar su envoltura aparecen los llamados núcleos calientes. La proto-estrella calentará a temperaturas de $\gtrsim 100$ K una región pequeña (≤ 0.1 pc) y densa ($\sim 10^6$ cm $^{-3}$) a su alrededor. En muchos de estos núcleos calientes se encuentran máseres y signos de existencia de algún flujo bipolar cercano. En cuanto a la química de los núcleos calientes se encuentran moléculas hidrogenadas como H_2O , NH_3 y H_2S y una gran variedad de moléculas orgánicas complejas como CH_3OH , C_2H_5OH , CH_3CN , $(CH_3)_2O$, $HCOOCH_3$ y CH_3CH_2CN . Se encuentran también gran cantidad de especies deuteradas, como HDO, DCN, HDCO, D_2CO y CH_2DCN . Las abundancias de estas moléculas no pueden ser debidas únicamente a la química en fase gaseosa: es necesario introducir la química que proviene de la evaporación de los mantos de los granos de polvo debido al calentamiento que éstos sufren en los núcleos calientes.

Los núcleos calientes típicos son los asociados a proto-estrellas muy masivas, pero recientemente se han descubierto núcleos calientes aún más pequeñas que parecen ser calentadas por una estrella recién formada, pero menos masiva. El tamaño de la proto-estrella parece influenciar en la química, las proto-estrellas poco masivas influyen únicamente en una región muy cercana de la estrella, pero de manera muy eficaz (Maret et al. 2005; Bottinelli et al. 2004a, 2004b). Todavía existe una discusión acerca de qué produce las variaciones de la química entre los dos tipos de núcleos calientes. Jorgensen et al. (2007) presentan la hipótesis de que la existencia de choques, debidos a flujos bipolares producidos por la for-

mación estelar, es la que produce las variaciones. Pero Bottinelli et al. (2007) apuestan por variaciones locales en las abundancias de los mantos de los granos en estas regiones internas afectadas fuertemente por radiación emitida por la proto-estrella.

Brown et al. (1988) construyeron un modelo en el que comienzan con una química en fase gaseosa durante el colapso de la nube hasta que la densidad del medio hace que todas las especies estén condensadas en granos. A continuación se deja evolucionar la química en la superficie de los granos, por medio de reacciones con el hidrógeno; en un determinado momento el calentamiento producido por la nueva estrella evapora las moléculas de los granos al medio gaseoso. Este modelo no permite que las moléculas evolucionen mucho en la fase de núcleo caliente. Existen gran cantidad de modelos en núcleos calientes en los que varían, entre otras cosas, las moléculas que se pueden evaporar de los granos y sus abundancias. Muchos de estos modelos toman como referencia núcleos calientes bien conocidos como los que se encuentran en Orion (Millar et al. 1991; Charnley et al. 1992, 1995), donde encontramos un núcleo caliente donde predominan las especies nitrogenadas (el núcleo caliente de Orion, IRC2) y otro en el que predominan las oxigenadas (“Compact Ridge”). Rodgers & Charnley (2001) presentan un modelo para explicar las abundancias de ambas familias de moléculas mediante evaporación de mantos de granos cuyos hielos son una mezcla de CH_3OH y NH_3 .

Tras el paso de las moléculas desde los mantos de los granos a fase gaseosa, existen dos clases de reacciones que inician la química de los núcleos calientes. Reacciones con hidrógeno atómico ($\text{H}_2\text{S} + \text{H} \rightarrow \text{SH} + \text{H}_2$), y reacciones con moléculas protonadas que sufren después una recombinación radiativa ($\text{H}_2\text{O} + \text{H}_3^+ \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2 \Rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{OH} + \text{H}_2$).

Según este tipo de modelos existirán tres clases de especies:

- Moléculas que se producen en el pre-colapso, y que han quedado inalteradas en los mantos de los granos. Creadas mediante reacciones ion-molécula en un nube densa y fría, se denominan congeladas.
- Moléculas que se han creado en la superficie de los granos, denominadas de primera generación.
- Moléculas que se producen en una química gaseosa muy rápida después de la evaporación de los mantos, denominadas de segunda generación.

En la actualidad existen discusiones acerca de en qué grupo colocar algunas moléculas, debido a que se pueden formar tanto en fase gaseosa como en estado sólido y a que recientemente se ha descubierto que para algunas moléculas, que inicialmente se suponía se formaban en fase gaseosa, las reacciones de formación en fase gaseosa son más lentas de lo esperado y se forman más plausiblemente en los mantos de los granos de polvo (Geppert et al. 2006).

Recientemente Garrod & Herbst (2006) han presentado un nuevo modelo en el que introducen una nueva variación con respecto a los anteriores. En este modelo es posible una variación más lenta de la temperatura en la fase de encendido de la estrella, con lo que permite que los granos se calienten y se produzcan reacciones químicas en sus superficies que en modelos anteriores no se podían producir. Estos modelos intentan reproducir la diferenciación química observada entre los núcleos calientes masivos y poco masivos variando la velocidad en la que se produce el calentamiento. En este artículo no se logra hacer coincidir los resultados

de los modelos con los resultados de las observaciones en las regiones de formación de estrellas poco masivas, pero consiguen obtener mejores ajustes que los modelos anteriores.

En principio, los modelos dependientes de tiempo nos ofrecen la oportunidad de estudiar la edades de los núcleos calientes y de la evaporación de los granos mediante el estudio de las moléculas de primera y segunda generación. Comparando las abundancias relativas de las diferentes moléculas con las de los modelos podremos estimar cuándo se ha producido la evaporación de las moléculas. El deuterio, mediante la razón D/H también puede darnos una estimación de la edad, ya que esta razón no cambia en el gas caliente al menos en un periodo de $\sim 10^4$ años. El problema en estas regiones de formación estelar es que en su interior no se esté formando sólo una estrella, sino varias, y que los flujos bipolares que se produzcan en su interior puedan influir en las abundancias de algunas especies dificultando la comparación con los modelos.

2.4.4 Regiones de foto-disociación (PDRs)

La presencia de flujos de fotones ultravioleta intensos en algunas regiones del MI producirán una química diferente. Estas regiones conocidas como PDRs se pueden encontrar en la envoltura de una estrella recién formada, cercana a una estrella masiva, en la parte externa de una nube oscura a la que le llegan fotones del MI, o en una zona con un flujo de rayos cósmicos importante. Tanto las propiedades químicas como las físicas van a estar controladas por este flujo de fotones UV, que van a producir un aumento de la temperatura y de los procesos de foto-ionización y foto-disociación. De entre los modelos que se presentan en la bibliografía destaca el de Sternberg & Dalgarno (1995), en el que se presenta un estudio minucioso de las reacciones que se van a producir en las distintas zonas de la PDR, cuando al introducirnos en la nube la extinción va aumentando y la cantidad de fotones va siendo menor. Una de las características químicas más importante, y por la que se pueden encontrar y estudiar estas regiones, es la gran abundancia de iones; en la Tab. 2.3 se presenta una distribución de las moléculas que pueden estar presentes en diferentes zonas de la PDR según Sternberg & Dalgarno (1995), en función de la extinción visual A_v .

Algunos de los iones más interesantes son CO^+ , HCO^+ y HOC^+ (Savage & Ziurys 2004) ya que sus razones de abundancias ayudan a reconocer y diferenciar PDRs. Un aspecto a resaltar es que en los hielos se puede producir un procesado diferente por la incidencia de estos fotones en el interior de los hielos, obteniéndose material refractario orgánico rico en C, pero no en H u O.

2.5 Química de las moléculas orgánicas complejas (MOCs)

En el siguiente apartado se presentarán las hipótesis que existen hoy en día para explicar la formación de algunas MOCs, viendo cuan complejas pueden llegar a ser las estructuras moleculares que nos podemos encontrar en el MI.

Se comenzará con las moléculas que serán estudiadas en el Cap. 3, para ir aumentando la complejidad posteriormente. La química de los alcoholes que se verá en este capítulo comienza con alcoholes más simples, el metanol (CH_3OH) y de etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$).

- El metil alcohol o metanol es el más simple de los alcoholes. Ha sido observado tanto en fase gaseosa, detectado por primera vez por Ball et al. (1970) en Sgr B2 y Sgr A;

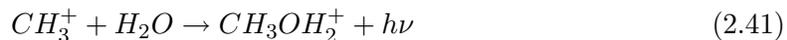
TABLA 2.3: ÁTOMOS Y MOLÉCULAS EN PDRS

Familia	H_I H/H ₂	C_{II}	S_{II}	Si_{II}	S_I	Núcleo oscuro
	$A_v=0 \rightarrow 0.7$	$0.7 \rightarrow 1.7$	$1.7 \rightarrow 3.7$	$3.7 \rightarrow 6$	$3.7 \rightarrow 6$	$A_v > 10$
Hidrógeno	H H ⁺ H ₂ ⁺ H ₃ ⁺	H ₂ H ₂ ⁺	H ₂	H ₂	H ₂	H ₂ H ₃ ⁺
Oxígeno	O O ⁺ OH H ₂ O OH ⁺ H ₂ O ⁺ H ₃ O ⁺ O ₂ O ₂ ⁺	O OH	O	O	O	O H ₂ H ₃ O ⁺ O ₂ O ₂ ⁺
Carbono	C C ⁺ CH CH ₂ CH ₃ CH ⁺ CH ₃ ⁺ CH ₄ ⁺ CH ₄ ⁺ CH ₅ ⁺	C C ⁺ CH CH ₂ CH ₃ CH ⁺ CH ₃ ⁺ CH ₄ ⁺ CH ₄ ⁺ CH ₅ ⁺	CH ₄ CH ₅ ⁺
Azufre	S ⁺ SH ⁺	S ⁺	S ⁺ SH H ₂ S ⁺	S	SH ₂ SH ₂ S ⁺	...
Nitrógeno	N NH NH ₂ NH ⁺ NH ₂ ⁺ NH ₃ ⁺	N	N	N	NN ⁺ N ₂ ...	NN ⁺ N ₂ NH ₃ NH ₄ ⁺ N ₂ N ₂ H ⁺
Silicio	Si ⁺	Si ⁺	Si ⁺	Si Si ⁺ SiH SiH ₂ ⁺	Si Si ⁺
Mezcla O	CO CO ⁺ HCO ⁺ SO ⁺ NO NO ⁺ SiO ⁺ SiOH ⁺	CO ⁺ HCO ⁺	CO	CO	CO SO	CO HCO ⁺ SO SO ₂ SO ⁺ NO NO ⁺ SiOH ⁺ SiO SiO ₂
Mezcla C	CS ⁺ HCS ⁺ CN HCN CN ⁺ HCN ⁺ H ₂ CN ⁺	CS ⁺ HCS ⁺ CN HCN CN ⁺ HCN ⁺	CS HCS HCS ⁺ HCN OCS	HCS ⁺ HCN OCS... ...

NOTA- Átomos y moléculas que se pueden encontrar en las diferentes regiones de una PDR (H_I , C_{II} , etc.) según la extinción visual (A_v). Tabla obtenida de Sternberg & Dalgarno (1995).

como en fase sólida, detectado por Grim et al. (1991). Además se ha podido observar tanto en regiones de formación estelar como en nubes oscuras (Friberg et al. 1988). El isotópologo ¹³C del CH₃OH, fue detectado por primera vez en el MI por Gottlieb et al. (1979) en Sgr B2. La presencia de CH₃OH sobre los mantos de los granos y su gran abundancia en fase gaseosa en regiones de choques y de temperaturas elevadas, sugieren el papel fundamental que la evaporación o eyección de los mantos de los granos juegan en la química de esta molécula en estas regiones.

Esta molécula se suponía que podía formarse en fase gaseosa a partir de:

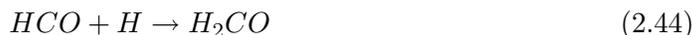


seguida de la recombinación:



Pero Geppert et al. (2006) han estudiado la reacción 2.42, encontrando que no se forma CH₃OH, sino que se produciría una disociación y se formarían moléculas más pequeñas. De cualquier manera las abundancias observadas en regiones calientes y de choques eran superiores a las que se esperaban encontrar y ya se había supuesto la formación principal de esta molécula en los mantos de los granos de polvo por hidrogenación de

CO (Watanabe et al. 2003)



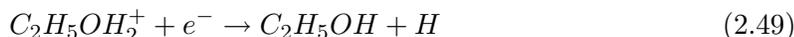
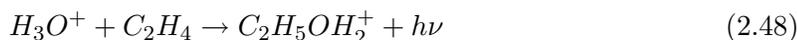
o mediante la reacción en la superficie de los granos:



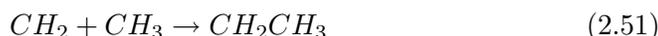
propuesta por Sorrel (2001).

- El alcohol etílico (C_2H_5OH) fue observado en fase gaseosa por primera vez en Sgr B2 por Zuckerman et al. (1975). Al igual que el CH_3OH , esta molécula presenta grandes abundancias en regiones templadas y densas por lo que se supuso que se podía formar en los granos de polvo además de en fase gaseosa (Millar et al. 1988; Charnley et al. 1995). Se han podido calcular límites superiores en la fase sólida (Boudin et al. 1998) y se ha observado que su emisión está generalizada en todo el CG. Esta emisión estaría producida por una química de choques (Martín-Pintado et al. 2001).

La ruta de formación de esta molécula en fase gaseosa es:

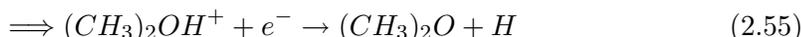


Para la formación de esta molécula en los hielos de los granos, existen varias rutas que incluyen hidrogenaciones y oxidaciones. A partir de CO, C_2H_2 (Charnley & Rodger 2005; Tielens 1992). También Sorrell (2001) propuso las reacciones:



en los mantos de los granos.

- Dimetil éter ($(CH_3)_2O$) es un isómero del C_2H_5OH que se detectó por primera vez en el espacio por Snyder et al. (1974) en la fuente de Orión. En el MI existen gran variedad de isómeros, que son moléculas con los mismos componentes atómicos, pero diferentes estructuras. Sus abundancias en nubes oscuras pueden ser explicadas a través de reacciones en fase gaseosa (Peeters et al. 2006). Las reacciones en fase gaseosa que se plantean son:



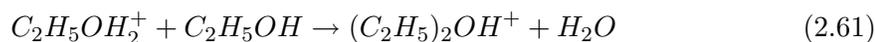
De cualquier manera, los estudios de Geppert et al. (2006) parecen indicar que su formación en fase gaseosa puede no ser posible. Además esta molécula no ha podido ser observada en las nubes oscuras. No hay ninguna indicación observacional de que pueda crearse en los mantos de los granos, pero se han propuesto algunas reacciones de formación en éstos (Ehrenfreund & Charnley 2000), sin tampoco estar validadas en el laboratorio.

- La presencia de formato de metilo (HCOOCH_3) en Sgr B2 fue descubierta por Brown et al. (1975) y por Churchwell & Winnewisser (1975). No se ha podido detectar en las nubes oscuras y su formación se ha relacionado recientemente con la química en los hielos de los mantos de los granos. Esto es debido a que no se pueden explicar sus abundancias en fase gaseosa de núcleos calientes debido a que las reacciones de formación en fase gaseosa que se barajan para esta molécula:



son muy lentas y no permiten obtener las abundancias observadas (Horn et al. 2004). Para su formación en los granos existen dos posibilidades, la existencia o formación inicial de CH_3O y HCO que después reaccionan para formar HCOOCH_3 (Charnley & Rodgers 2005; Bennett & Kaiser 2007) o la propuesta por Sorrel (2001) en la que se necesitaría haber formado los radicales COOH y CH_3 inicialmente.

- El etil metil éter ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OCH}_3$) y el dietil éter ($(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$) han sido detectadas de manera tentativa en los núcleos calientes Sgr B2N, W51 y Orión-KL (Kuan et al. 1999; Fuchs et al. 2005); mientras que todavía no se ha hecho pública ninguna detección de HCOOC_2H_5 . Estas moléculas pueden formarse en fase gaseosa de la misma manera en la que se formaban $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y HCOOCH_3 a partir de CH_3OH .



A partir de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y de $(\text{CH}_3)_2\text{OH}^+$ obtenidos en las reacciones 2.53 y 2.54, se puede obtener el $\text{CH}_3\text{OC}_2\text{H}_5$:



Hasta ahora se han presentado las reacciones que crean las moléculas, pero no las que las destruyen. Para todas estas moléculas existen múltiples reacciones de destrucción, pero las reacciones de formación son normalmente más rápidas. Sólo cuando las moléculas progenitoras empiecen a tener abundancias menores, o cuando exista un flujo de fotones UV o de rayos-X intenso que las destruyen, las velocidades de algunas de las reacciones de destrucción pueden ser importantes y disminuir la abundancia de las MOCs. Algunas

de las reacciones en las que intervienen estas moléculas y sus velocidades de reacción se pueden encontrar en las bases de datos de udfa⁰⁶ (Woodall et al., 2007) y de OSU.2003 (www.physics.ohio-state.edu/eric/research.html).

La química de los alcoholes siempre se ha relacionado con los núcleos calientes donde, debido a la evaporación de los mantos de los granos, se pueden encontrar grandes abundancias de CH_3OH y de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Usando las reacciones antes comentadas Millar et al. (1991) y Charnley et al. (1992, 1995) obtienen modelos en fase gaseosa para núcleos calientes. En estos modelos se parte de unas abundancias iniciales en fase gaseosa de CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCO^+ , H_2CO y H_3O^+ grandes, que han sido eyectadas de los mantos helados de los granos, y se deja evolucionar el sistema en fase gaseosa. Los modelos de Charnley et

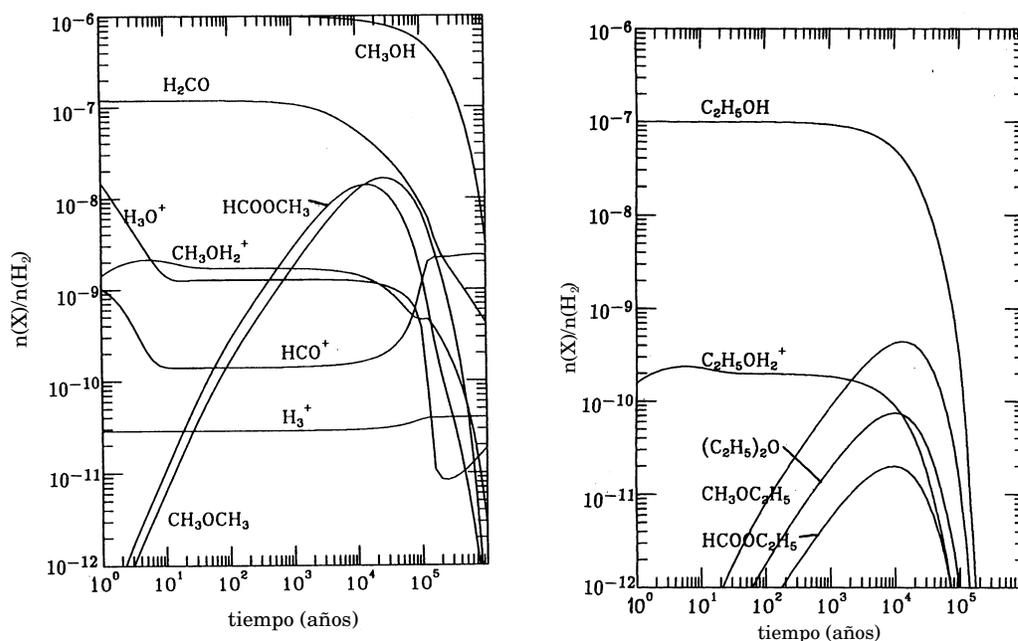


FIGURA 2.7: Modelos en los que se representa la química en fase gaseosa a partir del CH_3OH y del $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Figura adaptada de Charnley et al. (1995).

al. (1995) se muestran en la Fig. 2.7 y en ellos se ve cómo las abundancias de los éteres y ésteres aumentan hasta alcanzar un máximo y después disminuyen rápidamente, mientras que las abundancias de CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y H_2CO disminuyen. Estos modelos concuerdan con las abundancias observadas en varios núcleos calientes cuando nos encontramos cerca del máximo de abundancia de las moléculas de segunda generación. Pero utilizan las reacciones de formación de HCOOCH_3 con velocidades de reacción antiguas. Horn et al. (2004) presentan también modelos, pero no pueden ajustar tampoco las abundancias que se observan en núcleos calientes, si no se forma HCOOCH_3 en los mantos de los granos de polvo.

Charnley et al. (1995), presentan modelos temporales para otros alcoholes, como el propanol y el butanol, que van a producir una química parecida. Estos alcoholes también se podrían crear en los granos de polvo pero sus abundancias serán mucho menores y no son detectables con la instrumentación actual. Como se comentaba en la sección de la química en los núcleos calientes estos modelos temporales pueden servir como relojes moleculares, debido a la gran dependencia con el tiempo de las abundancias de la moléculas. Al comparar las abundancias de las diferentes moléculas (hijas/madres) se puede conocer el tiempo que

ha pasado después de la evaporación de los mantos de los granos. En la actualidad sólo el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ podrá ser usado como reloj, pero la comparación con las abundancias de otras moléculas también nos puede ayudar a limitar mejor la edad de las regiones.

2.5.1 Otras moléculas orgánicas complejas

A continuación se presentan otras MOCs más simples o que van a ser fundamentales en este trabajo:

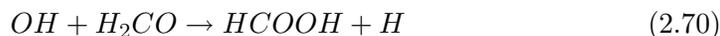
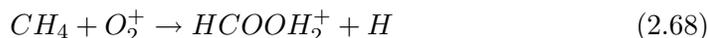
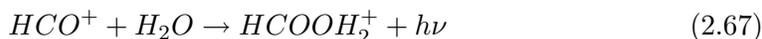
- Formaldehído (H_2CO) fue la primera molécula orgánica detectada en el MI (Snyder et al. 1969) y se observa tanto en las nubes oscuras como en regiones de formación estelar. H_2^{13}CO es el isotópologo más abundante del H_2CO y fue observado poco tiempo después en Sgr A y Sgr B2 (Zuckerman et al. 1969). H_2CO tiene múltiples reacciones de formación en fase gaseosa (bases de datos de udfa⁰⁶ y OSU), pero la reacción principal por la que va a formarse será:



Su formación sobre los granos de polvo se produce principalmente por la hidrogenación de CO, tal como veíamos en la reacción 2.44 (Watanabe et al. 2003). Esta molécula puede ser importante para la posible producción de moléculas más complejas en fase gaseosa, como glicolaldehído (CH_2OHCHO), HCOOCH_3 y HCOOC_2H_5 , aún cuando hemos visto que la velocidad de estas reacciones puede ser pequeña.

- Ácido fórmico (HCOOH) fue detectado por primera vez en el MI por Zuckerman et al. (1971) y es muy importante ya que comparte su estructura con otras MOCs como son HCOOCH_3 , CH_3COOH (ácido acético) o $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ (glicina). La formación de esta molécula parece factible en fase gaseosa (Irvine et al. 1990), pero además, puede ser producida en los mantos helados de los granos insertando H y O en una molécula de CO (Tielens & Hagen 1982). Se ha estudiado su existencia en estado sólido en los granos (Schutte et al. 1996) y suele tener grandes abundancias en regiones en las que se han producido choques (Liu et al. 2001, 2002).

Los mecanismos más importantes de formación de esta molécula son (Leung et al. 1984):



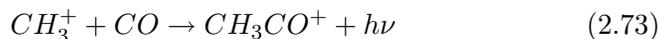
siendo la reacción 2.69 más lenta que la 2.70. Las reacciones 2.67 y 2.68 tienen una dependencia negativa con la temperatura, lo que las hace más eficientes en las nubes oscuras.

- Ácido acético (CH_3COOH) fue detectado por primera vez en el MI por Mehringer et al. (1997), muchos estudios anteriores habían intentado detectarlo, debido a que es un isómero del HCOOCH_3 (Wootten et al. 1992) y del CH_2OHCHO , que tienen abundancias relativamente grandes en núcleos calientes. Su estudio es importante para

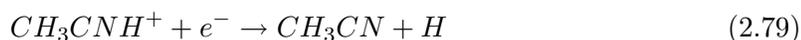
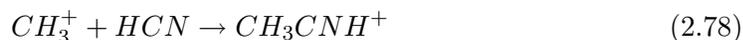
entender la isomerización en el MI. El CH_3COOH puede crearse en la superficie de los granos de polvo, de maneras parecidas a las de su isómero HCOOCH_3 (Sorrell 2001, Bennett & Kaiser 2007):



pero también puede formarse en fase gaseosa, siguiendo la secuencia (Wlodarczak & Demaison 1988):



- También se han observado moléculas orgánicas en las que se incluyen átomos de nitrógeno. Estas moléculas presentan complejidades parecidas a las que se observan para las moléculas oxigenadas. Entra las más importantes se encuentran el cianuro de metilo y el cianuro de etilo (CH_3CN y $\text{C}_2\text{H}_5\text{CN}$). Estas moléculas han sido observadas en gran cantidad de fuentes. El CH_3CN se puede formar en fase gaseosa a partir de NH_3 de la forma (Rodger & Charnley 2001):



En el modelo que presentaron Rodger & Charnley no es necesario incluir ningún tipo de formación en granos, pero Caselli et al. (1993) utilizan:



Además la reacción:



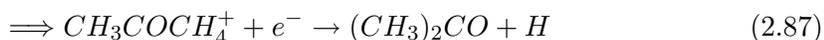
en granos, es necesaria para poder explicar las abundancias de CH_3CN en el núcleo caliente de Orión (Hasegawa & Herbst 1993). $\text{C}_2\text{H}_5\text{CN}$ podría formarse siguiendo las mismas rutas a partir de HC_3N (Blake et al. 1987; Charnley et al. 1992; Caselli et al. 1993)

- La producción de moléculas más complejas es posible siguiendo reacciones similares a las que presentan las moléculas comentadas hasta ahora. En el espacio se han observado moléculas muy grandes, como veíamos en la Tab. 2.1. Algunos autores pronostican que la química en los mantos de los granos mediante inserción de H, de O, de N y adición de C, es la que va a producir estas moléculas complejas y otros que son los procesos entre radicales los que van a ser más importantes. El HCO parece ser una de las moléculas

de las que pueden haberse derivado otras más complejas, como el propinal (HC_2CHO), el propenal (CH_2CHCHO) y el propanal ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$) que se forman siguiendo es siguiente proceso (Hollis et al. 2004b):



El CH_2OHCHO se podría formar por unión de dos moléculas de H_2CO sobre los granos de polvo (Hollis et al. 2000); el etilenglicol ($\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, Hollis et al. 2002) puede formarse a partir del glicolaldehído por hidrogenación. El acetaldehído (CH_3CHO) se puede observar con abundancias parecidas a la del $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, y se puede formar en fase gaseosa o a través de reacciones en los mantos de los granos (Charnley 2004); los isómeros de esta molécula también pueden encontrarse en el MI, y son: el óxido de etileno ($\text{c-C}_2\text{H}_4\text{O}$, Dickens et al. 1997) y el vinil alcohol ($\text{CH}_2=\text{CHOH}$, Turner & Apponi 2001). Una de las moléculas más largas observadas es la acetona ($(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, Combes et al. 1987), formada posiblemente a través de las reacciones:



en fase gaseosa, pero su abundancia parece indicar, como en el caso de las otras moléculas, que su química puede provenir de los granos de polvo.

Las MOCs de las que se ha hablado tienen una relación muy importante con la química que se produce en los mantos de los granos, con lo que al estudiarlas se va a tener información de las abundancias de los mantos de los granos.

Existen también otras moléculas aún más complejas como los hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs), moléculas formadas por gran cantidad de carbonos con estructuras benzénicas unidas entre si. Un caso de interés son los fulerenos, que son moléculas de carbono con formas esféricas y otros compuestos de carbono que pueden estar formados por gran cantidad de átomos (ver Fig. 2.8, Ehrenfreund & Charnley 2000), no han sido detectados en el MI pero se supone que se pueden formar en las envolturas de estrellas de carbono, por inserción de carbonos en cadenas o por rotura de estructuras sólidas como los granos de polvo.

Además de las detecciones de MOCs en el MI también se han detectado en cometas y de meteoritos. Estos objetos, que se generaron durante la formación del Sistema Solar, nos mostraría la química que tenía lugar en el MI durante esa fase de su evolución.

Como vemos, la existencia de MOCs en el Universo es un hecho que nos hace pensar que la química en los hielos de los granos de polvo es muy importante. Con el estudio de las MOCs en las nubes del CG se mostrará que estas moléculas no se restringen a pequeñas zonas entorno a las regiones de formación estelar, sino que aparecen con grandes abundancias en regiones muy extensas de varios cientos de parsecs en el núcleo de la Vía Láctea. Su estudio sistemático nos permitirá profundizar en el origen de la complejidad química en el MI.

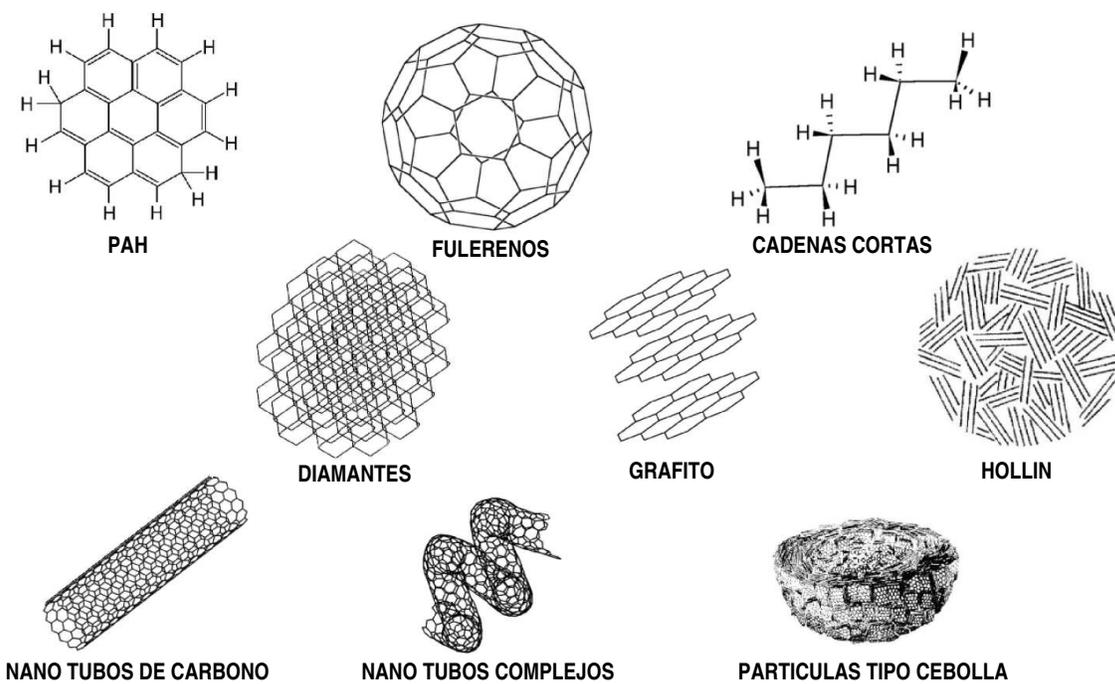


FIGURA 2.8: Moléculas gigantes formadas por carbonos. Figura adaptada de Ehrenfreund & Charnley (2000).

Parte II

Química de choques en centro de la Vía Láctea

Capítulo 3

Química de los alcoholes en las nubes moleculares del centro Galáctico

3.1 Introducción

El CG contiene moléculas con grandes abundancias que han sido eyectadas de los mantos de los granos, como SiO y C₂H₅OH (Martín-Pintado et al. 1997, 2001; Hüttemeister et al. 1998), debido a choques generalizados con velocidades moderadas de $\leq 40 \text{ km s}^{-1}$. El origen de estos choques no está claro, pudiéndose producir por colisiones entre nubes, asociadas con la dinámica a gran escala de la Galaxia en el contexto de un potencial barrado (Wilson et al. 1982; Hüttemeister et al. 1998), por burbujas generadas por los vientos que se producen en estrellas masivas evolucionadas (Martín-Pintado et al. 1999), o por la turbulencia HD o MHD que se encuentra en esta región (Morris & Serabyn 1996).

Una de características más interesantes de las moléculas orgánicas complejas (MOCs) que se derivarán de la química de choques viene dada por la fuerte dependencia temporal que, según los modelos, como los de Charnley et al. (1995); Millar et al. (1991); Caselli et al. (1993) y Horn et al. (2004), debería haber entre las abundancias de las moléculas derivadas del CH₃OH, como es el (CH₃)₂O. Básicamente, todos estos modelos indican que el (CH₃)₂O alcanzará su máxima abundancia 10^4 – 10^5 años después de la eyección del CH₃OH a fase gaseosa. (CH₃)₂O se podría usar para estimar el tiempo que ha pasado después de que se produzcan los choques en el CG y establecer su origen. Actualmente, los modelos que se barajan en la química de los núcleos calientes van aún más allá, permitiendo una fase intermedia entre los estadios en los que las moléculas están en los granos y en los que las moléculas están completamente evaporadas de ellos. En esta fase intermedia, los granos de polvo se van calentando con diferentes escalas temporales. Al calentarse, se permite la existencia de algunas reacciones entre radicales en la superficie de los granos. Los cambios en las abundancias de algunas moléculas pueden depender ahora, no sólo del tiempo, sino de la eficiencia en el calentamiento de los granos de polvo en el núcleo caliente.

Utilizando la idea de evolución temporal de la química, se ha realizado un estudio sistemático de 35 fuentes en diversas nubes moleculares del CG, entre Sgr B2 y Sgr C. En estas nubes se han estudiado las MOCs que están relacionadas con los mantos de los granos de

polvo y la química en fase gaseosa, como CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, HCOOCH_3 , HCOOH , H_2CO y CH_3COOH . También se han obtenido datos de CS y de varios isotopólogos de CO como trazadores de la densidad de columna total del H_2 . Este estudio mostrará que todas las MOCs presentan abundancias relativas a CH_3OH muy parecidas en todas las fuentes, excepto para las que pueden estar afectadas por foto-disociación. Además, las características de estas moléculas complejas en el CG son similares a las que se encuentran en núcleos calientes. Los datos presentados en este trabajo y los modelos de química en fase gaseosa más modernos no parecen explicar las abundancias de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ en el CG, ni las razones de abundancia constantes que presentan las MOCs con respecto a CH_3OH . Todas las moléculas han podido ser creadas en los mantos de los granos o haberse pegado a éstos para luego ser eyectadas a fase gaseosa por medio de choques.

3.2 Observaciones

Las observaciones se realizaron con el radiotelescopio de 30 metros del Instituto de Radioastronomía Milimétrica (IRAM) en Pico Veleta, Granada. Los datos se obtuvieron en diferentes sesiones de observación entre 1996 y 2003. El haz del telescopio fue $24''$, $17''$ y $12''$ para las bandas de 3, 2 y 1.3 mm que cubren las ventanas atmosféricas del rango mm. Los receptores SIS fueron sintonizados en “banda lateral única” y se ha atenuado la banda imagen por encima de los 10 dB. Las temperaturas típicas del sistema fueron 300, 500 y 900 K para las bandas 3, 2 y 1.3 mm respectivamente. La resolución en velocidades en cada una de las bandas fueron 3, 2 y 1.3 km s^{-1} para 3, 2 y 1.3 mm respectivamente. Estas resoluciones son más que suficientes para resolver los perfiles de líneas que se observan en el CG, que tienen anchuras de $\sim 10\text{--}20 \text{ km s}^{-1}$. La puntería y el foco del radiotelescopio se comprobaron regularmente durante las observaciones. Las observaciones se obtuvieron mediante conmutación de posición con la referencia escogida en posiciones libres de emisión molecular. La calibración se realizó por medio de la observación de una carga caliente y otra fría a temperaturas conocidas. Los espectros obtenidos se representarán en temperaturas de antena (T_A^*).

3.2.1 Fuentes

Las 35 fuentes seleccionadas se presentan en la Tab. 3.1 junto con las posiciones en coordenadas galácticas y en ecuatoriales y los complejos de nubes moleculares a los que pertenecen. Estas fuentes están distribuidas entre los complejos moleculares de Sgr C y Sgr B2, y abarcan una región de unos 200 pc como se puede ver en la Fig. 3.1 ($1^\circ \sim 150 \text{ pc}$). La selección de las fuentes que se han observado en este trabajo se realizó a partir de trabajos previos de Martín-Pintado et al. (1997, 2001) donde las abundancias de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ eran grandes. Además de fuentes en donde había sido observada emisión de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ se han incluido otras en las cuales no se había podido detectar, como posiciones en los Arcos Térmicos en Radio (ATR) y la Hoz (ver Cap. 1). Asimismo se han incluido en el estudio los núcleos calientes Sgr B2N y Sgr B2M. En estas fuentes ya se han hecho estudios de diferentes trazadores de densidad, temperatura y de química de choques que se presentaron en el Cap. 1.

TABLA 3.1: FUENTES Y POSICIONES

Fuente	l(°)	b(°)	α (B1950)	δ (B1950)	Complejo
MC G-0.96+0.13	-0.96	+0.13	17 ^h 39 ^m 36 ^s 6	-29° 39' 47''	Sgr C
MC G-0.55-0.05	-0.55	-0.05	17 ^h 41 ^m 20 ^s 0	-29° 24' 30''	Sgr C
MC G-0.50-0.03	-0.50	-0.03	17 ^h 41 ^m 21 ^s 2	-29° 21' 26''	Sgr C
MC G-0.42-0.01	-0.42	-0.01	17 ^h 41 ^m 24 ^s 1	-29° 15' 51''	Sgr C
MC G-0.32-0.19	-0.32	-0.19	17 ^h 42 ^m 24 ^s 7	-29° 17' 20''	Sgr C
MC G-0.11-0.08	-0.11	-0.08	17 ^h 42 ^m 28 ^s 0	-29° 02' 55''	Sgr A
MC G-0.08-0.06	-0.08	-0.06	17 ^h 42 ^m 30 ^s 0	-29° 00' 58''	Sgr A
MC G-0.02-0.07	-0.02	-0.07	17 ^h 42 ^m 40 ^s 0	-28° 58' 00''	Sgr A
MC G+0.04+0.03	+0.04	+0.03	17 ^h 42 ^m 26 ^s 2	-28° 51' 45''	ATR
MC G+0.07-0.07	+0.07	-0.07	17 ^h 42 ^m 54 ^s 2	-28° 53' 30''	ATR
MC G+0.13+0.02	+0.13	+0.02	17 ^h 42 ^m 41 ^s 4	-28° 47' 35''	FNT
MC G+0.17+0.01	+0.17	+0.01	17 ^h 42 ^m 50 ^s 0	-28° 45' 50''	FNT
MC G+0.18-0.04	+0.18	-0.04	17 ^h 43 ^m 01 ^s 0	-28° 47' 15''	La Hoz
MC G+0.20-0.03	+0.20	-0.03	17 ^h 43 ^m 03 ^s 6	-28° 45' 42''	La Hoz
MC G+0.24+0.01	+0.24	+0.01	17 ^h 42 ^m 59 ^s 6	-28° 42' 35''	Cresta
MC G+0.62-0.10	+0.62	-0.10	17 ^h 44 ^m 18 ^s 0	-28° 26' 30''	Sgr B2
MC G+0.64-0.08	+0.64	-0.08	17 ^h 44 ^m 17 ^s 5	-28° 24' 30''	Sgr B2
MC G+0.67-0.06	+0.67	-0.06	17 ^h 44 ^m 18 ^s 0	-28° 22' 30''	Sgr B2
MC G+0.68-0.10	+0.68	-0.10	17 ^h 44 ^m 27 ^s 2	-28° 23' 20''	Sgr B2
MC G+0.70-0.01	+0.70	-0.01	17 ^h 44 ^m 10 ^s 0	-28° 19' 30''	Sgr B2
MC G+0.70-0.09	+0.70	-0.09	17 ^h 44 ^m 27 ^s 2	-28° 22' 05''	Sgr B2
MC G+0.71-0.13	+0.71	-0.13	17 ^h 44 ^m 38 ^s 4	-28° 22' 25''	Sgr B2
MC G+0.76-0.05	+0.76	-0.05	17 ^h 44 ^m 27 ^s 2	-28° 17' 35''	Sgr B2
Sgr B2N	+0.68	-0.03	17 ^h 44 ^m 10 ^s 6	-28° 21' 17''	Sgr B2
Sgr B2M	+0.66	-0.04	17 ^h 44 ^m 10 ^s 6	-28° 22' 05''	Sgr B2
MC G+0.694-0.017	+0.694	-0.017	17 ^h 44 ^m 10 ^s 0	-28° 20' 05''	Sgr B2
MC G+0.693-0.027	+0.693	-0.027	17 ^h 44 ^m 12 ^s 1	-28° 20' 25''	Sgr B2
MC G+0.627-0.067	+0.627	-0.067	17 ^h 44 ^m 12 ^s 1	-28° 25' 05''	Sgr B2
MC G+0.630-0.072	+0.630	-0.072	17 ^h 44 ^m 13 ^s 6	-28° 25' 05''	Sgr B2
MC G+0.672-0.014	+0.672	-0.014	17 ^h 44 ^m 06 ^s 1	-28° 21' 05''	Sgr B2
MC G+0.640-0.046	+0.640	-0.046	17 ^h 44 ^m 09 ^s 1	-28° 23' 45''	Sgr B2
MC G+0.635-0.069	+0.635	-0.069	17 ^h 44 ^m 13 ^s 6	-28° 24' 45''	Sgr B2
MC G+0.659-0.035	+0.659	-0.035	17 ^h 44 ^m 09 ^s 1	-28° 22' 25''	Sgr B2
MC G+0.681-0.028	+0.681	-0.028	17 ^h 44 ^m 10 ^s 6	-28° 21' 05''	Sgr B2
MC G+0.673-0.025	+0.673	-0.025	17 ^h 44 ^m 09 ^s 1	-28° 21' 25''	Sgr B2

NOTA- Coordenadas galácticas y ecuatoriales de las fuentes seleccionadas. La nomenclatura utilizada es la recomendada por la IAU: MC por nube molecular (“Molecular cloud”), una G, de galácticas, para denominar el tipo de coordenadas que van a continuación y las coordenadas galácticas. En la última columna se comentan las nubes moleculares a las que pertenecen las diferentes fuentes.

3.2.2 Moléculas observadas

Habiendo observado C₂H₅OH anteriormente (Martín-Pintado et al. 2001) y sabiendo que la química de choques va a influir fuertemente en estas regiones, se propuso el estudio en

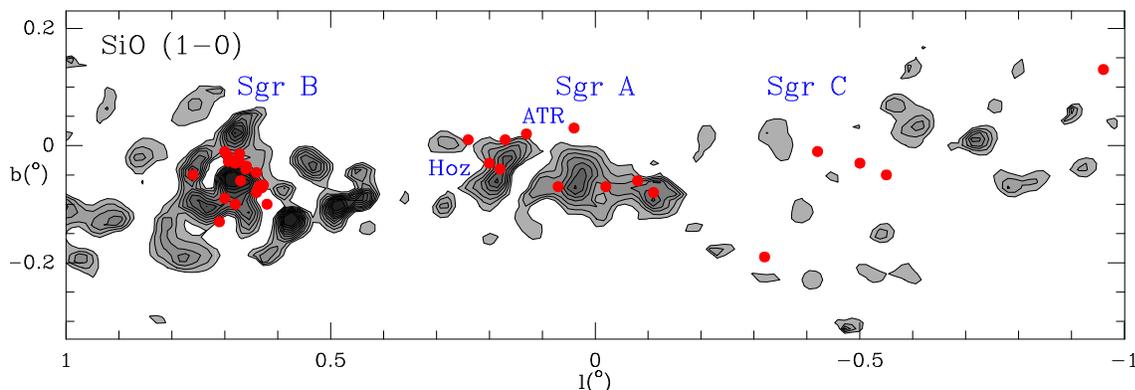


FIGURA 3.1: Posiciones de las fuentes seleccionadas superpuestas sobre el mapa de SiO ($J=1\rightarrow 0$) de la región del centro Galáctico (Martín-Pintado et al. 1997). La conversión en distancias es $1^\circ \sim 150$ pc.

conjunto de MOCs como CH_3OH , producida también en los mantos de los granos; $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ producida en fase gaseosa a partir del CH_3OH ; HCOOCH_3 cuya formación en fase gaseosa no es eficiente (Horn et al. 2004); y otras MOCs como el HCOOH , CH_3COOH y H_2CO . El H_2CO es clave para la comprensión de la química en fase gaseosa de los alcoholes. Además se han estudiado las moléculas de CO y CS que nos dan información de la densidad de columna total del gas tanto difuso como denso en las fuentes observadas.

Las transiciones de las moléculas que se han estudiado se presentan en la Tab. 3.2, junto con sus correspondientes frecuencias, las energías del nivel superior de la transición (E_s) y la fuerza de línea multiplicada por el cuadrado del momento dipolar. Estos parámetros son necesarios para el cálculo de las densidades de columna. En el Apéndice A se presentan las características espectroscópicas generales de las moléculas observadas.

3.3 Resultados

En las Fig. 3.2 y 3.3 se muestran los perfiles de las líneas observadas en tres de las fuentes en unidades de temperatura de antena (K) en función de las velocidades respecto al sistema de referencia “Local Standard of Rest” (LSR). La ausencia de algunos espectros indican que no se han observado todas las líneas para todas las fuentes. Los perfiles de los espectros de CH_3OH y de $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ son diferentes a los del resto de las MOCs debido a la superposición de varias transiciones de energías diferentes. CO y CS, trazadores de gas difuso y denso respectivamente, tienen también perfiles anchos pero esta vez debidos al solapamiento de diferentes componentes de velocidad. Todas estas componentes no presentan emisión en las MOCs y sólo se han considerado en este trabajo las que presentan dicha emisión. Asimismo, en la muestra total de fuentes existen tres en las que se aprecian dos componentes de velocidad diferentes, claramente separadas en los espectros de los isotopólogos de CO, CS y CH_3OH como se puede ver para la fuente MC G+0.20–0.03. En el caso de la fuente MC G–0.32–0.19, que no se muestra en la figura, se observan tres componentes de velocidad diferentes tanto para CH_3OH como para los isotopólogos de CO y CS.

TABLA 3.2: PARÁMETROS DE LAS LÍNEAS MOLECULARES.

Molécula	Transición	Frecuencia (MHz)	E_s/κ (K)	$\mu_x^2 S$
CH ₃ OH.....	3 ₀ →2 ₀ E	145093.75	27.06	2.38
	3 ₀ →2 ₀ A+	145103.23	13.94	2.38
	3 ₋₁ →2 ₋₁ E	145097.47	19.52	2.11
	5 ₀ →4 ₀ A+	241791.43	34.83	4.94
	5 ₀ →4 ₀ E	241700.22	47.95	3.91
¹³ CH ₃ OH ...	5 ₋₁ →4 ₋₁ E	241767.22	40.41	3.75
	3 ₀ →2 ₀ A+	141602.53	13.60	2.43
	3 _{0,3} →2 _{0,2} E	141595.48	26.71	2.43
C ₂ H ₅ OH	3 _{-1,3} →2 _{-1,2} E	141597.06	19.21	2.16
	4 _{1,4} →3 _{0,3}	90117.61	9.36	5.35
	6 _{3,4} →5 _{2,3}	234758.82	28.95	5.94
	7 _{0,7} →6 _{1,6}	104487.26	23.26	8.61
HCOOCH ₃ ..	9 _{0,9} →8 _{1,8}	142285.05	37.17	12.66
	7 _{2,5} →6 _{2,4} -E	90145.69	19.69	17.00
	7 _{2,5} →6 _{2,4} A	90156.48	19.67	17.00
	8 _{0,8} →7 _{0,7} E	90227.61	20.09	20.99
	8 _{0,8} →7 _{0,7} A	90229.63	20.07	20.99
	9 _{4,5} →8 _{4,4} E	111408.48	37.27	19.13
	9 _{1,8} →8 _{1,7} E	111674.10	28.15	23.12
	9 _{1,8} → 8 _{1,7} A	111682.19	28.13	23.12
(CH ₃) ₂ O ^a	7 _{2,6} → 7 _{1,7}	104703.30	31.07	5.43
	7 _{0,7} →6 _{1,6}	111783.01	25.26	6.80
	5 _{3,3} →5 _{2,4}	146872.55	26.32	3.87
	7 _{1,7} →6 _{0,6}	147024.90	26.04	4.59
	6 _{3,4} →6 _{2,5}	147206.81	31.78	4.92
HCOOH	4 _{2,2} →3 _{2,1}	90164.25	23.53	5.78
	5 _{0,5} →4 _{0,4}	111746.79	16.13	9.65
CH ₃ COOH ...	8 _{*,8} →7 _{*,7} A	90246.25	20.30	43.20
	8 _{*,8} →7 _{*,7} E	90203.44	20.30	43.20
	10 _{*,10} →9 _{*,9} A	111548.53	30.50	54.80
	10 _{*,10} →9 _{*,9} E	111507.27	30.50	54.80
H ₂ ¹³ CO	2 _{0,2} →1 _{0,1}	141983.74	7.11	10.87
CS	3→2	146969.03	14.12	11.56
	5→4	244936.64	35.28	19.84
C ¹⁸ O	1→0	109782.17	5.28	0.01
	2→1	219560.35	15.82	0.02
¹³ CO	1→0	110201.35	5.30	0.01

NOTA- Parámetros obtenidos de diferentes estudios de las propiedades espectroscópicas de cada molécula, ver Apéndice A.

^a Subestados EE, AA, EA y AE superpuestos. Se presenta sólo la transición más intensa.

3.4 Análisis de los datos

Los parámetros observacionales de las líneas espectrales se han obtenido ajustando gaussianas a las diferentes componentes de velocidad que se observan en los perfiles. El ajuste se ha realizado mediante el programa informático CLASS del paquete GILDAS, que distribuye IRAM para el tratamiento de este tipo de datos. El ajuste de gaussianas es más o menos complejo dependiendo del espectro de la molécula correspondiente (ver Apéndice A).

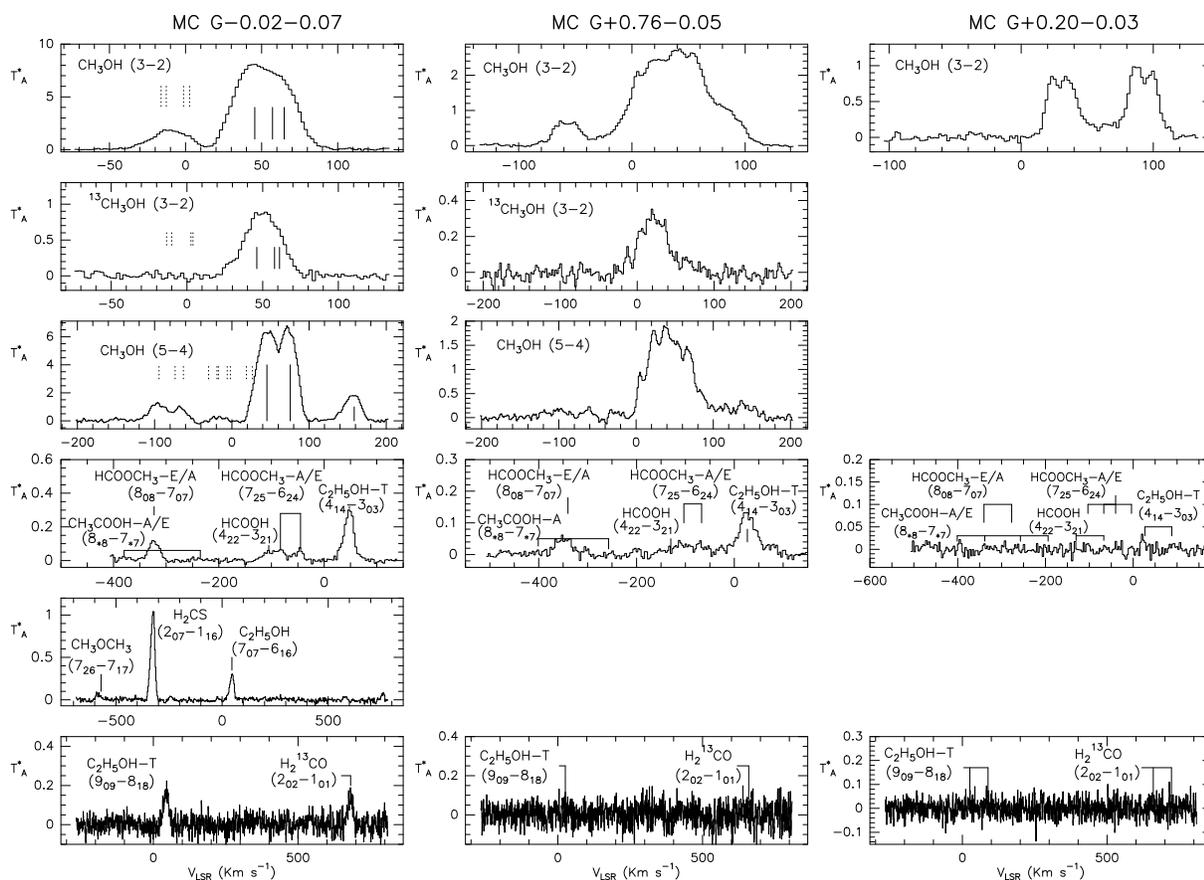


FIGURA 3.2: Perfiles típicos de las líneas observadas sobre tres de las fuentes del CG. En esta muestra se presentan los perfiles de las líneas de CH_3OH y de $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ que están compuestas de varias transiciones K_a de la molécula. Se muestran, para la fuente MC G-0.02-0.07, las posiciones para las transiciones más intensas en líneas sólidas verticales y las menos intensas con líneas de puntos verticales. En la fuente MC G+0.20-0.03 no se ha obtenido detección de ninguna molécula compleja excepto de CH_3OH , que presenta dos componentes en velocidad.

- Para las moléculas cuyos espectros rotacionales son simples como es el caso de CS, C^{18}O , ^{13}CO , HCOOH y H_2CO , y para moléculas con espectros algo más complejos, pero cuyas transiciones están suficientemente separadas para no solaparse ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3), se han ajustado gaussianas simples a las diferentes líneas espectrales para cada una de las componentes de velocidad. Los perfiles de las líneas de CS, C^{18}O y ^{13}CO suelen presentar un perfil más ancho en velocidades, como ya se ha comentado. En este caso se ha tenido que seleccionar la componente en velocidad en concordancia con la emisión de las moléculas más complejas. En el caso de no poderse ajustar una gaussiana, se ha calculado el intensidad integrada para el mismo rango de velocidades que presentan emisión en las líneas de CH_3OH o $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$.
- Los perfiles de las líneas de CH_3OH y $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ (formadas por solapamiento de varias transiciones con diferentes energías) han sido ajustadas mediante un método iterativo en el que se ajustan simultáneamente las distintas transiciones individuales. Para ello se ha usado el método de ajustes HFS de CLASS, que ajusta varias componentes hiper finas de una transición a la vez. En este tipo de ajuste se mantienen fijas las separaciones en frecuencia de las transiciones y sus intensidades relativas. Además se ha fijado la

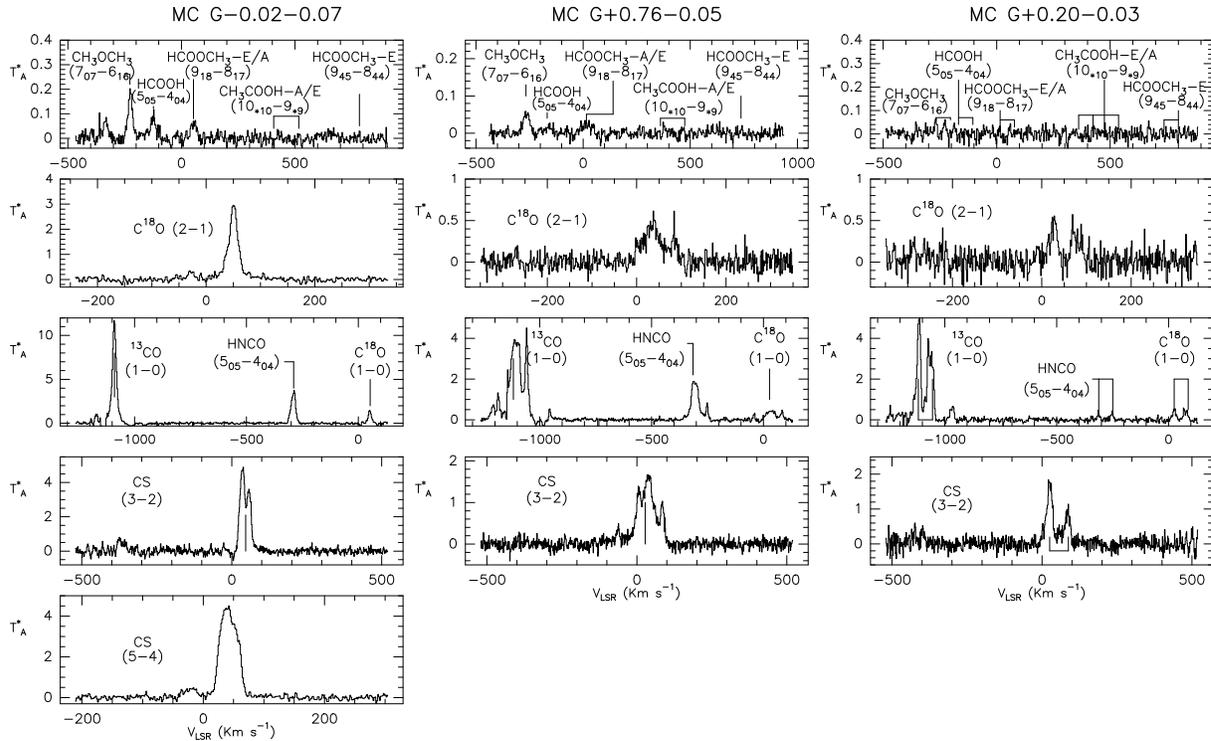


FIGURA 3.3: Perfiles típicos de las líneas observadas sobre tres de las fuentes del CG. Se aprecian en esta muestra los perfiles anchos de las moléculas de CS, ^{13}CO y de C^{18}O , así como la doble componente en velocidad para la fuente MC G+0.20-0.03.

anchura de las líneas individuales al valor obtenido para otras moléculas complejas con espectros más simples como $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ o HCOOCH_3 . La intensidad relativa de las transiciones depende de la temperatura de excitación rotacional, así que el perfil observado se ajusta variando la temperatura de excitación y la opacidad. Además de obtener una estimación de la intensidad para las diferentes transiciones, se obtiene una estimación de la temperatura de excitación.

- Para el caso de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ los niveles rotacionales están divididos en cuatro subestados AA, EE, AE y EA. En los espectros observados las transiciones rotacionales de los cuatro subestados están superpuestas y se ha ajustado una gaussiana que engloba las cuatro componentes. También en el caso de la transición $8_{0,8} \rightarrow 7_{0,7}$ de HCOOCH_3 se han ajustado los dos subestados, A y E, juntos al estar sus líneas espectrales solapadas.
- En los casos en los que no se ha obtenido detección, por ejemplo de CH_3COOH , se ha calculado el límite superior de la intensidad integrada usando la intensidad correspondiente a 3σ y los rangos de velocidades a los que se detecta el $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y del resto de las moléculas complejas.

Los resultados del cálculo de las intensidades integradas se presentan en el Ap. C mediante tablas en las que se dan los valores de la intensidad máxima en unidades de temperatura de antena (K), intensidad integrada en K km s^{-1} , la velocidad LSR en km s^{-1} y la anchura de la línea en km s^{-1} . Las anchuras típicas de las líneas espectrales de las moléculas complejas son $\sim 20 \text{ km s}^{-1}$, anchuras normales en el CG (ver Cap. 1). Las velocidades de las líneas

espectrales de cada una de las fuentes, que van desde -93 km s^{-1} a 140 km s^{-1} con la distribución de estas en unos 200 pc, nos dan una indicación de lo diferentes que son las fuentes que se estudian en este trabajo.

3.4.1 Densidades de columna y temperaturas de excitación

Para obtener la densidad de columna de una molécula se ha supuesto que las regiones que observadas se encuentran en equilibrio termodinámico local (ETL). En este caso la densidad de columna del nivel superior de una transición estará dada por:

$$N_s = \frac{3\kappa g_s}{8\pi^3 \nu \mu^2 S} \int T_a^* dv = 1.67 \times 10^{14} \frac{g_u}{\nu \mu^2 S} \int T_a^* dv \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (3.1)$$

donde $\kappa=0.69 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ es la constante de Boltzmann, ν la frecuencia de la línea expresada en GHz, μ el momento dipolar en Debye, S la fuerza de línea, g_s la degeneración del nivel rotacional ($2J+1$) y $\int T_A^* dv$ la intensidad integrada en unidades de K km s^{-1} .

TABLA 3.3: PARÁMETROS MOLECULARES

molécula	μ_a (Debye)	μ_b (Debye)	A (MHz)	B (MHz)	C (MHz)	Q
CH ₃ OH	0.885	1.440	127484.00	24679.98	23769.70	$1.28T_{\text{ex}}^{1.5}$
¹³ CH ₃ OH	0.899	1.440	127527.40	24083.50	23197.00	$1.28T_{\text{ex}}^{1.5}$
C ₂ H ₅ OH	0.046	1.438	34891.77	9350.68	8135.24	$3.2T_{\text{ex}}^{1.5}$
HCOOCH ₃	1.630	0.680	19985.71	6914.75	5304.48	$12.45T_{\text{ex}}^{1.5}$
(CH ₃) ₂ O	...	1.302	38788.20	10056.50	8886.80	$91.6T_{\text{ex}}^{1.5}$
HCOOH	1.396	0.260	77512.25	12055.11	10416.12	$1.68T_{\text{ex}}^{1.5}$
CH ₃ COOH	0.860	1.470	11335.58	9478.73	5324.99	$14.1T_{\text{ex}}^{1.5}$
H ₂ ¹³ CO	2.332	...	281993.04	37809.11	33215.94	$0.57T_{\text{ex}}^{1.5}$
CS	1.957	24495.56	...	$0.84T_{\text{ex}}$
C ¹⁸ O	0.111	54891.42	...	$0.38T_{\text{ex}}$
¹³ CO	0.111	55101.01	...	$0.38T_{\text{ex}}$

NOTA- Parámetros rotacionales de las diferentes moléculas. Ver Apéndice A.

La expresión que relaciona la densidad de columna de un nivel y la densidad de columna total es:

$$N = N_s / g_{st} Q e^{(E_s / \kappa T_{\text{ex}})} \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (3.2)$$

donde Q es al función de partición (calculada teniendo en cuenta la degeneración de espín si es necesario), E_s la energía del nivel superior de la transición en cm^{-1} , κ la constante de Boltzman en cm^{-1}/K , T_{ex} la temperatura de excitación en K y g_{st} la degeneración total del nivel superior, teniendo en cuenta la degeneración por el espín ($g_{st}=(2J+1)g_i$). Utilizando la Ecs. 3.1 y 3.2 se obtiene una relación que nos da la densidad de columna total de la molécula a partir de los parámetros observacionales y de constantes:

$$N = Q e^{(E_s / \kappa T_{\text{ex}})} \frac{1.67 \times 10^{14}}{\nu \mu^2 S g_i} \int T_a^* dv \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (3.3)$$

con las unidades comentadas anteriormente. Esta ecuación será la utilizada para calcular las densidades de columna de las moléculas. La g_i será utilizada sólo para el caso de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ ya que las diferentes especies de esta molécula tienen pesos diferentes debido al espín, en los otros casos se debe usar con valor igual a 1.

En la Tab. 3.3 se presentan los valores de los momentos dipolares, las constantes rotacionales y las funciones de partición necesarias para calcular las densidades de columna.

Cálculo de las temperaturas de excitación

Para las moléculas en las que han observado más de una transición se han calculado las temperaturas de excitación mediante diagramas de las poblaciones de los niveles. En estos diagramas se representa $\ln(N_s/g_s)$ frente a E_s . La pendiente de la recta ajustada será inversamente proporcional a la temperatura de excitación de cada molécula (ver Ec. 3.2). En la Fig. 3.4 se muestran como ejemplo los diagramas de las poblaciones de los niveles para la fuente MC G-0.02-0.07. En la tercera columna de la Tab. 3.4 se muestran las temperaturas

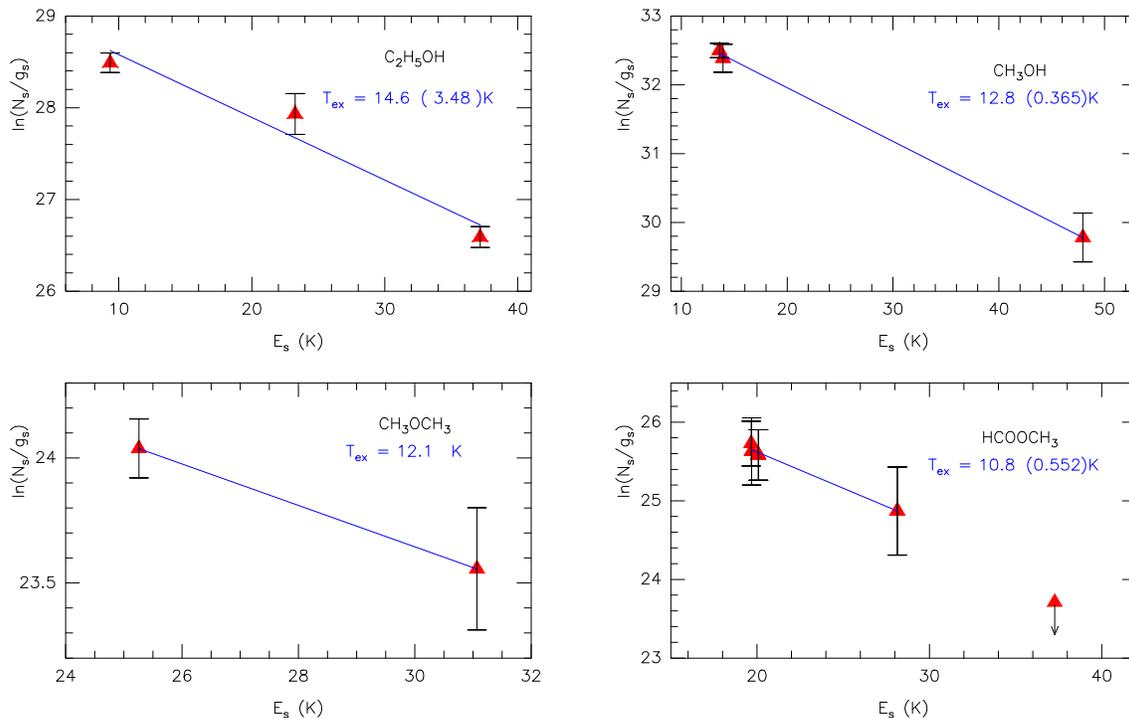


FIGURA 3.4: Diagramas de las poblaciones de los niveles de diferentes moléculas para la fuente MC G-0.02-0.07. En estos diagramas la inversa de la pendiente nos da la temperatura de excitación rotacional que se obtiene en esta región para cada una de las moléculas. Las barras de error nos se obtienen asumiendo un error en la calibración del 10%, típico del 30m, y del error del ajuste gaussiano. () indican el error del ajuste y el triángulo con flecha indica el límite superior que se deriva de una transición.

de excitación derivadas para cada fuente a partir de diversas moléculas. En general las temperaturas de rotación derivadas coinciden dentro de un 30% entre las diferentes moléculas observadas. Las temperaturas de excitación observadas son pequeñas, 6–18 K, lo cual indica excitación subtérmica ya que la temperatura cinética del gas molecular es del orden de unos 100 K. Las explicaciones para las temperaturas de excitación tan pequeñas sería que en esta región la densidad no es suficientemente grande como para que estas moléculas estén termalizadas (Rohlfs & Wilson 2004), en este caso la temperatura de excitación debe de tener

un valor intermedio entre la temperatura cinética y la de la radiación de fondo (2.7K). Se ha supuesto una temperatura de excitación de 8 K para las fuentes en las que sólo se ha medido una transición para cada molécula y no se han podido obtener los diagramas de las poblaciones de los niveles. Para comprobar las temperaturas de excitación obtenidas se han usado datos adicionales de Martín (2006a) de un barrido espectral en 2 mm de diversas fuentes en el CG, entre ellas MC G-0.02-0.07 de la que se han derivado los diagramas de las poblaciones que se presentan en la Fig. 3.5. En estos diagramas para las transiciones de 2 mm; las temperaturas son similares a las obtenidas en este trabajo para los datos de HCOOCH_3 y $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y mayores en sólo un factor 2 para el CH_3OH . Posiblemente esta diferencia de temperatura en el CH_3OH puede ser debida a que existen varias componentes en la excitación de esta molécula, por un lado una componente con una temperatura de excitación de 10 K que excitaría las transiciones con energías pequeñas, y por otro lado otra componente un poco más caliente que excitaría las transiciones con energías más grandes.

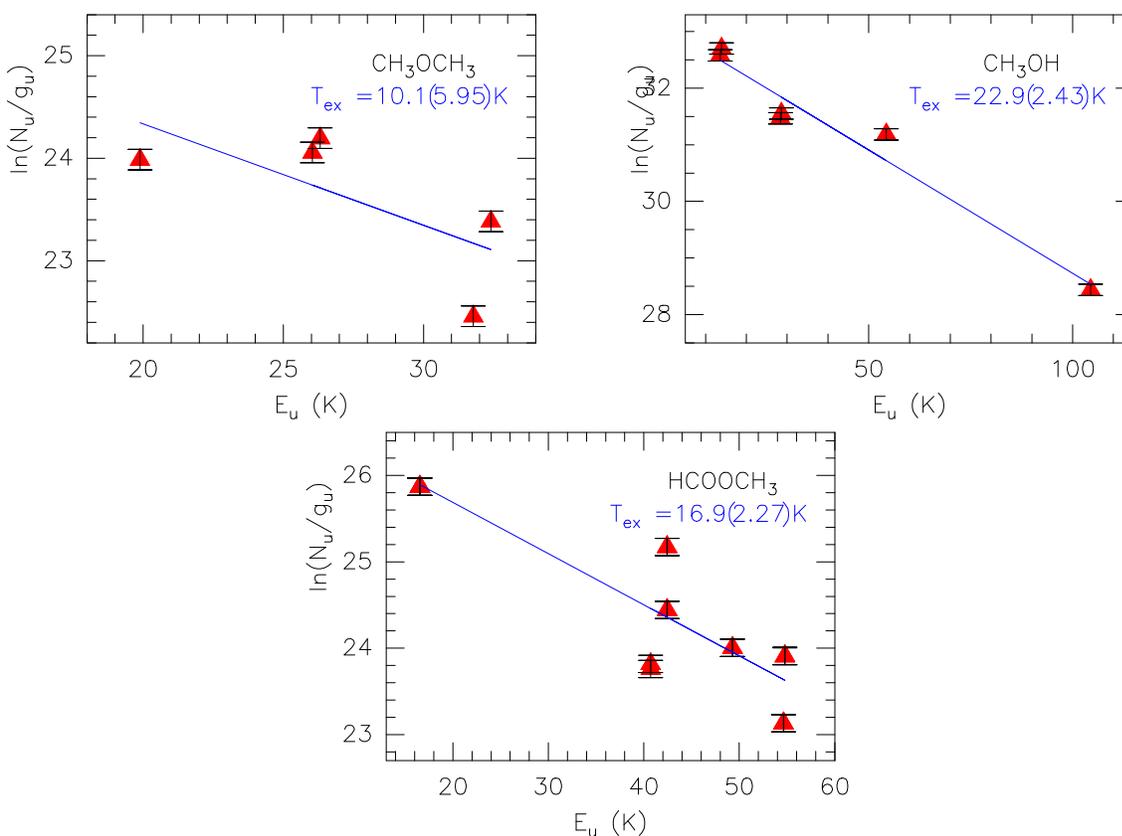


FIGURA 3.5: Diagramas de poblaciones de niveles para algunas moléculas complejas en MC G-0.02-0.07 derivados de datos de Martín (2006a). Ver Fig. 3.4.

TABLA 3.4: PARÁMETROS DERIVADOS

Fuente	V_{LSR} (km s ⁻¹)	T_{ex} (K)	X_{CH_3OH} ×10 ⁻⁷	$X_{C_2H_5OH}$ ×10 ⁻⁸	$X_{(CH_3)_2O}$ ×10 ⁻⁸	X_{HCOOCH_3} ×10 ⁻⁸	X_{HCOOH} ×10 ⁻⁹	X_{CH_3COOH} ×10 ⁻⁹	X_{H_2CO} ×10 ⁻⁹	X_{CS} ×10 ⁻⁹	$N(H_2)$ ×10 ²² cm ⁻²
MC G-0.96+0.13	140	8.0 ^b	10.6	≲1.4	≲8.3	≲10.7	≲12.20	≲30.0	...	16.6	0.2
MC G-0.55-0.05	-93	8.0 ^b	1.6	≲1.8	≲0.6	≲2.7	≲1.0	≲8.5	...	3.6	1.5
MC G-0.50-0.03	-92	8.0 ^b	0.4	≲1.0	≲0.3	≲1.1	≲0.4	≲3.6	...	1.6	2.5
MC G-0.42-0.01	-71	8.0 ^b	0.6	≲1.9	≲0.6	≲2.9	≲1.1	≲9.5	...	3.5	0.6
MC G-0.32-0.19	-70.4	8.0 ^b	0.9	≲0.8	≲18.1	≲6.2	≲23.4	≲17.5	...	10.0	0.2
MC G-0.32-0.19	-24	8.0 ^b	0.2	≲0.6	≲6.3	≲4.5	≲17.0	≲12.7	...	7.3	0.2
MC G-0.32-0.19	26	8.0 ^b	1.1	≲2.6	≲27.0	≲19.5	≲73.3	≲54.7	...	24.5	0.07
MC G-0.11-0.08	19.8	12.0 ^a -10.0 ^b	11.3	6.0	5.6	7.5	3.7	≲3.9	19.5	25.0/43.4 ^h	1.0
MC G-0.08-0.06	29.6	10.0 ^a -12.0 ^b	4.0	2.5	4.7	≲2.6	4.1	≲4.5	7.1	19.0	0.6
MC G-0.02-0.07	47	10.0 ^{bd} -14.0 ^a	3.8	1.2	1.5	1.1	1.4	≲0.5	6.6	4.9/17.5 ^h	6.8
MC G+0.04+0.03	-26	10.0 ^b	2.7	0.8	0.8	≲0.7	≲0.6	≲2.0	≲3.4	9.5	1.1
MC G+0.07-0.07	52	10.0 ^b -12.8 ^a	2.6	1.2	1.3	1.9	1.3	≲1.9	≲13.1	5.3	2.2
MC G+0.13+0.02	-30	8.0 ^g	5.0	≲0.5	≲1.4	≲3.4	≲2.1	≲9.4	...	16.1	0.6
MC G+0.13+0.02	52	8.0 ^g	2.4	≲0.5	≲1.6	≲3.7	≲2.4	≲10.5	...	9.6	0.4
MC G+0.17+0.01	59	10.0 ^b -12.7 ^a	1.5	0.4	≲0.3	0.5	1.2	≲0.9	≲3.1	3.7	1.3
MC G+0.18-0.04	27.1	8.0 ^g	1.2	≲0.2	≲0.8	≲0.9	≲1.7	≲2.54	≲10.2	7.5/37.3 ^h	0.7
MC G+0.18-0.04	85.8	8.0 ^g	1.4	≲0.1	≲0.6	≲0.7	≲1.3	≲1.93	≲7.8	5.0/22.0 ^h	0.8
MC G+0.20-0.03	24.9	8.0 ^g	0.6	≲0.04	≲0.2	≲0.3	≲0.5	≲0.9	≲2.0	8.7	1.7
MC G+0.20-0.03	87.7	8.0 ^g	1.5	≲0.09	≲0.4	≲0.7	≲1.1	≲2.0	≲4.4	8.3	0.9
MC G+0.24+0.01	36	12.6 ^a -8.0 ^b	9.0	2.1	2.1	1.8	2.3	≲1.7	10.9	4.3/11.3 ^h	3.0
MC G+0.62-0.10	56	11.0 ^a -7.8 ^b	3.5	0.9	0.7	0.7	≲0.3	≲1.1	3.5	5.5	2.6
MC G+0.64-0.08	63	10.0 ^{ab}	10.0	0.7	≲0.29	0.7	≲0.4	≲1.8	≲2.4	3.8	2.0
MC G+0.67-0.06	51	10.5 ^a	3.1	0.8	0.5	0.7	≲0.4	≲1.3	1.9	7.8	3.1
MC G+0.68-0.10	21	9.0 ^a -6.0 ^c	2.5	1.3	1.1	1.5	≲0.4	≲1.3	2.1	8.4	3.2
MC G+0.70-0.01	62	11.0 ^a -10.0 ^b	3.7	0.9	1.5	1.1	1.2	≲1.6	4.2	...	2.8

TABLA 3.4: PARÁMETROS DERIVADOS

Fuente	V_{LSR} (km s ⁻¹)	T_{ex} (K)	X_{CH_3OH} ×10 ⁻⁷	$X_{C_2H_5OH}$ ×10 ⁻⁸	$X_{(CH_3)_2O}$ ×10 ⁻⁸	X_{HCOOCH_3} ×10 ⁻⁸	X_{HCOOH} ×10 ⁻⁹	X_{CH_3COOH} ×10 ⁻⁹	X_{H_2CO} ×10 ⁻⁹	X_{CS} ×10 ⁻⁹	N(H ₂) ×10 ²² cm ⁻²
MC G+0.70-0.09	43	10.0 ^b	1.7	0.7	≲0.3	≲1.3	≲0.4	≲3.6	≲2.4	5.3	2.9
MC G+0.71-0.13	40	8.0 ^b	2.4	≲0.8	≲0.6	≲2.8	≲0.9	≲7.9	≲0.6	6.0	2.8
MC G+0.76-0.05	27	10.0 ^{bc}	2.8	1.3	1.1	1.5	0.8	≲1.2	≲2.3	6.7	3.8
MC G+0.694-0.017	66	8.0 ^b -11.0 ^c	8.3	3.1	2.1	1.9	2.8	≲2.4	...	5.0	3.9
MC G+0.693-0.027	68	10.0 ^b -11.5 ^c	7.8	3.1	2.7	2.1	2.8	≲1.6	...	6.2/15.0 ^h	4.1
MC G+0.627-0.067	49	10.0 ^b -6.0 ^c	4.8	1.4	2.2	≲0.8	1.6	≲2.2	...	6.0/11.7 ^h	2.2
MC G+0.630-0.072	46	9.0 ^b -12.0 ^d	5.2	2.4	1.1	≲0.9	1.4	≲2.5	...	6.2	1.4
MC G+0.672-0.014	54	10.0 ^{bc}	1.9	0.9	1.0	0.7	0.4	≲1.2	...	6.8	5.5
MC G+0.640-0.046	58	10.0 ^b -7.0 ^d	4.2	1.2	1.4	0.6	1.1	≲1.6	...	11.9	4.7
MC G+0.635-0.069	48	11.0 ^d -8.0 ^c	4.6	0.8	1.1	1.6	≲0.6	≲2.5	...	6.7	2.3
MC G+0.659-0.035	62	11.0 ^b -16.0 ^c	4.2	0.8	1.1	0.9	1.3	≲0.7	13.9
MC G+0.681-0.028	65	11.0 ^b -12.0 ^c	2.9	1.0	1.9	2.5	3.9	≲0.8	8.8
MC G+0.673-0.025	68	18.5 ^c -13.9 ^b	2.4	0.6	0.9	1.2	1.8	≲0.8	14.6
Sgr B2N	65	72.6 ^a	1.3	2.3	3.5	5.0	9.9	≲0.7	19.0
Sgr B2M	63	55.4 ^a	0.3	0.3	0.3	0.4	0.4	≲0.2	65.0

NOTA- Velocidades LSR, temperaturas, abundancias de las diferentes moléculas y densidades de columna de H₂ en cm⁻², calculada a partir de los isotopólogos de CO, para cada fuente o componente de velocidad en cada caso.

^a derivada de C₂H₅OH

^b derivada de CH₃OH

^c derivada de HCOOCH₃

^d derivada de (CH₃)₂O

^f derivada de C¹⁸O

^g se asume 8 K

^h de los datos ¹³CS de Martín (2006a)

Densidades

Una vez derivada la T_{ex} , se puede hacer una estimación de la densidad de H_2 , suponiendo que la temperatura cinética y los coeficientes colisionales son conocidos.

A partir de la ecuación de equilibrio estadístico entre dos niveles ($E_s > E_i$):

$$n_s[A_{si} + B_{si}\bar{U}_{si} + C_{si}] = n_i[B_{is}\bar{U}_{is} + C_{is}] \quad (3.4)$$

Donde, A_{si} , B_{is} y B_{si} son los coeficientes de Einstein de emisión, de absorción y de emisión espontánea; C_{si} y C_{is} los coeficientes colisionales entre niveles; n_s y n_i , las poblaciones de los niveles superior e inferior; y \bar{U} es la densidad de energía del campo de radiación. Y suponiendo que existe equilibrio termodinámico,

$$A_{si} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{si} \quad (3.5)$$

$$g_i B_{is} = g_s B_{si} \quad (3.6)$$

$$(3.7)$$

que la distribución de velocidades de las partículas que colisionan cumplen con una distribución maxwelliana:

$$\frac{C_{is}}{C_{si}} = \frac{g_s}{g_i} e^{-\frac{h\nu}{\kappa T_{\text{fondo}}}} \quad (3.8)$$

$$(3.9)$$

y que la densidad de energía se represente como una función de Planck, y no hay ningún campo de radiación que no sea el de fondo de microondas (2.7 K).

$$\bar{U}_{si} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{\kappa T_{\text{fondo}}}} - 1} \quad (3.10)$$

Las densidades de H_2 se podrán calcular de la ecuación:

$$n = \frac{A_{si}}{\langle v\sigma \rangle_{si}} \frac{1 + \left[1 - \exp\left(\frac{h\nu}{\kappa T_{\text{ex}}}\right)\right] \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{\kappa T_{\text{fondo}}}\right) - 1}}{\exp\left(\frac{h\nu}{\kappa T_{\text{ex}}}\right) \exp\left(-\frac{h\nu}{\kappa T_k}\right) - 1} \quad (3.11)$$

donde A_{si} es el coeficiente de Einstein entre el nivel superior e inferior de la transición, $\langle v\sigma \rangle_{si}$ el coeficiente de colisión entre los mismos niveles, ν la frecuencia de la transición, h la constante de Plack, κ la constante de Boltzmann, T_{ex} la temperatura de excitación, T_{fondo} la temperatura de la radiación de fondo, y T_k la temperatura cinética. Pottage et al. 2004 ha calculado los coeficientes colisionales ($\langle v\sigma \rangle$) entre la especie E- CH_3OH y el para- H_2 para temperaturas cinéticas entre 5 K y 200 K. Si se asumen temperaturas cinéticas de ~ 100 K (Huttemeister et al. 1993a, Rodríguez-Fernández et al. 2001a), se obtienen densidades de $\text{H}_2 \sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$ para temperaturas de excitación de 6–8 K para la molécula de CH_3OH .

Para asegurarnos de que las densidades que se han estimado son correctas se han utilizado otros métodos para calcularlas. Se obtienen también densidades similares de H_2 si se derivan ajustando las intensidades de las líneas medidas de la especie E- CH_3OH con un modelo que utiliza la aproximación LVG (“Large velocity gradient”) para la excitación de E- CH_3OH . En esta aproximación se supone que existe un gradiente de velocidades en el gas

considerable, que desacopla radiativamente los puntos físicamente próximos debido a efecto Doppler (el modelo LVG utilizado ha sido programado por el Prof. J. Cernicharo). También se han estimado las densidades de H_2 utilizando el $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Para ello se han utilizado las temperaturas de excitación rotacional que se derivan de esta molécula y se ha hecho una estimación de los coeficientes colisionales de esta molécula, utilizando los de CH_3OH como primera aproximación. Se han corregido los coeficientes de CH_3OH por la diferencia de masa y de tamaño de las moléculas de CH_3OH y de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$. Con esta estimación, las densidades de H_2 derivadas son $\sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$, iguales a las calculadas a partir de CH_3OH .

Se han derivado las densidades H_2 a partir de los coeficientes colisionales entre CH_3OH y H_2 para una temperatura cinética de 100 K. Sin embargo, las anchuras de las líneas en las nubes moleculares del CG indican que existe la presencia de turbulencia supersónica y por consiguiente la velocidad relativa en los choques entre CH_3OH y H_2 no pueden representarse por la temperatura cinética de 100 K. Aunque esto ocurra, se ha comprobado como, para las transiciones observadas, los coeficientes colisionales no dependen mucho del incremento de la velocidad colisional entre las partículas (Pottage et al. 2004).

Densidad de columna de H_2

Para obtener la densidad de columna de H_2 en las fuentes observadas se ha usado los diferentes isotopólogos de CO, C^{18}O y ^{13}CO , asumiendo una abundancia de CO respecto a H_2 de 10^{-4} (Hüttemeister et al. 1998), con el fin de evitar los problemas de opacidad en sus líneas espectrales. Las razones isotópicas en el CG, como se vio en el Cap. 1, son $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}=20$ y $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}=250$ (Wilson & Rood 1994). De estos isotopólogos se han observado las transiciones $J=1\rightarrow 0$ y $J=2\rightarrow 1$ para C^{18}O , y la $J=1\rightarrow 0$ para ^{13}CO . Mediante la Ec. 3.3, asumiendo una temperatura de excitación similar al de las MOCs, se han obtenido densidades de columna de H_2 que van desde 7×10^{20} hasta 6.5×10^{23} para el núcleo caliente Sgr B2N. Las densidades de columna de H_2 obtenidas se muestran en la última columna de la Tab. 3.4.

Estas densidades de columna, obtenidas en este trabajo mediante un cálculo ETL, se han comparado con las obtenidas en fuentes comunes por Rodríguez-Fernández et al. (2001a) por medio una aproximación LVG. Las densidades de columna medidas mediante la aproximación ETL son similares o algo menores, pero dentro de un factor $\lesssim 2$, que las obtenidas mediante la aproximación LVG.

La emisión de C^{18}O y de ^{13}CO traza gas poco denso que puede no estar asociado en gran medida a las regiones donde se genera la emisión de las MOCs, debido a su gran momento dipolar. Por ello se ha observado además la emisión de CS, que tiene un momento dipolar similar al de las MOCs y permite hacer una estimación de la densidad de columna del gas denso. Asimismo esta molécula no parece estar afectada por la química de los granos (Martín-Pintado et al. 1997, 2000). En la columna undécima de la Tab. 3.4 se pueden ver abundancias de CS respecto a H_2 calculadas a partir de: las densidades de columna de CS, obtenidas usando la aproximación ETL, asumiendo la temperatura de excitación derivada a partir de las MOCs en cada nube, y la densidad de columna de H_2 calculada con los isotopólogos de CO. Estos datos han sido obtenidos a partir de la molécula de CS directamente y puede estar en cierta medida afectada por efectos de opacidad. Se han comparado la abun-

dancias derivadas a partir esta molécula con la que se obtiene a partir de los datos de Martín (2006a), para la transición $J=3 \rightarrow 2$ del isotópologo ^{13}CS . Esta comparación muestra que la transición $J=3 \rightarrow 2$ de CS es ópticamente espesa en las fuentes en común, por lo que las densidades de columna de CS derivadas mediante el ^{13}CS siempre son mayores en factores 1-5 según el caso, MC G-0.11-0.08 es la fuente donde la diferencia es menor y MC G+0.18-0.04 es la que claramente está más subestimada, en un factor 5. Esta comparación nos indica que las densidades de columna que se han obtenido a partir de CS pueden estar subestimadas en menos de un factor 5, por lo que se decidió no usar las observaciones de CS para estimar la densidad de columna de H_2 . En la discusión se ha considerado que las densidades de columna de H_2 que se obtienen con los isotópologos de CO son también una representación de las densidades de columna del gas denso donde se genera la emisión de las MOCs.

Densidad de columna de las MOCs

Para derivar las densidades de columna de las MOCs se ha utilizado la aproximación ETL y los parámetros de la Tab. 3.3. Muchas de estas moléculas tienen rotaciones internas que complican el espectro rotacional. En el Apéndice A se presentan en detalle las estructuras de niveles rotacionales, incluyendo la rotación interna y los parámetros de las moléculas. A continuación se discuten algunos aspectos que se han tenido en cuenta a la hora de obtener las densidades de columna.

CH_3OH —Los niveles rotacionales de CH_3OH están desdoblados en dos subestados o especies, A y E. Después de haber calculado la intensidad integrada $\int T_A^* dv$ de una de las líneas se puede calcular la densidad de columna total de CH_3OH . Para su isotópologo $^{13}\text{CH}_3\text{OH}$ se utiliza el mismo procedimiento. La comparación de las abundancias entre ambos isotómeros sirve para estimar la opacidad en las líneas de CH_3OH , ya que la razón de abundancias debe ser igual a la isotópica.

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ —También presenta dos subestados diferentes, el subestado Trans y el subestado Gauche. En este caso la temperatura de excitación necesaria para excitar las transiciones del subestado Gauche es mucho mayor que las que se miden en las nubes del CG, por lo que sólo se ha considerado la densidad de columna del subestado Trans.

$(\text{CH}_3)_2\text{O}$ —Presenta un espectro rotacional más complejo, los niveles rotacionales se dividen en cuatro subestados (AA, EE, AE y EA), cada uno con un peso de espín diferente. Una vez medida la intensidad integrada de los cuatro subestados superpuestos, se deberá usar como degeneración de espín nuclear $g_i=2+4+6+16=28$ en el caso de que $K_a K_c$ sea $ii \leftrightarrow pp$ o $g_i=4+6+10+16=36$ cuando sea $pi \leftrightarrow ip$, con $p=\text{par}$ e $i=\text{impar}$.

HCOOCH_3 —Tiene dos subestados A y E, y en los datos obtenidos se presentan como líneas separadas para todas las transiciones excepto una, en la que se ha medido la intensidad integrada. Se ha obtenido para todas las transiciones la densidad de columna integrada de cada subestado por separado y se ha sumado *a posteriori* para obtener la densidad de columna total.

HCOOH —En esta molécula no existe ninguna rotación interna, y la densidad de

columna ha sido calculada directamente de la intensidad integrada.

CH₃COOH—Tiene un espectro rotacional similar al de su isotópologo más abundante, HCOOCH₃, presentando un desdoblamiento en subestados A y E. No se ha detectado ninguna línea de esta molécula pero se han calculado los límites superiores para cada subestado por separado y se ha sumado *a posteriori*, para obtener el límite superior a la densidad de columna total de la molécula.

H₂CO—Usando la detección de el isotópologo H₂¹³CO de H₂CO, se puede calcular la densidad de columna de H₂CO mediante la misma razón isotópica que se ha usado anteriormente para CO. Esta molécula no presenta rotaciones internas, pero sí existe una degeneración orto/para. La transición observada en este caso es “para” con lo que la degeneración será $g_i=1$.

3.4.2 Abundancias

En la Tab. 3.4 se presentan, las abundancias de las MOCs relativas a H₂. Se han calculado dividiendo las densidades de columna de las moléculas complejas por la densidad de columna de H₂ derivada a partir de CO. Para diferenciar las nubes moleculares en la línea de mirada se han utilizado las velocidades radiales a las que se observan.

Las abundancias de las MOCs son en general muy elevadas, incluso mayores en algunos casos que las medidas en núcleos calientes, como se verá en el siguiente apartado. La abundancia de CH₃OH varía en dos órdenes de magnitud de 2.4×10^{-8} a 1.1×10^{-6} ; en el caso de C₂H₅OH desde $\leq 4 \times 10^{-10}$ a 6×10^{-8} , para (CH₃)₂O desde $\leq 2 \times 10^{-9}$ a 5.6×10^{-8} , para HCOOCH₃ desde $\leq 3 \times 10^{-9}$ a 7.5×10^{-8} , para HCOOH entre $\leq 3 \times 10^{-10}$ y 4.1×10^{-9} y para H₂CO desde $\leq 7 \times 10^{-10}$ a 19.5×10^{-9} . En el caso de CH₃COOH se presentan sólo límites superiores a su abundancia que varían entre $\leq 5 \times 10^{-10}$ y $\leq 5.5 \times 10^{-8}$.

Como se ve en la Tab. 3.4 existen algunas fuentes en las que sólo se han obtenido límites en las abundancias de todas las moléculas excepto para CO, CS y CH₃OH. En el caso de las fuentes que se encuentran entorno a Sgr C ($l < -30^\circ$) la sensibilidad de las observaciones no nos permite obtener detecciones y no se han incluido estos valores en la discusión. Éste no es el caso para las fuentes MC G+0.18–0.04, MC G+0.20–0.03 (La Hoz) y MC G+0.13+0.02 (ATR), donde las abundancias de estas MOCs son menores que las del resto de las fuentes. Esto se observa sobre todo en la molécula de C₂H₅OH donde los observaciones tienen mejor sensibilidad. MC G+0.18–0.04 y MC G+0.20–0.03, con dos componentes en velocidad diferentes cada una, centradas a $\sim 25 \text{ km s}^{-1}$ y a $\sim 80 \text{ km s}^{-1}$, están afectadas por la radiación que produce un cúmulo estelar joven, el Quintuplete (Cap. 1). MC G+0.13+0.02 está afectado por otro cúmulo estelar joven, el cúmulo de los Arcos. En esta posición, también con dos componentes de velocidad, la componente de -30 km s^{-1} es la que está más afectada por el flujo de fotones ultravioleta, lo que indica que esta componente de velocidad está asociada a los ATR (Serabyn & Güsten 1987). La otra componente en velocidad de la misma fuente tiene un límite superior en la abundancia de las MOCs similar al de otras fuentes del CG, con lo que no se tienen indicios de una diferenciación química en este caso.

CH_3OH es la única molécula compleja que se ha detectado en todas las fuentes, además, en la mayoría de los modelos químicos que se encuentran en la bibliografía se supone que esta molécula es la básica para formar la siguiente generación de moléculas, y se eyecta de los mantos de los granos. Según estos modelos de formación en fase gaseosa la razón de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ con respecto a CH_3OH nos puede dar una estimación de la edad de la eyección de los mantos de los granos. En las Fig. 3.6 y 3.7 se presentan las razones de todas las MOCs con respecto a CH_3OH frente a la abundancia de CH_3OH . En estas figuras se presentan todas las nubes del CG donde se han obtenido detecciones y los límites superiores en las fuentes en las que las razones de abundancias son más significativas.

Los principales resultado que se derivan de esta comparación son:

- Todas las moléculas complejas, excepto CH_3COOH en la que sólo se obtienen límites superiores, muestran una abundancia relativa con respecto a CH_3OH sorprendentemente constante, mientras que la abundancia de CH_3OH varía en un factor 50.
- La razón $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$ es constante entorno a $\sim 3.6 \times 10^{-2}$, dentro de un factor 3.7. En la gráfica de esta razón se puede ver como las fuentes que se encuentran en la Hoz y los ATR, de las que se han hablado anteriormente, la razón es menor que la que se observa en el resto de las fuentes del CG por un factor $\gtrsim 6$.
- Las razones de abundancias $(\text{CH}_3)_2\text{O}/\text{CH}_3\text{OH}$ y $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ presentan unos valores similares a la anterior, encontrándose un valor promedio de 3.9×10^{-2} . En este caso la dispersión de las razones será mayor que en el caso de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$, estando dentro de un factor 7.
- Para $\text{HCOOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ se ha obtenido un valor promedio de 7.9×10^{-3} con una variación de un factor 5.3.
- Ya se había mencionado que el CH_3COOH no había sido detectado en nuestras observaciones. En este caso su razón $\text{CH}_3\text{COOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ presenta unos límites superiores entre $\leq 5 \times 10^{-1}$ y $\leq 1.2 \times 10^{-3}$.
- En la Fig. 3.7 se muestra la razón $\text{H}_2\text{CO}/\text{CH}_3\text{OH}$. Dado que no se han obtenido observaciones en todas las fuentes, se han presentado los resultados aparte con todos los límites con el fin de tener una muestra más amplia de objetos. Como en el caso de las otras MOCs su distribución de razones es constante entorno a 1.1×10^{-2} , con una dispersión de un factor 3.

En la Fig. 3.6 se presenta además la razón $\text{CS}/\text{CH}_3\text{OH}$, ya que se supone que la química que sostiene la abundancia de CS no es la misma que la de las MOCs. Se observa que $\text{CS}/\text{CH}_3\text{OH}$ no permanece constante y que su variación es más rápida que la de CH_3OH ; decrece de manera continuada en un factor 60 cuando la abundancia de CH_3OH aumenta en un factor 25. La variación que se produce en la razón $\text{CS}/\text{CH}_3\text{OH}$ es claramente mayor que la dispersión de las MOCs, en un factor ~ 10 veces mayor, y esta variación tiene además una pendiente pronunciada. Las densidades de columna de CS podrían estar afectadas de opacidad, por lo que estas razones podrían aumentar. Usando como factores de corrección de los efectos de la opacidad los factores que se habían obtenido comparando los datos de este

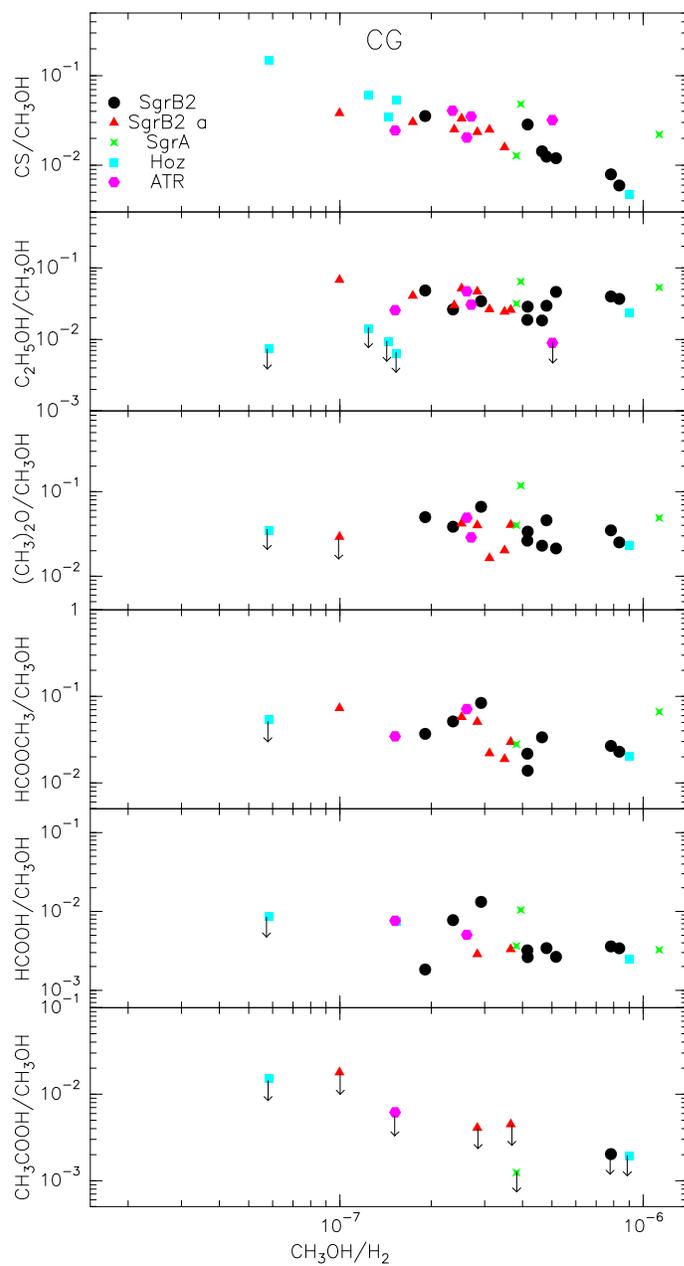


FIGURA 3.6: Abundancias relativas de las MOCs observadas en el CG con respecto a CH_3OH . Se ha representado cada región del CG con un símbolo diferente tal y como se muestra en la leyenda. Las flechas representan límites superiores y sólo se han representado los que son significativos.

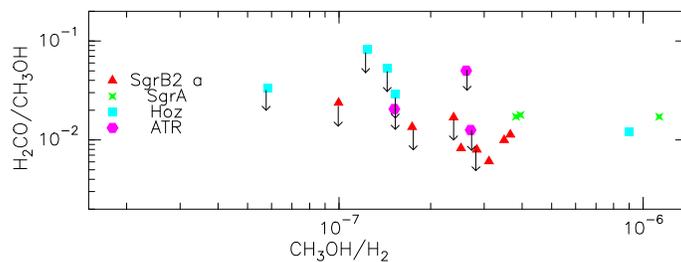


FIGURA 3.7: Abundancias relativas de H_2CO con respecto a CH_3OH . Ver Fig. 3.6.

trabajo datos con los de Martín (2006a), se observa que la pendiente de las razones puede ser igual o aún más pronunciada que la que se encuentra en la Fig. 3.6. La Fig. 3.8 muestra el

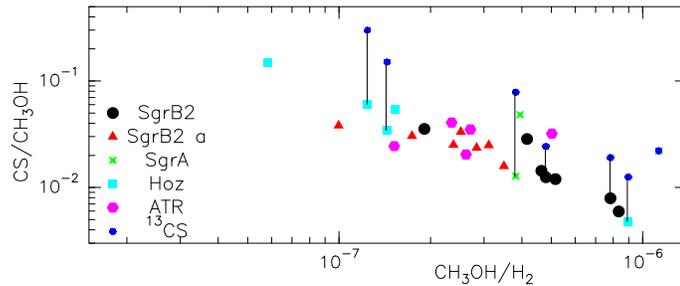


FIGURA 3.8: Variación de la razón CS/CH_3OH usando los datos de Martín (2006a). Los puntos azules representan las razones después de introducir correcciones por la opacidad de las líneas de CS. La pendiente de la figura se mantiene después de esta corrección.

aumento que se producen en las razones CS/CH_3OH debido a las correcciones de la opacidad mediante líneas verticales. La fuente que presenta una menor opacidad en la línea de CS es MC G-0.11-0.08 que se encuentra en la parte derecha de la figura con abundancia de CH_3OH de 1.1×10^{-6} . Para algunas fuentes con abundancias de CH_3OH intermedias se observa que las líneas están afectadas por opacidades similares (~ 3) y las dos componentes en velocidad de MC G+0.18-0.04 (cuadrados con abundancias de CH_3OH de 1.2 y 1.4×10^{-7}) son las fuentes donde el factor de corrección es mayor (5), por lo que la inclinación de las razones va a ser o igual o más pronunciada una vez hechas las correcciones por el efecto de la opacidad de las líneas de CS. Esta clara discrepancia entre la razón de CS con respecto al resto de las MOCs es consistente con una eyección de estas moléculas orgánicas de los mantos helados de los granos, mientras aumenta la abundancia de CH_3OH debido a choques, la abundancia de CS permanece constante y la razón disminuye. El resto de las MOCs que deben ser eyectadas también de los mantos de los granos o dependen de la abundancia de CH_3OH , se mantienen con abundancias relativamente constantes respecto a CH_3OH .

3.5 Comparación con objetos del disco Galáctico

En el medio interestelar existen prototipos de nubes moleculares con químicas específicas, uno de ellos son las nubes oscuras. En estas nubes las temperaturas cinéticas son sólo de 10 K y se encuentran abundancias de MOCs muy pequeñas. En la nube oscura TMC-1, la abundancias de CH_3OH , H_2CO y $HCOOH$ son 2×10^{-9} , 2×10^{-8} y 3×10^{-10} , respectivamente (Turner et al. 2000). Para otra nube oscura como L183, se encuentran abundancias similares, 8×10^{-9} para CH_3OH , 2×10^{-8} para H_2CO y 3×10^{-10} para $HCOOH$ (Turner et al. 1999; Dickens et al. 2000). Otras moléculas más complejas como C_2H_5OH , $(CH_3)_2O$, CH_3COOH y $HCOOCH_3$ no han sido detectadas en estas nubes, pero se espera que su abundancia sea muy pequeña, en torno a 10^{-12} para C_2H_5OH y $(CH_3)_2O$ (Hasegawa & Herbst 1993a).

Otro tipo de objeto son los núcleos calientes (“Hot Cores”) relacionados con regiones de formación estelar masiva. En estos objetos fue donde se observaron, por primera vez, grandes abundancias de MOCs. Estos objetos de corta vida (10^{5-6} años) son condensaciones de gas pequeñas ($\lesssim 0.1$ pc), calientes ($\gtrsim 150$ K) y muy densas ($\geq 10^5$ cm^{-3}) donde están naciendo proto-estrellas masivas que calientan los granos de polvo evaporando sus mantos

helados, inyectando moléculas complejas a la fase gaseosa (Bisschop et al. 2007). Recientemente, se han observado grandes abundancias de MOCs, como $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y HCOOCH_3 , en núcleos calientes relacionados con proto-estrellas poco masivas (Bottinelli et al. 2004a, 2004b, 2007; Kuan et al. 2004). En este caso la zona caliente y densa será aún más interna y pequeña, ya que la luminosidad de estos objetos es menor que la de las estrellas masivas.

Con el fin de establecer el origen de las grandes abundancias de MOCs en el CG se van a comparar estos resultados con los obtenidos en las regiones de formación estelar, donde estas moléculas son evaporadas de los granos de polvo.

3.5.1 Núcleos calientes

Para comparar los datos del CG con los núcleos calientes asociados con estrellas masivas se han seleccionado de entre la bibliografía los datos de Ikeda et al. (2001), que observó MOCs en los núcleos calientes W51, NGC6334f, G327.3-0.6, G31.41+0.31, G34.3+0.2, G10.47+0.03 y en el núcleo caliente de Orión. Estos datos se han obtenido de forma homogénea utilizando dos telescopios de características similares, uno para fuentes en el Hemisferio Norte y otro para el Sur. La razón $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{COOH}$ obtenida por Remijan et al. (2002, 2003) para Sgr B2N, W51 y G34.3+0.2 se ha utilizado para tener una estimación de la abundancia de CH_3COOH . La densidad de columna de H_2 y las abundancias de las diferentes moléculas complejas de estos núcleos calientes se presentan en la Tab. 3.5. En la Tab. 3.4 se muestran también los datos de dos núcleos calientes que se encuentran en el CG, Sgr B2N y Sgr B2M.

Comparando las tablas de abundancias se observa que existen regiones en el CG que presentan abundancias mayores que las de algunos núcleos calientes como en el caso de MC G-0.11-0.08. En la Fig. 3.9 se muestra la comparación de las razones de abundancias entre las nubes del CG y los núcleos calientes medidos en la Galaxia por Ikeda et al. (2001). Como pasa en las nubes del CG, la abundancia de CH_3OH que se observa en los núcleos calientes también sufre variaciones de más de un orden de magnitud entre los diferentes objetos. Aunque las densidades de columna de H_2 en los núcleos calientes son normalmente un orden de magnitud mayores que en las nubes del CG, se observa que sus abundancias relativas son similares.

- Para la razón $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$ los valores de los núcleos calientes de Ikeda et al. (2001) concuerdan bastante bien con los de las nubes del CG, siendo su valor medio 7×10^{-2} .
- Las razones $(\text{CH}_3)_2\text{O}/\text{CH}_3\text{OH}$ presentan una mayor discrepancia entre los núcleos calientes y las fuentes del CG, pero las razones de los núcleos calientes seleccionados son muy parecidas entre sí, con un valor medio de 2×10^{-1} .
- Las razones de $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ y $\text{HCOOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ son muy parecidas entre núcleos calientes y nubes del CG, siendo sólo el núcleo caliente de Sgr B2N el que presenta una sobreabundancia de HCOOCH_3 y HCOOH comparado con el resto. Los valores medios de las razones de Ikeda et al. (2001) son 8×10^{-2} para $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ y 7.6×10^{-3} para $\text{HCOOH}/\text{CH}_3\text{OH}$.
- Los límites superiores más significativos en las razones $\text{CH}_3\text{COOH}/\text{CH}_3\text{OH}$ para el CG son mayores que las razones observadas de esta molécula en estos núcleos calientes, con lo que podrían existir también similitudes en sus razones.

TABLA 3.5: ABUNDANCIAS DE LOS NÚCLEOS CALIENTES SELECCIONADOS

Fuente	X_{CH_3OH} $\times 10^{-7}$	$X_{C_2H_5OH}$ $\times 10^{-8}$	$X_{(CH_3)_2O}$ $\times 10^{-8}$	X_{HCOOCH_3} $\times 10^{-8}$	X_{HCOOH} $\times 10^{-9}$	X_{CH_3COOH} $\times 10^{-9}$	X_{H_2CO} $\times 10^{-8}$	$n(H_2)$ $\times 10^{22} \text{cm}^{-2}$
masivos								
W51 e1/e2	3.0	0.9	...	3.0	...	0.3–1.8	...	36
NGC6334f	2.0	0.9	4.0	...	1.0	20
G327.3–0.6	1.0	1.0	3.0	...	0.9	20
G31.41+0.31	0.9	2.0	2.0	...	1.0	16
G34.3+0.2	0.9	0.6	1.0	0.5	...	0.2	...	30
G10.47+0.03	2.0	1.0	3.0	...	1.0	13
Orion	10.0	2.0	...	9.0	10
poco masivos								
IRAS 4A	$\lesssim 0.1$...	$\lesssim 2.8$	6.8	4.6	...	2.0	160
IRAS 4B	7.0	...	$\lesssim 120.0$	220.0	$\lesssim 1000$...	300.0	8.1
IRAS 2A	3.0	...	3.0	$\lesssim 134.0$	$\lesssim 120$...	20.0	21
IRAS 16293	1.0	...	24.0	34.0	~ 62	...	10.0	7.5

NOTA- Abundancias que se han observado en núcleos calientes que se utilizan en las gráficas, los datos se han obtenido de Ikeda et al. (2001) y de Remijan et al. (2002, 2003). Las abundancias observadas en el CG son similares a las que se encuentran en estos núcleos calientes galácticos. IRAS 4A, IRAS 4B, IRAS 2A (en NGC 1333) y IRAS 16293 son núcleos calientes relacionados con estrellas poco masivas, cuyas abundancias se han obtenido de Bottinelli et al. (2007).

Es interesante comprobar que objetos con diferentes propiedades físicas en términos de la densidad, temperatura del polvo y extensión espacial muestren razones de abundancias tan parecidas para las MOCs. Recientemente, Bisschop et al. (2007) han observado éstas y otras moléculas complejas en núcleos calientes diferentes a los observados por Ikeda et al. (2001). En este nuevo estudio obtienen también la misma tendencia de estas razones a ser constantes y similares a las encontradas en el CG.

3.5.2 Núcleos calientes de estrellas poco masivas, “hot corinos”.

Los núcleos calientes moleculares en NGC 1333 (IRAS 4A, IRAS 4B e IRAS 2A) e IRAS 16293–2422 (A y B), están asociados con estrellas poco masivas, y han sido observados entre otros por, Bottinelli et al. (2004a, 2004b, 2007), Jorgensen et al. (2005) y por Kuan et al. (2004). Estas regiones presentan también grandes abundancias de $HCOOCH_3$, H_2CO , $(CH_3)_2O$ y $HCOOH$, ver Tab. 3.5. En este caso se han asumido las abundancias que derivan Bottinelli et al. (2007) que asumen que los tamaños de los objetos que emiten estas moléculas son: $0.5''$ para IRAS 4A, $0.25''$ para IRAS 4B, $0.43''$ IRAS 2A y $2''$ para IRAS 16293.

Excepto para IRAS 4A que muestra abundancias menores, las abundancias de $HCOOCH_3$, H_2CO , $(CH_3)_2O$ y $HCOOH$ son mayores que las observadas en las nubes del CG y en núcleos calientes de estrellas masivas. La abundancia de CH_3OH varía casi dos órdenes de magnitud, y, como en el caso de las nubes del CG y en núcleos calientes de estrellas masivas, las abundancias relativas de las diferentes moléculas complejas respecto a la de CH_3OH es muy similar independientemente del núcleo caliente de estrellas poco masivas. Lo único que diferencia, y de manera sorprendente a estas regiones, es que el CH_3OH se presenta con una abundancia relativa respecto al resto de las moléculas complejas menor que en las nubes moleculares del CG y en núcleos calientes de estrellas masivas. Por ejemplo,

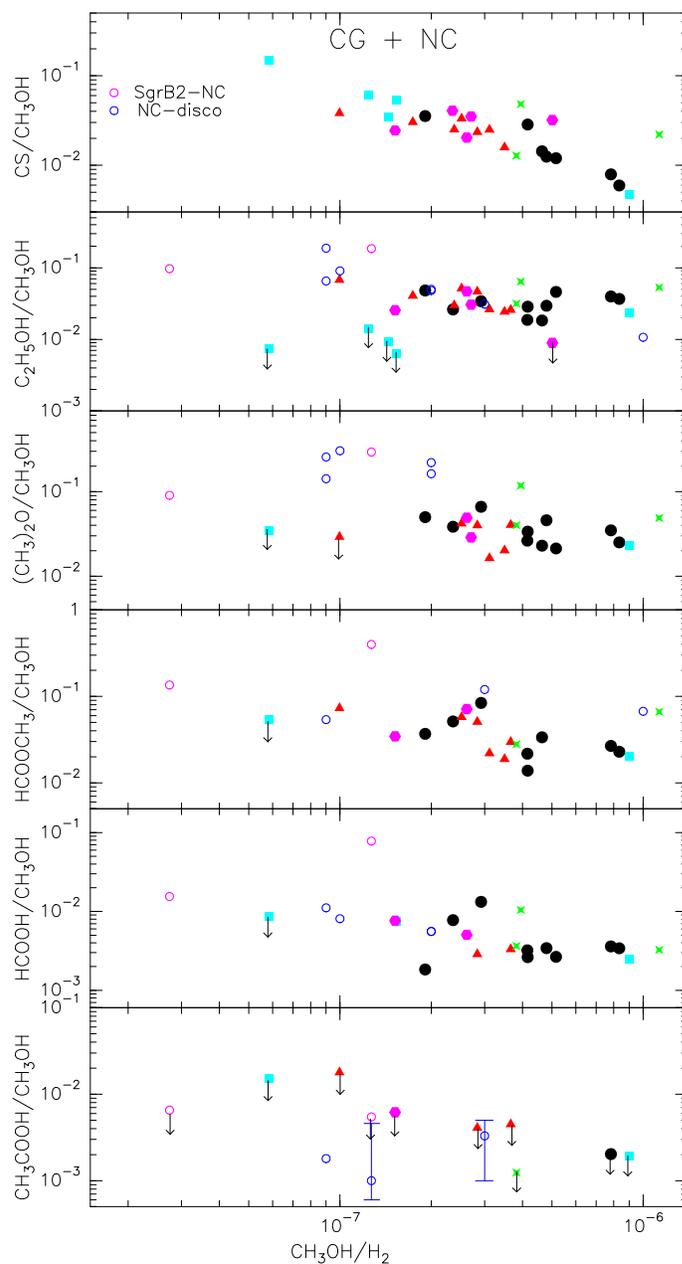


FIGURA 3.9: En esta figura se presentan las razones de abundancias para las nubes del CG y las que se encuentran en los núcleos calientes. Los datos de los núcleos calientes han sido obtenidos de Ikeda et al. (2001) y Remijan et al. (2002, 2003). Ver Fig. 3.6.

la razón $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ puede llegar a ser hasta dos órdenes de magnitud mayor en núcleos calientes de estrellas poco masivas que en las nubes del CG.

Aunque el número de observaciones de estos núcleos calientes poco masivo es todavía muy pequeño, parece que las abundancias relativas entre HCOOCH_3 y $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ conservan las mismas características que las que se observan en el CG y que otras moléculas complejas pueden presentar cambios significativos. En el Cap. 4, al estudiar nubes oscuras afectadas por choques recientes, se discutirán las explicaciones que pueden dar lugar a la diferenciación química entre estas regiones y las nubes del CG y los núcleos calientes de estrellas masivas.

3.6 Discusión

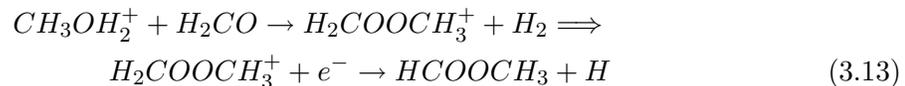
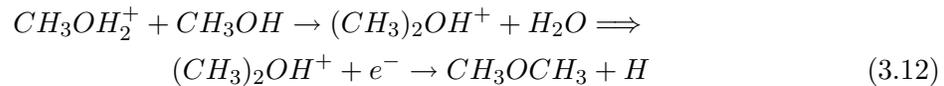
Las grandes abundancias de MOCs como CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, HCOOCH_3 , HCOOH y H_2CO parecen ser una característica general en las nubes moleculares del CG. CH_3COOH no ha podido ser detectado, pero los límites superiores en su abundancia están de acuerdo con las abundancias observadas en algunos núcleos calientes. La característica principal que se observa es que las MOCs muestran una abundancia relativa con respecto a CH_3OH constante, dentro de un factor 4–8, para todo el rango de abundancias de CH_3OH observado en el CG a lo largo de varios cientos de parsecs. Las abundancias relativas con respecto a CH_3OH de las MOCs y del CS muestran diferencias importantes. La razón de abundancia de CS a CH_3OH muestra un incremento en un factor 60 cuando la abundancia de CH_3OH disminuye; mostrando la diferencia entre las moléculas relacionadas con la eyección de los mantos de los granos y el CS, que no parece estar tan influenciado por esta eyección. Este resultado concuerda con lo obtenido por Jiménez-Serra et al. (2005), en L1448, y Bachiller & Pérez Gutiérrez (1997), en L1157, donde observaron como la abundancia de CH_3OH aumenta mucho más significativamente que la del CS en la región del precursor magnético de choques tipo-C, donde los mantos de los granos son eyectados a la fase gaseosa.

El resultado más sobresaliente, que se obtenido hasta ahora, es que las abundancias relativas de las MOCs presentan similitudes con las que se puede medir en otros objetos de corta vida, como son los núcleos calientes asociados a estrellas masivas. Aun habiendo diferentes condiciones físicas tanto en núcleos calientes masivos como en las nubes del CG se observa que la química relacionada con las MOCs es muy parecida.

Para explicar las abundancias obtenidas, la discusión se dividirá en diferentes apartados. Se comienza comentando el comportamiento general de las fuentes comparándolo con modelos químicos de la bibliográfica, a continuación se estudian las escalas de tiempos en las que se deben producir los choques para poder observar estas abundancias tan grandes y tan uniformes. Para finalizar se estudiará el comportamientos de algunas de las fuentes que presentan abundancias de las MOCs más pequeñas que las de la media de las nubes del CG.

3.6.1 Comportamiento general de las fuentes

Las grandes abundancias de alcoholes, como CH_3OH y $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, y de otras MOCs, como HCOOH y H_2CO , no se pueden explicar únicamente por la química en fase gaseosa, por lo que deben de ser eyectadas de los mantos de los granos como ocurre en núcleos calientes por evaporación. Una vez se han eyectado estas moléculas, se había propuesto la formación de HCOOCH_3 y $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ en fase gaseosa a partir del CH_3OH mediante las reacciones (Charnley et al. 1995):



Recientemente se ha demostrado que HCOOCH_3 no puede producirse de forma eficiente por reacciones en fase gaseosa a partir del CH_3OH (la reacción 3.13 es más lenta de lo que se

suponía, Horn et al. 2004). Además, la otra molécula que interviene en la formación de HCOOCH_3 , H_2CO , que debería ser, según los modelos, más abundante que HCOOCH_3 , en el CG es lo contrario. Estas incoherencias y las abundancias tan grandes de las MOCs, que se encuentran tanto en el CG como en núcleos calientes, indican claramente que el HCOOCH_3 no puede ser producido en fase gaseosa y que los granos de polvo deben jugar un papel fundamental en su formación. Sólo $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ puede ser producido de forma eficiente en fase gaseosa a partir de CH_3OH , mientras que su producción en los mantos de los granos no afectaría de forma notable en su abundancia (Peeters et al. 2006). De todas maneras, las abundancias de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ muestran las mismas tendencias que las abundancias de las otras MOCs, como $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, cuya única posibilidad de formación es en los mantos de los granos. Para descubrir que pasa realmente se pueden comparar las abundancias relativas que se han medido con algunos de los modelos químicos que se pueden encontrar en la bibliografía. Si el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ se forma en fase gaseosa, esta molécula debería mostrar la tendencia que sugieren los modelos.

En la Tab. 3.6 se observan las razones de abundancias para diferentes modelos químicos tanto para núcleos calientes como para nubes oscuras. Las razones presentadas son las que se encontrarán en el momento de máxima abundancia de las moléculas “hijas” (las que se debería formar en fase gaseosa después de la eyección de los mantos de los granos de polvo). Las fuentes del CG presentan razones de abundancias similares o superiores a las que predicen estos modelos. Se puede ver que las razones de $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ que más se parecen a lo observado son las de Millar et al. (1991) y Charnley et al. (1995), pero usan la reacción 3.13 que no funciona en fase gaseosa. Sin embargo, se pueden usar las abundancias medidas de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ para comprobar la formación de moléculas en fase gaseosa.

Los modelos de fase gaseosa (ver referencias en la Tab. 3.6) muestran una evolución en las abundancias relativas entre las moléculas “hijas” y las moléculas “madre”. Esta evolución debería mostrarse de la siguiente manera (ver Cap. 2, Fig. 2.7): en el régimen de abundancias muy grandes de la molécula madre CH_3OH , justo cuando esta molécula acaba de ser eyectada de los mantos helados de los granos y el procesado en fase gaseosa comienza, la razón de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ respecto a CH_3OH debe de ser muy pequeña. Ésta razón también debe encontrarse después de pasado bastante tiempo, en el régimen en el que las reacciones de destrucción de las moléculas empiezan a ser importantes y las abundancias del CH_3OH y del resto de moléculas disminuye. Entre estos dos regímenes se espera encontrar los máximos valores en la razón entre las abundancias de las moléculas hija y madre, ya que las moléculas hijas alcanzan su máxima abundancia y no existen procesos de destrucción de la madre aparte de los de formación de las moléculas hijas.

De los modelos que estudian los núcleos calientes se puede estimar que la variación en la razón $(\text{CH}_3)_2\text{O}/\text{CH}_3\text{OH}$ con respecto al tiempo puede ser mayor de tres órdenes de magnitud. Por el contrario en las nubes del CG no se muestra ninguna evolución, las razones no parecen evolucionar; permanecen constantes en todo el rango observado de abundancias de CH_3OH (que, aunque no directamente nos dan idea de la evolución temporal al ir destruyéndose). Como se había visto anteriormente, las abundancias relativas de las moléculas complejas variaban en menos de un orden de magnitud. En el caso de los núcleos calientes, las escalas temporales las escalas de tiempo son más cortas debido a las grandes densidades, por lo que se podía esperar que en el caso de regiones menos densas y menos

TABLA 3.6: MODELOS QUÍMICOS

Fuente	T (K)	$n(\text{H}_2)$ (cm^{-3})	$\frac{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}^a}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{(\text{CH}_3)_2\text{O}^a}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{\text{HCOOCH}_3^a}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{\text{H}_2\text{CO}^a}{\text{CH}_3\text{OH}}$	edad $\times 10^5$ años
nubes CG	$\sim 100^b$	$\sim 10^4 - 10^5$	~ 3.66	~ 3.87	~ 3.96	$\sim 1.10 \times 10^{-2}$...
núcleos calientes ^c	~ 100	$\sim 10^6$	~ 6.90	~ 21.80	~ 8.03
Leung et al. (1984) ^d	10	10^4	0.14	6.00	...	43.6	3.16
Herbst & Leung (1986) ^e	10	10^4	2.18	5.25	...	9.75	3.20
Herbst & Leung (1989) ^e	10	10^4	0.99	0.12	...	65.5	1.00
Millar et al. (1991) ^d	70	2×10^5	0.19	6.32×10^{-2}	1.26	3.26×10^2	1.60
Hasegawa & Herbst (1993b) ^f	10	10^4	0.77	1.56×10^{-2}	...	4.06×10^2	3.20
Caselli et al. (1993) ^g	100	10^6	1.5×10^{-4}	0.21	0.47	1.05	1.00
Charnley et al. (1995)	100	2×10^6	...	~ 2	~ 1.5	4×10^{-2}	~ 0.30
Rodger & Charnley (2001) ^h	100	10^7	3.75	30.00	10.00	...	0.12
Rodger & Charnley (2001) ⁱ	100	10^7	20.00	12.50	0.50	...	0.60
Horn et al. (2004) ^j	100	10^6	...	0.75	3.33×10^{-2}	1.56	0.80
Peeters et al. (2006) ^k	100	10^7	...	50.00	0.20
Garrod & Herbst (2006) ^l	200^m	10^{7m}	...	0.50	0.09	3.00×10^{-4}	2
Garrod & Herbst (2006) ^l	200^m	10^{7m}	...	0.03	0.60	0.80	0.5
Garrod & Herbst (2006) ^l	200^m	10^{7m}	...	0.75	0.09	5.00×10^{-4}	10

NOTA- ^a Abundancias relativas de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, HCOOCH_3 y H_2CO con respecto a CH_3OH que predicen los modelos químicos dependientes del tiempo en el momento en el que las moléculas derivadas del CH_3OH alcanzan su abundancia máxima. ^b De Hüttemeister et al. (1993b) y Rodríguez-Fernández et al. (2001a). ^c Núcleos calientes de Ikeda et al. (2001). ^d Modelo 1 del artículo. ^e Modelo con menos metales del artículo. ^f Modelo que comienza con abundancias moleculares de H_2 . ^g Modelo para ajustar las observaciones del núcleo caliente de Orión. ^h Modelo que no tiene en cuenta el NH_3 . ⁱ Modelo que tiene en cuenta el NH_3 . ^j Modelo 3 del artículo. ^k En el que el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ sólo se crea en fase gaseosa. ^l Modelo ajustado para la edad que aparece en la octava columna. ^m Valores finales del modelo.

calientes del CG la variación en las abundancias sea más lenta. Leung et al. (1984) estudian la forma en que varían las escalas temporales de sus modelos con cambios de densidades de H_2 , comprobando que el tiempo en que se alcanza el máximo de abundancia de las moléculas hijas aumenta un factor 1.5 cuando disminuye la densidad en un orden de magnitud. Esto va también en contra de evolución química en fase gaseosa, ya que entonces se deberían encontrar varios estadios y muy diferentes abundancias relativas.

Uno de los modelos de química de núcleos calientes más reciente es el de Garrod & Herbst (2006). En éste se supone que el calentamiento de los granos de polvo no es algo automático, sino que el aumento paulatino de temperatura que produce la proto-estrella puede hacer que se empiecen a evaporar los átomos de H de los mantos y a hacer que ciertos radicales puedan moverse por la superficie de los granos. Esto produciría una química muy rica, que podría dar lugar a muchas moléculas complejas. Este hecho no se reproduce en el CG, debido a que el calentamiento de los granos de polvo no es eficiente y no existe de manera genérica una estrella que se esté formando en cada nube molecular del CG que se ha estudiado. Además como se puede ver en la Tab. 3.6, no existe ninguna similitud con los valores obtenidos a partir de los diferentes modelos.

Si se supone que los modelos de núcleos calientes son aplicables a la química del centro de nuestra Galaxia, la falta de evolución en las abundancias relativas entre las moléculas, sobre todo respecto en la razón $(\text{CH}_3)_2\text{O}/\text{CH}_3\text{OH}$, nos indicaría que la eyección de los mantos de los granos se tendría que haber producido de forma simultánea en todas las regiones de estudio, lo que es prácticamente imposible, debido a que se están estudiando nubes moleculares distribuidas a lo largo de unos 200 pc. Esta eyección tendría que haberse producido hace unos $\sim 10^5$ años. La falta de indicios de evolución temporal en la química de las nubes del CG, junto con las similitudes entre las razones de abundancia con respecto a CH_3OH de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 y HCOOH , parecen indicar que $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ ha sido eyectado de los granos, como el resto de las moléculas estudiadas.

A continuación se van a estudiar las escalas de tiempo involucradas en los choques y en el agotamiento de las abundancias en fase gaseosa al pasar a fase sólida en los mantos de los granos, y compararlas con las observaciones para establecer que procesos generan esta física tan uniforme en objetos tan diferentes.

Erosión de los mantos de los granos de polvo y escalas de tiempo para la deposición en las superficie de los granos.

Se pueden estimar las escalas de tiempo de la formación de moléculas en fase gaseosa, usando el modelo de Horn et al. (2004) para un núcleo caliente (sólo utilizando la relación de abundancias entre $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y CH_3OH). Con los valores observados, el choque debió de producirse hace $\sim 8 \times 10^4$ años para un núcleo caliente. Para las densidades del CG, dos órdenes de magnitud más pequeñas que las utilizadas por Horn et al., se obtienen unas edades de los choques $\sim 2.4 \times 10^5$ años (un factor 3 más tardías, según Leung et al. 1984), una edad similar a la que se puede derivar de modelos más antiguos (Tab. 3.6). Estos choques deberían producirse al mismo tiempo en todo el CG y no son realistas, pero se puede considerar de todas maneras que las moléculas son eyectadas por medio de choques, y habrá que ver los distintos procesos que pueden afectar a estas moléculas.

Las nubes moleculares del CG contienen típicamente granos de polvo relativamente fríos ($T_{\text{grano}} \sim 10\text{--}30$ K, Rodríguez-Fernández et al. 2004) y la eyección de las moléculas no se puede producir por la evaporación de los mantos de los granos como pasa en los núcleos calientes, pero sí por choques de velocidades moderadas. Para choques tipo-C (ver Cap. 2), se produce, además de la eyección moléculas, el calentamiento del gas. Como se puede ver en la Fig. 3.10 de Kaufman & Neufeld (1996) después de un choque tipo-C de ~ 20 km s $^{-1}$ la temperatura se eleva hasta ~ 1000 K cuando la densidad es del orden de $\sim 10^5$ cm $^{-3}$ como en el CG. Después de que el choque haya pasado el gas se enfría rápidamente. Para estimar la escala de tiempo en la que el gas, que ha sufrido el choque en las regiones del CG, se enfría; se debe estudiar cómo varía la temperatura después del choque. Para esto se debe saber qué fuentes calientan y cuales enfrían el gas mediante la ecuación (Rohlfs & Wilson 2004):

$$n \frac{d\left(\frac{3}{2}\kappa T\right)}{dt} = \Gamma - \Lambda \quad [\text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1}] \quad (3.14)$$

donde n es la densidad en cm $^{-3}$, κ la constante de Boltzmann ($\kappa = 1.38 \times 10^{-16}$ erg K $^{-1}$), T la temperatura en K, Γ la tasa de calentamiento y Λ la de enfriamiento en erg cm $^{-3}$ s $^{-1}$.

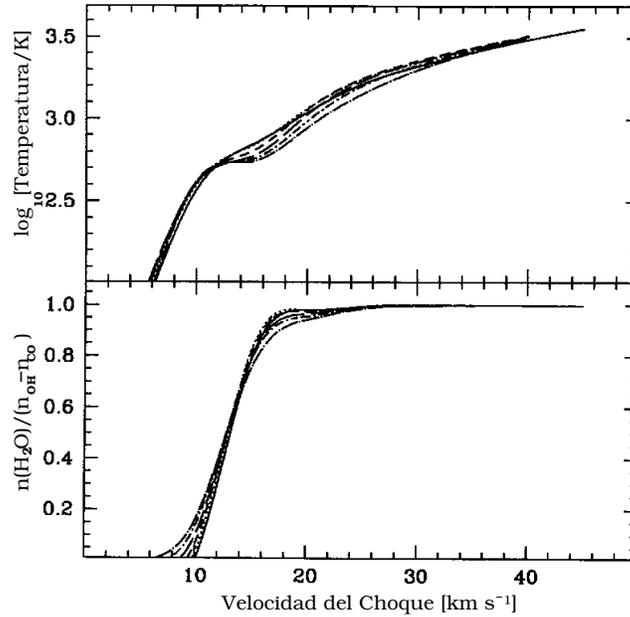


FIGURA 3.10: Temperatura que pueden alcanzar los choques tipo-C dependiendo de su velocidad para diferentes densidades de H_2 entre 10^4 – $10^{6.5} \text{ cm}^{-3}$, la variación con la densidad no va a ser muy importante. Figura adaptada de Kaufman & Neufeld (1996).

En el CG las moléculas que enfrían el gas más eficazmente son el CO y el H_2 . La tasa de enfriamiento del CO viene dada por (Genzel et al. 1991):

$$\Lambda(CO) = 10^{-24} \left(\frac{T}{10K} \right)^{2.75} \left(\frac{n(H_2)}{10^3 \text{ cm}^{-3}} \right)^{0.3} \left(\frac{\Delta v / \Delta l}{1 \text{ kms}^{-1} / \text{pc}} \right) \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}] \quad (3.15)$$

y para el H_2 (Shull & Hollenbach 1978) por:

$$\Lambda(H_2) = 1.4 \times 10^{-35} T^{4.74} n(H_2) \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}] \quad (3.16)$$

Otro factor que se debe que tener en cuenta es que los granos no están termalizados y su temperatura es menor que la del gas. Debido a esto existirá un enfriamiento por colisiones gas-grano. En general T_k es mayor que la temperatura de los granos y habrá una tasa de enfriamiento, cuando la temperatura del gas sea menor que la de los granos se convierte en tasa de calentamiento. Esta tasa de enfriamiento/calentamiento es, según Lis & Goldsmith (1990):

$$\Lambda(\text{grano} - \text{gas}) = 2 \times 10^{-33} T_k^{0.5} (T_{\text{grano}} - T_k) n(H_2)^2 \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}] \quad (3.17)$$

Usando esta tasa de enfriamiento se observa que el gas se enfriará eficientemente, llegando a temperaturas de decenas de grados Kelvin en unos 2×10^4 años (ver panel izquierdo de la Fig. 3.11). Esta temperatura no es la observada en las nubes moleculares que se están estudiando, que puede ser $\sim 100 \text{ K}$.

Las anchuras de las líneas espectrales que se observan en el CG muestran la existencia de “turbulencia”, con velocidades $\sim 15 \text{ km s}^{-1}$. Esta turbulencia introducirá en la Ec. 3.14 un calentamiento adicional que es muy eficiente en el CG (Rodríguez-Fernández et al. 2001a).

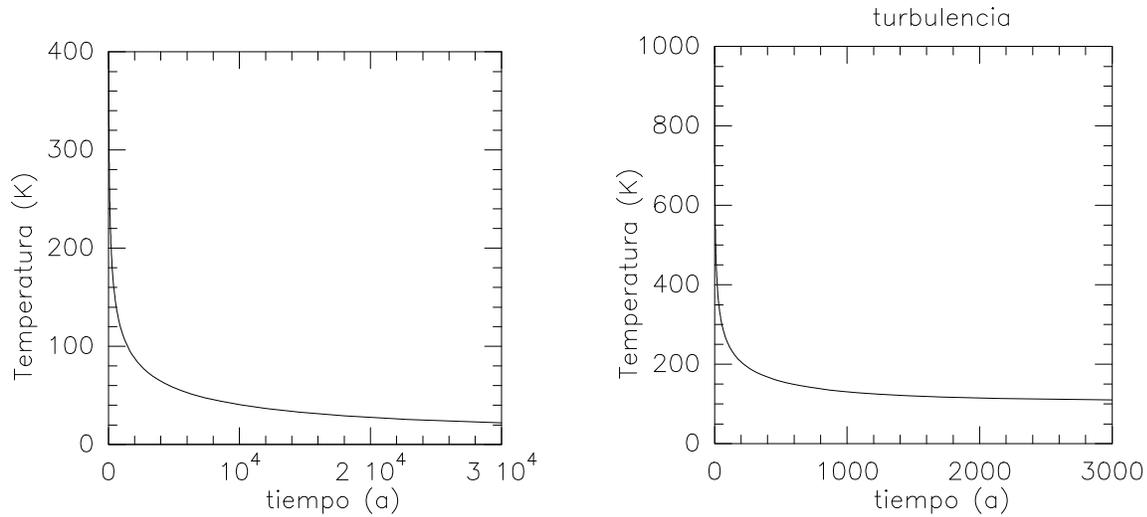


FIGURA 3.11: *Enfriamiento tras un choque tipo-C a 15 km s^{-1} en un medio con densidades de 10^5 cm^{-3} . En la figura de la izquierda no se introduce el calentamiento debido a la turbulencia, mientras que en la figura de la derecha sí.*

Black (1987) obtiene una tasa de calentamiento por turbulencia que viene dado por:

$$\Gamma = 3.5 \times 10^{-28} V_t^3 n(\text{H}_2) (1 \text{ pc}/l) \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}] \quad (3.18)$$

siendo V_t la escala de velocidad de la turbulencia, $\sim 15 \text{ km s}^{-1}$ en el CG; $n(\text{H}_2)$ la densidad de H_2 y l la escala espacial de la turbulencia, 5 pc en el CG. Con estos valores se obtiene una tasa de calentamiento del orden de $\Gamma = 2.3 \times 10^{-21} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$. Con estas temperaturas y las tasas de enfriamiento y calentamiento usadas en el CG se obtiene que en escalas de tiempo de $\sim 2 \times 10^3$ años el gas que sufre el choque alcanzará temperaturas de equilibrio de $\sim 100 \text{ K}$ (panel derecho de la Fig. 3.11).

En este gas templado que queda después del choque las moléculas tienden a pegarse a los granos con una probabilidad dada por:

$$P = \sigma_g n_g V(a) k_s \quad [\text{s}^{-1}] \quad (3.19)$$

donde σ_g es la sección eficaz del grano, n_g la densidad de granos, $V(a)$ la velocidad de interacción y k_s el coeficiente de “sticking” o de pegado.

Muchos de los parámetros de esta ecuación no son conocidos y se tienen que asumir algunas características de los granos de polvo. Para calcular al sección eficaz de colisión de los granos se ha supuesto que los granos de polvo en el CG tienen como características un radio de unas $0.1 \mu\text{m}$, y una densidad de granos en el MI de $2.6 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-3}$. Esto asumiendo que la densidad de los granos de 3 g cm^{-3} , una densidad del gas de 10^5 cm^{-3} y masa relativa gas-grano en el medio interestelar de 100 (Lis & Menten 1998).

Para calcular esta probabilidad se van a considerar diferentes casos, por ejemplo, en el caso de la velocidad, pueden existir dos casos extremos, una velocidad de $\sim 0.3 \text{ km s}^{-1}$, que corresponde a una temperatura cinética del gas molecular de $\sim 100 \text{ K}$. Y la otra velocidad de 15 km s^{-1} ($\sim 2 \times 10^5 \text{ K}$), que representaría la velocidad turbulenta que se observa en los perfiles de las líneas moleculares.

Otro de los parámetros fundamentales en esta ecuación es el coeficiente de pegado. Se han asumido coeficientes de pegado ~ 1 para las velocidades medias correspondientes a

temperaturas cinéticas de $\lesssim 200$ K, ya que las moléculas complejas serán adsorbidas con cada colisión en los granos (Tielens & Hagen 1982). El coeficiente de pegado disminuye cuando se incrementa la velocidad relativa entre los granos y las moléculas (Leitch-Devlin & Williams 1985). Buch & Zhang (1991) han estimado el coeficiente de colisión entre el H y los granos en función de la velocidad relativa:

$$k_s = \left[\frac{\kappa T}{E_0} + 1 \right]^{-2} \quad (3.20)$$

donde κ es la constante de Boltzman, T la temperatura cinética asociada a la velocidad media y E_0 es un parámetro relacionado con el potencial de adsorción atractiva. El coeficiente de pegado de H con respecto a una pequeña muestra de hielo amorfo (150 moléculas), ha sido calculado por Buch & Zhang (1991), y derivaron un valor de E_0 de ~ 100 K, mucho menor que el potencial de adsorción ~ 600 K que ellos mismos habían calculado anteriormente.

Masuda et al. (1998) ha estimado un coeficiente de pegado algo más realista entre el H y una muestra de mantos helados (miles de moléculas). Se derivaron energías de $E_0 \sim 1250$ K, cercanas al potencial de adsorción obtenido en el mismo estudio. Teniendo en cuenta que las diferencias son muy grandes, se ha hecho una extrapolación con esta expresión para moléculas complejas. Se ha usado para estimar la influencia de las enormes variaciones de velocidad de dispersión observadas en el CG en los tiempos de escala de deposición de moléculas complejas en granos.

Ahora el parámetro fundamental es la energía de adsorción de las moléculas complejas, la cual va a depender de la superficie de los granos de polvo. En principio se estudia que pasa con la molécula de CH_3OH , sobre diferentes superficies, aunque, debido a la abundancia tan grande de CH_3OH en fase gaseosa, se puede suponer que los mantos de los granos están completamente erosionados y que las superficies en las que se pegan las moléculas serán de grafitos o de silicatos desnudos. Suponiendo entonces que la molécula de CH_3OH es la que se pega al grano, la energía de adsorción entre ella y planos de carbón basáltico o grafito será de 1600 K (Aikawa et al. 1996) y sobre silicatos de 2065 K (Allen & Robinson 1977). Por completitud también se estudia qué pasa cuando existe un manto de CH_3OH helado con una energía de adsorción de 4235 K (Sandford & Allamandola 1993).

Usando la Ec. 3.20 y las energías de adsorción se ha estimado el tiempo que tarda la abundancia de CH_3OH en fase gaseosa en disminuir en dos órdenes de magnitud. El tiempo necesario para ello es de $\sim 6 \times 10^4$ años, si se suponen unas velocidades medias correspondientes a una temperatura cinética de 100 K.

Para el caso extremo en el que las velocidades medias sean parecidas a las anchuras de las líneas que se observan en el CG de hasta $\sim 15 \text{ km s}^{-1}$ ($\sim 2 \times 10^5$ K), el coeficiente de pegado decrece dramáticamente y el tiempo en el que las moléculas se pegan a los granos (en la misma proporción que antes) es de $\sim 4 \times 10^6$ años en CH_3OH helado y $\sim 2 \times 10^7$ años sobre silicatos y grafito. Se verá en la siguiente sección que se pueden encontrar con velocidades intermedias del orden de $2\text{--}4 \text{ km s}^{-1}$ lo que supone unos coeficientes de pegado intermedios y unas escalas de tiempo de pegado de CH_3OH $\sim 10^5$ años sobre silicatos y grafitos. Escalas de tiempo similares se obtienen para la deposición de las moléculas de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 y $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, que tiene energías de adsorción ~ 3000 K sobre silicatos (Allen & Robinson 1977).

Escalas de tiempo de deposición cortas, como las que se esperan en el CG, requerirán un mecanismo que continuamente eyecte las moléculas de los mantos de los granos, para así

poder ver las grandes abundancias de moléculas complejas en fase gaseosa.

Origen de los choques en el CG

Rodríguez-Fernández et al. (2001a, 2004) estudiaron los posibles mecanismos de calentamiento y la química del gas en el CG. La turbulencia y choques de velocidades pequeñas son los mecanismos que pueden dar lugar más fácilmente a las velocidades de dispersión que se observan en el CG. Observaciones de gran resolución angular de la envoltura de Sgr B2 indican que el gas molecular templado es muy turbulento, con anchuras de líneas $\sim 4 \text{ km s}^{-1}$ (Martín-Pintado et al. 1999). Smith et al. (2000) muestran en su estudio sobre la turbulencia MHD, que esta puede crear en el gas un gran número de choques con un amplio rango de velocidades, pero la mayoría de los choques tendría velocidades con números de Mach entre 2–4. En el CG la velocidad del sonido es de $\sim 1 \text{ km s}^{-1}$ (a 100 K), con lo que el mayor número de choques que se van a producir debido a la turbulencia tendrán velocidades de entre 2 y 4 km s^{-1} , de acuerdo con las anchuras de las líneas que se observaban con gran resolución angular. Como veíamos en la sección anterior, para este rango de velocidades la deposición en granos de las moléculas va a originar una disminución de las abundancias en fase gaseosa de dos órdenes de magnitud en unos $\sim 10^5$ años.

Sin embargo, la turbulencia se disipa rápidamente y se necesita una fuente nueva energía que la mantenga. Por ello es interesante comparar los tiempos de deposición de la moléculas en fase gaseosa sobre los granos de polvo con los tiempos de decaimiento de la turbulencia, para ver si ésta puede contrarrestar la deposición rápida de las moléculas. La energía de la turbulencia decae como $t^{-\alpha}$, donde $\alpha \sim 0.8-1.0$ (Mac Low et al. 1998, Stone et al. 1998). La escala de tiempo de decaimiento de esta turbulencia será similar a tiempo dinámico, que se expresa como $t_{dyn} = L/\sigma_v$ (tanto para turbulencia HD como para MHD), donde L es la longitud de la turbulencia y σ_v la velocidad de ésta (Avila-Reese & Vázquez-Semadeni 2001, Elmegreen & Scalo 2004). El tiempo dinámico de la turbulencia, asumiendo una longitud de la turbulencia de 5 pc y una velocidad de la turbulencia de 15 km s^{-1} (como se observa en la anchura de las líneas), es entonces $\sim 3 \times 10^5$ años, muy similar al tiempo que tardan grandes abundancias de las moléculas en depositarse en los granos. Debido a que no se observan grandes disminuciones en la abundancias en nuestra muestra, es necesaria la existencia de choque más rápidos, con energía suficiente para producir el erosionado de los mantos de los granos, con escalas de tiempos similares o más pequeñas que las de deposición, $\sim 10^5$ años. Estos choques deben de tener velocidades $\gtrsim 6 \text{ km s}^{-1}$ para poder arrancar moléculas de los mantos helados de los granos de silicatos y grafitos mediante átomos pesados (Draine & Salpeter 1979). Entonces, si es debido a un evento repentino, la abundancia generada por éste, podría explicar la presencia de MOCs al menos durante los $\sim 10^5$ años que se calcularon anteriormente.

Aún no es posible saber qué genera la turbulencia supersónica y/o los choques frecuentes en el CG. Los choques de velocidad grandes y la presencia de un medio altamente turbulento en el CG pueden estar producidos por: a) la cinemática del gas afectado por el potencial barrado de nuestra Galaxia, b) por la burbujas en expansión producidas por vientos de estrellas evolucionadas o por restos de supernovas, o c) por colisiones entre nubes moleculares.

TABLA 3.7: ESCALAS DE TIEMPO

Proceso	Característica	Tiempo (años)
Evolución química	máximo de abundancia	1.4×10^5
Enfriamiento de 1 choque	temperatura final 10 K	2×10^4
Enfriamiento con turbulencia	temperatura final 100 K	2×10^3
Pegado en granos	$V_{choques} = 2-4 \text{ km s}^{-1}$, $X/X_0 = 10^2$	$\sim 10^5$
Decaimiento de la turbulencia		$\sim 3 \times 10^5$
Dinámica galáctica	una órbita x_2	10^7

NOTA- Escalas de tiempo de diferentes procesos que tienen lugar en las nubes del CG, $T_k = 100 \text{ K}$ y $n(\text{H}_2) = 10^5 \text{ cm}^{-3}$.

Las escalas de tiempos necesarias para mantener las grandes abundancias de MOCs en el CG son mucho más pequeñas que las asociadas con las órbitas cuasi-circulares de la Galaxia, donde los periodos típicos son $\sim 1 \times 10^7$ años. En la Tab. 3.7 se puede ver una comparación de las escalas de tiempo que se han obtenido. Sería necesaria la existencia de un gran número de choques a gran escala en cada órbita para explicar las abundancias observadas de las MOCs. Otro posible mecanismo que puede generar la turbulencia son las colisiones entre nubes o eventos energéticos producidos por estrellas masivas, si estas se producen en escalas de tiempos menores de 10^5 años. En el escenario de una formación estelar reciente en el CG, como se propone para explicar las líneas de estructura fina del gas ionizado (Rodríguez-Fernández et al. 2005), se espera que se produzcan eventos energéticos frecuentes, que pueden explicar los choque de velocidades moderadas ($\sim 10 \text{ km s}^{-1}$, Martín-Pintado et al. 1999), eyectando las moléculas complejas al gas y una gran cantidad de energía al MI.

Las escalas de tiempo en las que las moléculas se pegan a los granos entran en conflicto con las escalas de tiempo que se proponen en los modelos de fase gaseosa para la formación de estas moléculas complejas, antes de que se pueda producir una abundancia apreciable de la moléculas hijas (en el caso de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$) ya se habrán pegado a los granos tanto el CH_3OH como el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$. Es necesaria la existencia de choques frecuentes cada $\lesssim 10^5$ años para que las abundancias de las moléculas se mantengan relativamente constantes.

Las abundancias tan grandes de MOCs que se observan requieren la existencia de choques frecuentes en el CG que permitan compensar la adsorción de moléculas complejas sobre los granos. Tras un choque se eyectan moléculas complejas de los granos de polvo y tras un primer procesado en fase gaseosa se pegarán a los granos. Su posterior eyección de los mantos mediante otros choques explicará la presencia de moléculas complejas y también podrá explicar las abundancias relativas tan parecidas que se encuentran en las nubes del CG si las moléculas se eyectan con abundancias relativas similares desde los granos de polvo. Estas abundancias mostrarán la composición de los mantos de los granos que se encuentran en las regiones del CG. Este proceso no es viable en los núcleos calientes debido a que las grandes temperaturas de los granos impedirán el retorno de las moléculas a los granos después de la evaporación. Quizás las MOCs se formaron mediante procesos similares en una fase previa a la de núcleo caliente o mediante reacciones sobre los granos de dichas moléculas, que aún no se conocen bien y que podrían explicar las similitudes en las abundancias relativas encontradas tanto en los núcleos calientes como en las regiones del CG.

La química que se ha propuesto hasta ahora para las MOCs no explican las razones de abundancias tan similares que se observan en el CG y en los núcleos calientes. Por consiguiente, teniendo en cuenta lo que se ha obtenido a partir de los datos moleculares, la explicación más probable para las grandes abundancias de CH_3OH , HCOOH , HCOOCH_3 , $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, es que todas esas moléculas han sido eyectadas de los granos de polvo. En este escenario, la composición química de los mantos helados de los granos de regiones tan diferentes como el CG o los núcleos calientes presentan unas abundancias relativas muy similares en MOCs.

3.6.2 Regiones con abundancias pequeñas de MOCs

Entre las regiones observadas, la nube molecular de la Hoz (MC G+0.18+0.04 y MC G+0.20+0.03) y los ATR (la componente en velocidad a -30 km s^{-1} de MC G+0.13+0.02) presentan abundancias de $\text{CH}_3\text{OH} \sim 10^{-7}$, pero sólo se observan límites superiores a la abundancia de las otras moléculas. En particular $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ presenta unos límites superiores muy pequeños ($\lesssim 0.4-5 \times 10^{-9}$). Lo que significa una razón $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$ que es un factor 6 menor que la que se observa normalmente en las otras fuentes del CG. Para el resto de moléculas los límites encontrados son pequeños pero no se consideran significativos al ser similares a los que en se encuentran en el resto de las fuentes. La química en estas tres fuentes puede estar influenciada por la presencia de un campo de radiación UV intenso. Las estrellas masivas evolucionadas de los cúmulos del Quintuplete y de los Arcos pueden explicar el calentamiento e ionización que se puede observar tanto en la Hoz como en los ATR (Rodríguez-Fernández et al. 2001b). Una posible explicación de las abundancias menores de MOCs observadas en estas regiones del CG es que éstas hayan sido eyectadas de los mantos de los granos con las abundancias que actualmente se observan en el resto de las nubes moleculares del CG. A continuación, debido a la gran densidad de fotones UV que se pueden encontrar tanto en La Hoz como en los ATR, las abundancias de las MOCs se verán seriamente afectadas por la foto-disociación y la foto-ionización. En la Tab. 3.8 se muestran las tasas de foto-disociación y foto-ionización para algunas de las moléculas que se han observado, obtenidos de la base de datos UMIST udfa⁰⁶ (Woodall et al. 2007) y la de Ohio State University osu.2003 (www.physics.ohio-state.edu/~eric/research.html). El HCOOCH_3 no tiene tasas de foto-disociación medidas, pero para el resto de las moléculas se puede comprobar que la destrucción de las moléculas $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ y $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ es más rápida que la de CH_3OH , HCOOH y H_2CO . Se puede calcular la variación de la densidad de las diferentes moléculas a partir de las velocidades de las reacciones con fotones mediante la ecuación:

$$-\frac{dn_x}{dt} = n_x G_0 \kappa \quad [\text{moléculas s}^{-1} \text{ cm}^{-3}] \quad (3.21)$$

Donde n_x es la abundancia, G_0 el campo de radiación (el campo de radiación local del MI es 1) y κ es la velocidad de la reacción con fotones. Integrando esta ecuación se obtiene que:

$$\frac{n_x}{n_{x0}} = e^{-\kappa G_0 t} \quad (3.22)$$

Donde n_{x0} es la abundancia inicial y t el tiempo transcurrido desde el comienzo de las reacciones con fotones. En la Fig. 3.12 se aprecia cómo varían las abundancias de CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, HCOOH y H_2CO por el efecto de los procesos de foto-disociación para

TABLA 3.8: TASAS O VELOCIDADES DE LOS PROCESOS CON FOTONES

Reacción	κ (s ⁻¹)
$(\text{CH}_3)_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{CH}_4$	$1.5 \times 10^{-9} e^{-1.6A_v}$
$(\text{CH}_3)_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_3^+ + e^-$	$4.6 \times 10^{-10} e^{-2.3A_v}$
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{OH}$	$2.9 \times 10^{-09} e^{-1.7A_v}$
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}^+ + e^-$	$1.0 \times 10^{-09} e^{-2.4A_v}$
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$1.4 \times 10^{-09} e^{-1.73A_v}$
$\text{HCOOH} + h\nu \rightarrow \text{HCO} + \text{OH}$	$4.1 \times 10^{-10} e^{-1.6A_v}$
$\text{HCOOH} + h\nu \rightarrow \text{HCOOH}^+ + e^-$	$2.6 \times 10^{-10} e^{-2.6A_v}$
$\text{CH}_3\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}^+ + e^-$	$1.3 \times 10^{-10} e^{-2.6A_v}$
$\text{CH}_3\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + \text{H} + e^-$	$1.3 \times 10^{-10} e^{-2.6A_v}$
$\text{CH}_3\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{OH} + \text{CH}_3$	$6.0 \times 10^{-10} e^{-1.8A_v}$
$\text{CH}_3\text{OH} + h\nu \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2$	$6.0 \times 10^{-10} e^{-1.8A_v}$
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^+ + e^-$	$4.7 \times 10^{-10} e^{-2.8A_v}$
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{H}$	$7.0 \times 10^{-10} e^{-1.7A_v}$
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$	$7.0 \times 10^{-10} e^{-1.7A_v}$
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H} + e^-$	$1.4 \times 10^{-11} e^{-3.1A_v}$

NOTA- Tasas de foto-disociación y de foto-ionización de las MOCs de las bases de datos *udfa*⁰⁶ y *osu.2003*. A_v es la extinción visual en la zona donde se produce la reacción. Las velocidades de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ son claramente más rápidas que las de CH_3OH .

diferentes A_v . Estos modelos simples consideran un campo de radiación ultravioleta incidente 10^3 veces mayor que el del MI local ($G_0=10^3$), que es el típico que se observa en las regiones de foto-disociación del CG (Rodríguez-Fernández et al. 2004). En el panel inferior se presentan las razones $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$, $(\text{CH}_3)_2\text{O}/\text{CH}_3\text{OH}$, $\text{HCOOH}/\text{CH}_3\text{OH}$, $\text{H}_2\text{CO}/\text{CH}_3\text{OH}$ para las mismas extinciones visuales. A medida que aumenta el valor de A_v uno se adentraría en las zonas más protegidas de la nube a la que no llegan de forma tan eficiente los fotones. Las abundancias iniciales que se han utilizado son los que se derivan de las abundancias relativas con respecto a la de CH_3OH típicas de las nubes del CG, suponiendo un valor medio de la abundancia de CH_3OH de 5×10^{-7} . Por tanto las abundancias iniciales del resto de las moléculas serán de 5.5×10^{-7} para H_2CO , 3.9×10^{-9} para HCOOH , 1.8×10^{-8} para $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y 1.9×10^{-8} para $(\text{CH}_3)_2\text{O}$. Como se puede apreciar en la figura, en las regiones con extinciones pequeñas, $A_v=5$, las moléculas se destruyen rápidamente excepto HCOOH que posee velocidades de reacción con fotones más lentas. En una región con $A_v=8$ la abundancia de CH_3OH se mantiene por encima de 10^{-9} después de 10^5 años siendo destruidas el resto de las moléculas rápidamente, salvo HCOOH . Para $A_v=10$ se aprecia como las abundancias varían más lentamente en comparación con A_v menores. En el panel inferior de la Fig. 3.12 de las razones de abundancias se ve que varían rápidamente para $A_v=5$, en menos de 1000 años ya habrían disminuido muchísimo las abundancias relativas. Para $A_v=10$ las escalas de tiempo para la destrucción de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ son 3000 veces mayores que para $A_v=5$. Para las regiones de La Hoz y los Arcos, con densidades de columna de H_2 que varían entre 4×10^{21} y $1.7 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, se encuentran extinciones visuales entre $A_v \sim 4-17$ magnitudes, ya que para la conversión de la extinción visual a partir de de la densidad de columna existe un factor de conversión de la forma $N(\text{H}_2)/10^{21}$ (Bohlin 1975). En el caso de $A_v \gtrsim 10$ las abundancias

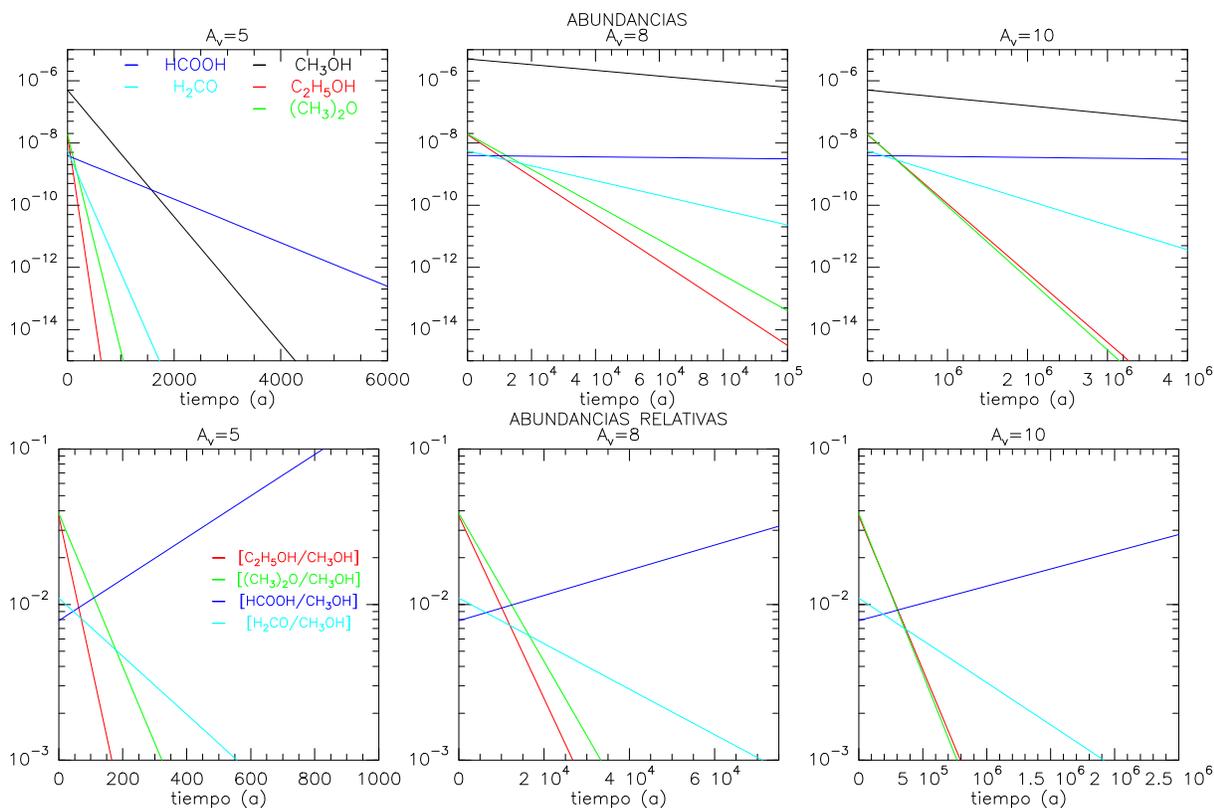


FIGURA 3.12: Abundancias y razones de abundancias de las MOCs con respecto a CH_3OH en regiones de foto-disociación.

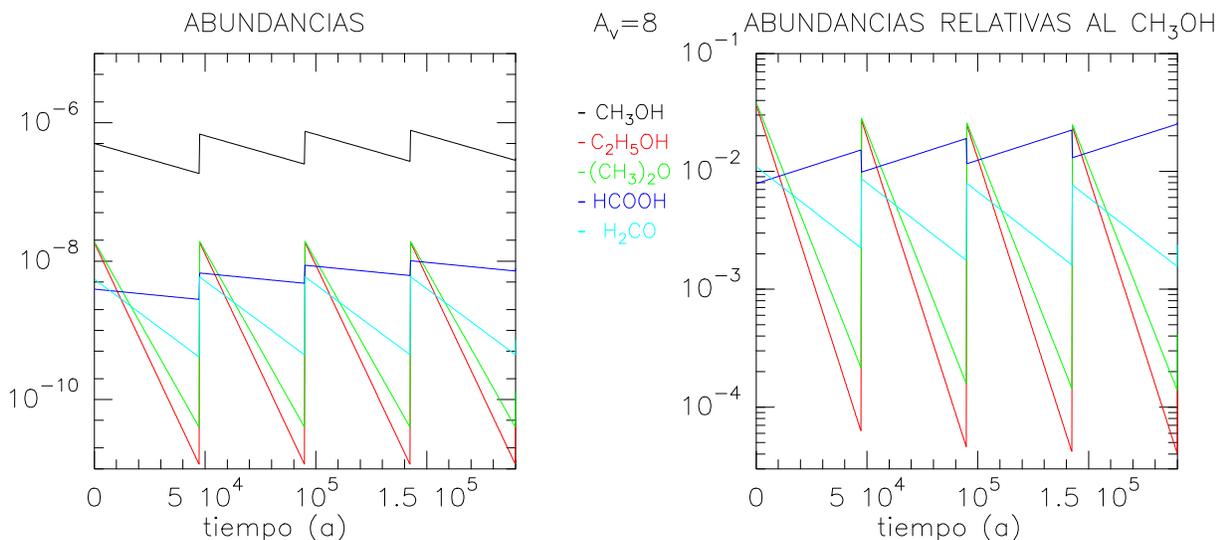


FIGURA 3.13: Abundancias y razones de abundancias de las MOCs en PDRs con $A_v=4$ con presencia de choques frecuentes cada 4.5×10^4 años.

variarán más lentamente, pero para extinciones menores, las abundancias disminuirían muy rápidamente. En todo caso, para las $A_v < 10$ magnitudes las escalas de tiempo de foto-disociación son menores o iguales que los tiempos de pegado, con lo cual es estas regiones, como en el resto de las nubes moleculares del CG, existirán choques, pero deben de ser más frecuentes de lo que se suponía anteriormente, para poder ver una abundancia de CH_3OH

tan grande como la que se observa. Estos choques producirían la eyección a fase gaseosa de nuevas las MOCs, que aún se mantienen en los mantos de los granos y las que se han ido pegando antes de foto-disociarse, manteniendo las abundancias elevadas durante un periodo más prolongado de tiempo. Este efecto se evidencia en la Fig. 3.13, en la que se presenta un modelo simple de variación de las abundancias en presencia de foto-disociación, donde se han introducido choques frecuentes cada 4.5×10^4 años, que elevan las abundancias a sus valores iniciales. Para una región de $A_v=8$ la presencia de choques puede producir abundancias de CH_3OH relativamente constantes y aún así la abundancia de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ caería después de cada choque rápidamente.

Por lo tanto los procesos con fotones podrían explicar las abundancias menores de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y de otras moléculas con respecto a CH_3OH en las regiones de los ATR y de La Hoz que tuviesen A_v pequeñas. Únicamente con los límites superiores a la abundancia no se puede hacer un estudio exhaustivo en estas regiones: será necesario medir las abundancias de las MOCs para poder establecer si los choques y las reacciones con fotones realmente juegan un papel tan importante en la química de los alcoholes en estas regiones, tal y como parecen indicar sus límites.

3.7 Conclusiones del capítulo

- Las abundancias de MOCs en diferentes regiones del CG son elevadas, a veces mayores a las de núcleos calientes de estrellas masivas. Variando entre 1.1×10^{-6} a 2.4×10^{-8} para CH_3OH ; entre $\leq 4 \times 10^{-10}$ a 6×10^{-8} para $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$; desde $\leq 2.0 \times 10^{-9}$ a 5.6×10^{-8} para $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, desde $\leq 3.0 \times 10^{-9}$ a 7.5×10^{-8} para HCOOCH_3 ; entre $\leq 3.0 \times 10^{-10}$ y 4.1×10^{-9} para HCOOH y desde $\leq 7.0 \times 10^{-10}$ a 19.5×10^{-9} para H_2CO . Para CH_3COOH sólo se han obtenido límites superiores a su abundancia.
- Las razones de abundancia entre las diferentes moléculas y el CH_3OH en las regiones del CG son constantes en un factor 4–8. Además estas razones son similares a las de los núcleos calientes relacionados con estrellas masivas y con estrellas poco masivas con la excepción del CH_3OH , que presenta abundancias menores en los núcleos calientes de estrellas poco masivas.
- Los datos no presentan la evolución temporal en sus abundancias relativas a la de CH_3OH que predicen los modelos de química en fase gaseosa realizados para los núcleos calientes. El comportamiento de las moléculas que se forman en los granos de polvo y $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, que se puede formar en fase gaseosa, es muy similar. Por ello se propone que todas las MOCs que se han observado en fase gaseosa se forman en los mantos de los granos.
- En el CG el paso de las moléculas desde los mantos de los granos hasta la fase gaseosa no se produce por evaporación, ya que la temperatura de los granos es pequeña (~ 15 K), sino por choques frecuentes que rompen los mantos de los granos.
- Después de los choques el gas se enfría rápidamente, y las moléculas se comienzan a pegar a los granos de polvo. Las escalas de tiempo de enfriamiento del gas y de pegado de la moléculas en los granos en las regiones del CG son de $\sim 10^3$ años y de $\sim 10^5$ años respectivamente.

- Los choques deben por tanto producirse en el CG en escalas de tiempo de $\sim 10^5$ años para que las abundancias de las MOCs en fase gaseosa se mantengan constantes.
- Las abundancias de las MOCs obtenidas nos dan información de la composición promediada de los mantos de los granos en estas regiones. Las similitudes entre las abundancias relativas entre las MOCs en todas las regiones del CG, así como en los núcleos calientes nos llevan a pensar en la existencia de una composición “Universal” de los mantos de los granos. En los núcleos calientes relacionados con formación de estrellas poco masivas continúan las similitudes de las abundancias relativas observadas entre objetos, pero en este caso, si hay variaciones importantes con respecto a las abundancias observadas en el CG y en núcleos calientes relacionados con formación estelar masiva. Si estas abundancias son eyectadas directamente de los mantos de los granos, parece que las reacciones químicas que se producen en los mantos de los granos se ven afectadas de alguna forma por la masa de la estrella que se va a formar.
- La Hoz y los ATR presentan una química diferente para estas moléculas complejas. Estas zonas son regiones de foto-disociación en la que las MOCs son destruidas por los fotones UV emitidos por el cúmulo del Quintuplete y de los Arcos respectivamente. C_2H_5OH se destruye mas rápidamente que el CH_3OH explicando la diferencia en la abundancia relativa en estas regiones. Un modelo simple sugiere que la existencia de choques frecuentes en estas regiones podrá explicar las grandes abundancias de CH_3OH respecto a las de C_2H_5OH , que se destruyen rápidamente después de cada choque en regiones con A_v pequeñas.

Capítulo 4

En la búsqueda de los primeros estadios de la química de choques. L1448 y L183.

4.1 Introducción

Como se ha visto en el capítulo anterior, se han observado grandes abundancias de las MOCs como CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 , HCOOH y H_2CO en el MI; asociadas en su mayoría con la química de los granos de polvo (Charnley et al. 1995; Horn et al. 2004) en núcleos moleculares calientes, donde se está produciendo una formación de estrellas masivas (Ikeda et al. 2001; Bisschop et al. 2007) o poco masivas (Bottinelli et al. 2007), y en las nubes moleculares afectadas por choques en las regiones del CG (Martín-Pintado et al. 1999, Cap. 3). La comparación entre las abundancias de estas moléculas en dichas fuentes ha demostrado que su química en las nubes moleculares del CG y en los núcleos calientes es muy similar, lo cual podría implicar la existencia de una composición “Universal” de los mantos de los granos. La evaporación o eyección de dichos mantos aumentan las abundancias de las MOCs en fase gaseosa. Sin embargo, en los núcleos calientes de proto-estrellas poco masivas, se observa que las abundancias relativas de las MOCs son diferentes a las observadas en núcleos calientes de proto-estrellas masivas y en nubes moleculares del CG (Cap. 3, Bottinelli et al. 2007). Esto puede ser debido a que, o bien la composición de los granos de polvo en las nubes oscuras es diferente para la formación de núcleos calientes de estrellas poco masivas con respecto a las de proto-estrellas masivas; o los procesos de formación estelar cambian localmente las abundancias en la zona más interna del núcleo caliente poco masivo (Garrod & Herbst 2006), pudiendo ser entonces, las abundancias relativas de las MOCs en los mantos, similares entre si.

Se considera que las nubes oscuras que se observan hoy en día son los precursores de estrellas poco masivas, y que por consiguiente, se formará un núcleo molecular caliente poco masivo en su interior. En nubes oscuras, sin signos de formación estelar, las abundancias de moléculas orgánicas en fase gaseosa no deberían estar influenciadas por la evaporación/eyección de los mantos de los granos de polvo, por lo que deberían reflejar las abundancias producidas por la química en fase gaseosa (Irvine et al. 1987; Hasegawa & Herbst 1993a, 1993b). Además, la observación de moléculas en fase sólida sobre los granos de polvo

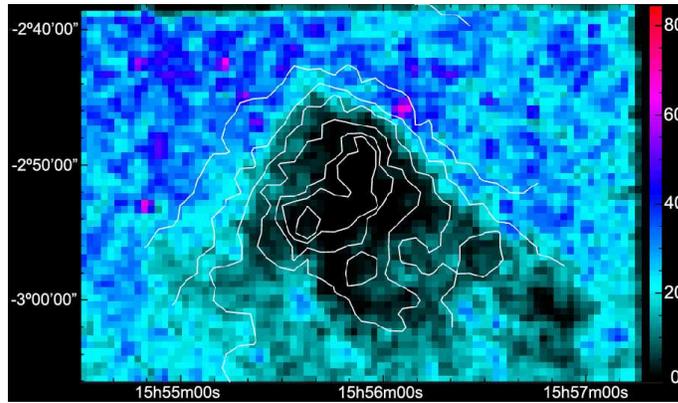


FIGURA 4.1: Imagen que muestra el conteo de estrellas en la región de L183 en la banda I. Y superpuesto los contornos de Isophot a $200\mu\text{m}$. En las zonas más internas de la nube molecular no se observa ninguna estrella. Referencia de Pagani et al. (2005).

en nubes oscuras ha demostrado la existencia de MOCs como el HCOOH en estos mantos (Knez et al. 2005). Nubes oscuras que presenten flujos de materia jóvenes provenientes de proto-estrellas que generan choques, deberían poder mostrar la composición de los mantos recién inyectadas a la fase gaseosa, debido a que el choque es muy joven. Por consiguiente, las nubes oscuras ofrecen la oportunidad única de estudiar la química de los MOCs en el MI.

En este capítulo se van a presentar observaciones de MOCs en nubes oscuras con formación estelar reciente que se manifiesta por medio de la eyección de materia generando choques que eyectan a la fase gaseosa los mantos helado sde los granos.

4.2 Fuentes

Para este estudio se han escogido dos nubes moleculares. Una de ellas es L183, que es una nube molecular oscura situada a unos 150 pc del Sol, con temperaturas cinéticas del gas de unos 12 K y densidades entorno a $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ (Swade 1989). En su interior no hay signos de actividad de formación estelar, y presenta una química rica en oxígeno dominada por reacciones en fase gaseosa (Pagani et al. 2005). En la Fig. 4.1 se puede observar el mapa del conteo de estrellas de la región. En el interior de la nube el número de estrellas es cero (Pagani et al. 2005). En L183 se ha observado anteriormente CH_3OH , con densidades de columna del orden de 10^{13} cm^{-2} lo que implica abundancias de algunos 10^{-9} . Además se ha derivado un límite superior para la densidad de columna de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (Friberg et al. 1988). Estas densidades de columna ofrecen unos límites superiores en las abundancias relativas entre ellas que concuerdan con las observadas para las nubes moleculares del CG y núcleos calientes.

La otra nube molecular es L1448, a una distancia de unos 300 pc del Sol, se encuentra en el complejo molecular de Perseo, a 1° , al suroeste de la región de formación estelar de NGC1333. Posee una masa total de unas $50M_\odot$, temperaturas de 12–14 K y densidades de $n(\text{H}_2) \sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$. Esta nube oscura contiene un flujo bipolar extremadamente joven de unos ~ 3500 años, L1448–mm, y se puede ver en la Fig. 4.2. En esta figura se observa un mapa

de la emisión molecular de CO en la transición $J=2\rightarrow 1$ (Bachiller et al. 1990). En este objeto se han observado tres componentes de velocidad asociadas a la emisión molecular, según Jiménez-Serra et al. (2004, 2006). Una correspondiente a la componente del gas ambiente (4.7 km s^{-1}); otra a un precursor magnético de los choques de tipo-C (5.2 km s^{-1}); y la última, asociada al gas procesado por el choque, con una ala ancha en velocidad. El aumento de las abundancias de las moléculas de SiO y de CH₃OH en el precursor magnético sugiere que esas moléculas han sido eyectadas recientemente de los granos de polvo tras haber experimentado una leve interacción con el precursor y con una contribución muy pequeña del procesado post-choque.

4.3 Observaciones

Las observaciones de las líneas moleculares que se presentan en la Tab. 4.1 fueron realizadas en L183 y en dos posiciones en el flujo bipolar L1448–mm y se obtuvieron con el telescopio IRAM 30m. Los datos se obtuvieron en dos sesiones diferentes en el año 2005, con haces del telescopio de tamaños $\sim 24''$, $17''$ y $12''$ para las bandas de 3, 2 y 1.3 mm, respectivamente.

Los receptores, equipados con mezcladores SIS, fueron sintonizados en banda lateral única, con una atenuación en la banda imagen $\gtrsim 10 \text{ dB}$. Para las observaciones de L1448–mm se usaron los modos de conmutación de frecuencia y del secundario, con saltos en frecuencia y posición de 7.2 MHz y $240''$, respectivamente. Los autocorreladores proporcionaron una resolución espectral de $\sim 40 \text{ kHz}$, lo que corresponde a una resolución de velocidades ~ 0.14 , 0.08 , y 0.05 km s^{-1} a 3, 2 y 1.3 mm, respectivamente. Para L183 se usó la misma configuración que para L1448–mm para las líneas de las bandas de 2 y 3 mm, pero con una resolución espectral de 80 kHz para la banda de 1.3 mm (una resolución en velocidad de 0.09 km s^{-1}). Las temperaturas de sistema fueron $\sim 100\text{--}650 \text{ K}$, y el espectro fue calibrado utilizando el sistema de carga fría y caliente estándar. Las intensidades de las líneas se presentan en unidades de T_A^* .

4.4 Resultados

Los espectros observados se muestran en la Fig. 4.3. En el panel izquierdo se presentan las líneas observadas en L183 y, en el central y el derecho, las líneas observadas en L1448 ($0'', -20''$) y ($-30'', +74''$), respectivamente. Las líneas verticales muestran las velocidades en las que se encuentra el gas en reposo de L183, a 2.5 km s^{-1} ; las componentes de gas en reposo y del precursor en L1448 ($0'', -20''$), a 4.8 y $5.2\text{--}5.5 \text{ km s}^{-1}$. La emisión molecular en la posición ($-30'', +74''$) del flujo bipolar L1448–mm está centrada en 4.6 km s^{-1} , por lo que en esta posición las componentes del precursor (como se ve en la emisión delgada de SiO) y del gas en reposo son coincidentes. En la posición de L1448 ($0'', -20''$) se han detectado alas de emisión desplazadas en velocidades hacia el rojo para las líneas de 2 mm de CH₃OH y de 3 mm de SiO, indicando que están asociadas al gas afectado por el choque. Las alas de gran velocidad para las transiciones de 1.3 mm del CH₃OH no se pueden distinguir del ruido, debido a la dificultad de reducción de las líneas de base en las observaciones realizadas con

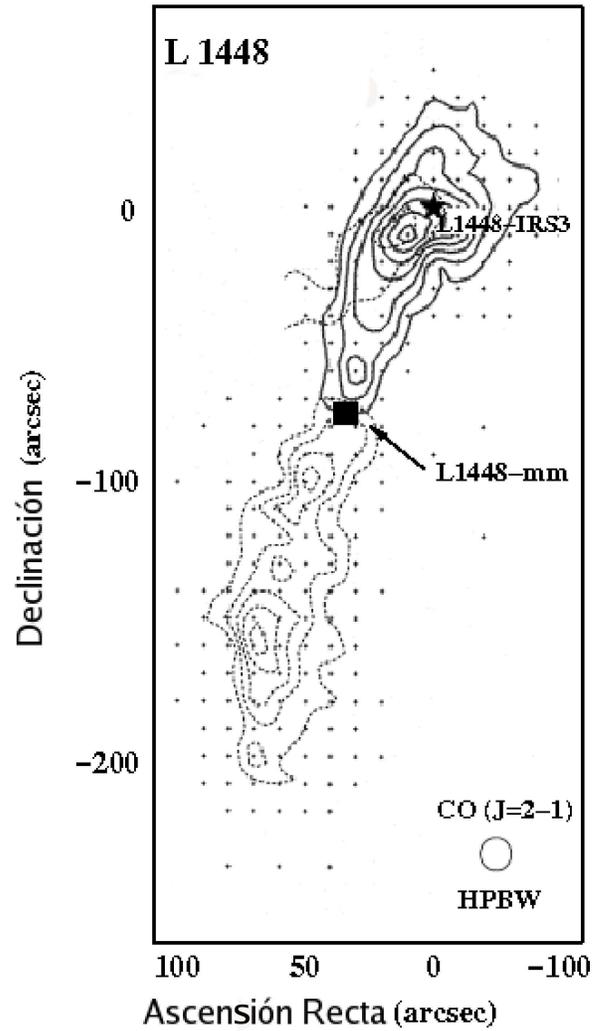


FIGURA 4.2: Distribución del CO ($J=2 \rightarrow 1$) en la nube molecular L1448. En esta figura se puede observar el flujo bipolar L1448-mm. Figura adaptada de Bachiller et al. (1990).

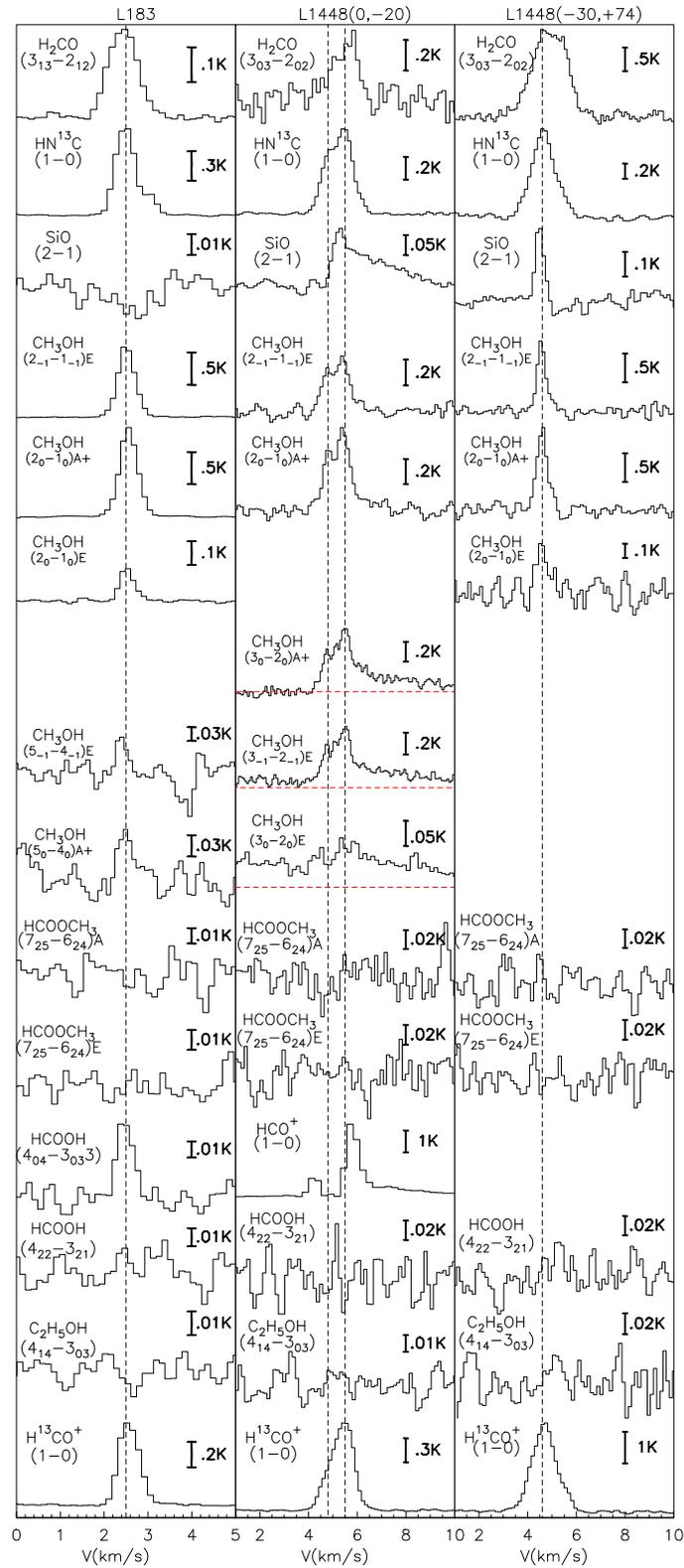


FIGURA 4.3: Perfiles de las líneas moleculares observadas en L183 y L1448. Las líneas discontinuas muestran las velocidades de cada componente del gas en las diferentes etapas del choque. L183 (panel izquierdo) muestra solamente una componente centrada a 2.5 km s^{-1} . Los perfiles para L1448 ($0', -20''$) (panel central) y para L1448 ($-30', +74''$) (panel derecho) muestran componentes en velocidad que corresponden a la nube ambiente a 4.8 km s^{-1} y 4.6 km s^{-1} , respectivamente. La posición L1448 ($0', -20''$) muestra también una componente adicional a 5.5 km s^{-1} que corresponde al precursor magnético y, a velocidades mayores, la emisión asociada al gas afectado por el choque (ver las transiciones a 2 mm de CH_3OH ($3_0 \rightarrow 2_0$)A+ y ($3_{-1} \rightarrow 2_{-1}$)E).

el modo de conmutación en frecuencia.

TABLA 4.1: TRANSICIONES OBSERVADAS

Molecules	Transición	frecuencia (MHz)	E_s (K)
HCO ⁺	1→0	89187.41	4.29
H ¹³ CO ⁺	1→0	86754.33	4.17
HN ¹³ C....	1→0	87090.85	4.2
C ₂ H ₅ OH....	4 _{1,4} →3 _{0,3}	90117.61	9.36
SiO.....	2→1	86846.96	6.26
HCOOCH ₃	7 _{2,5} →6 _{2,4} E	90145.69	19.69
	7 _{2,5} →6 _{2,4} A	90156.48	19.67
HCOOH.....	4 _{2,2} →3 _{2,1}	90164.63	23.53
	4 _{0,4} →3 _{0,3}	89579.17	13.57
H ₂ CO.....	3 _{1,3} →2 _{1,2}	211211.47	32.07
	3 _{0,3} →2 _{0,2}	218222.19	20.97
CH ₃ OH.....	3 ₀ →2 ₀ A+	145103.23	13.94
	3 ₋₁ →2 ₋₁ E	145097.47	19.52
	3 ₀ →2 ₀ E	145093.75	27.06
	2 ₀ →1 ₀ A+	96741.42	6.97
	2 ₋₁ →1 ₋₁ E	96739.39	12.55
	2 ₀ →1 ₀ E	96744.58	20.10
	5 ₀ →4 ₀ E	241700.22	47.95
	5 ₋₁ →4 ₋₁ E	241767.22	40.41
	5 ₀ →4 ₀ A+	241791.43	34.83

NOTA- Números cuánticos y frecuencias de las transiciones observadas que se han obtenido del catálogo molecular de Jet Propulsion Laboratory (Pickett et al. 1998). L183 se ha observado en la posición de α [J2000]=15^h54^m08^s.6, δ [J2000]=-02°52'10"00. En L1448 se han observado dos posiciones separadas (0',-20') y (-30',+74') con respecto a la posición de referencia centrada en L1448-mm (α [J2000]=03^h25^m38^s, δ [J2000]=30°33'05").

Como era de esperar en el caso de un trazador de choques, la emisión de SiO se detecta sólo en el precursor y en el gas chocado de L1448-mm, pero no en el gas en reposo de L183 y de L1448-mm. La emisión de CH₃OH se ha detectado en todas las fuentes y en todas las componentes de velocidad. El H₂CO ha sido detectado en todas las fuentes, pero en L1448-mm los perfiles de las líneas son diferentes a los de las otras moléculas. En la posición L1448 (0',-20'), la emisión de H₂CO aparece en el gas en reposo y en el precursor, al igual que ocurre con H₂S (Jiménez-Serra et al. 2005). En L1448 (-30',+74') también se encuentra un perfil ancho para la línea de H₂CO, lo que indica la presencia de gas afectado por choques. HCOOH sólo ha sido detectado en L183 y las moléculas más complejas, como C₂H₅OH y HCOOCH₃, no han sido detectadas en ninguna de las dos fuentes.

Las densidades de columna para todas las moléculas se han obtenido utilizando la aproximación ETL. Las temperaturas de excitación (T_{ex}) se han derivado mediante diagramas de poblaciones de los niveles de CH₃OH que se presentan en la Fig. 4.4 (también hay una entrada en la Tab. 4.3). Se han obtenido T_{ex} entre 5–10 K como se espera para nubes oscuras con densidades de algunos 10⁵cm⁻³ y temperaturas cinéticas de 10–20 K (Dickens et al. 2000;

TABLA 4.2: PARÁMETROS OBSERVADOS

Transición	Inten. ¹ (K)	V _{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	Inten. ¹ (K)	V _{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
	L1448 (0'', -20'') en reposo			L1448 (0'', -20'') precursor		
CH ₃ OH(2 ₀ →1 ₀)A+	0.40(2)	4.75(5)	0.4(1)	0.61(2)	5.42(5)	0.7(1)
CH ₃ OH(2 ₋₁ →1 ₋₁)E	0.28(2)	4.7(2)	0.5(3)	0.40(2)	5.4(1)	0.7(4)
CH ₃ OH(3 ₀ →2 ₀)A+	0.26(2)	4.7(2)	0.4(2)	0.46(2)	5.5(2)	0.9(2)
CH ₃ OH(3 ₋₁ →2 ₋₁)E	0.22(2)	4.69(2)	0.40(4)	0.40(2)	5.48(1)	0.65(4)
CH ₃ OH(3 ₀ →2 ₀)E	0.09(2)	4.38(6)	0.5(1)	0.13(2)	5.62(6)	1.10(5)
C ₂ H ₅ OH(4 _{1,4} →3 _{0,3})	≲0.036	≲0.036
HCOOCH ₃ (7 _{2,5} →6 _{2,4})A/E	≲0.036	≲0.036
H ¹³ CO ⁺ (1→0)	0.482(5)	4.919(5)	0.86(1)	0.819(1)	5.570(3)	0.770(6)
SiO(2→1)	≲0.011	0.146(6)	5.28(2)	0.61(6)
HN ¹³ C(1→0)	0.43(2)	4.731(3)	0.647(7)	0.73(2)	5.478(2)	0.844(5)
HCOOH(4 _{2,2} →3 _{2,1})	≲0.036	≲0.036
H ₂ CO(3 _{0,3} →2 _{0,2})	≲0.027	0.28(5)	5.05(7)	0.5(2)
	0.44(5)	5.75(5)	0.7(1)
	L1448 (-30'', +74'')			L183		
CH ₃ OH(2 ₋₁ →1 ₋₁)E	1.17(7)	4.57(3)	0.43(7)	1.10(2)	2.51(3)	0.45(8)
CH ₃ OH(2 ₀ →1 ₀)A+	1.36(9)	4.59(2)	0.54(5)	1.36(2)	2.56(3)	0.48(6)
CH ₃ OH(2 ₀ →1 ₀)E	0.33(3)	4.6(1)	0.6(3)	0.140(5)	2.5(2)	0.4(4)
CH ₃ OH(5 ₀ →4 ₀)E	≲0.03
CH ₃ OH(5 ₋₁ →4 ₋₁)E	0.082(7)	2.39(4)	0.27(8)
CH ₃ OH(5 ₀ →4 ₀)A+	0.068(6)	2.49(4)	0.35(9)
C ₂ H ₅ OH(4 _{1,4} →3 _{0,3})	≲0.048	≲0.015
HCOOCH ₃ (7 _{2,5} →6 _{2,4})A/E	≲0.048	≲0.015
H ¹³ CO ⁺ (1→0)	2.66(9)	4.68(2)	1.20(5)	0.67(2)	2.57(1)	0.54(2)
SiO(2→1)	0.31(1)	4.49(1)	0.40(3)	≲0.018
HN ¹³ C(1→0)	1.09(4)	4.646(8)	1.16(2)	0.89(7)	2.49(2)	0.56(6)
HCOOH(4 _{2,2} →3 _{2,1})	≲0.048	≲0.015
HCOOH(4 _{0,4} →3 _{0,3})	0.048(3)	2.48(3)	0.43(4)
H ₂ CO(3 _{1,3} →2 _{1,2})	0.259(7)	2.431(5)	0.77(1)
H ₂ CO(3 _{0,3} →2 _{0,2})	1.0(1)	4.67(5)	1.66(5)
	1.1(1)	5.13(5)	1.41(5)

NOTA- Parámetros observados para las diferentes fuentes y transiciones. ¹ Para líneas no detectadas se muestra la temperatura correspondiente al nivel 3σ sobre el ruido. El error, entre paréntesis, se aplica sobre el último decimal.

Curiel et al. 1999). Las densidades de columna de H₂ se han estimado a partir de las de HCO⁺, H¹³CO⁺ y HN¹³C asumiendo una razón ¹²C/¹³C de 90, y las abundancias HCO⁺/H₂ y HNC/H₂ de 1×10⁻⁸ para L1448 (Irvine et al. 1987). En el caso de L183, se ha usado una razón ¹²C/¹³C de 64 y las razones en abundancia de HCO⁺/H₂ y HNC/H₂ de 8×10⁻⁹ (Dickens et al. 2000). Las densidades de columna de H₂ y las abundancias moleculares de SiO y CH₃OH se presentan en la Tab. 4.3. Esta tabla muestra también las abundancias

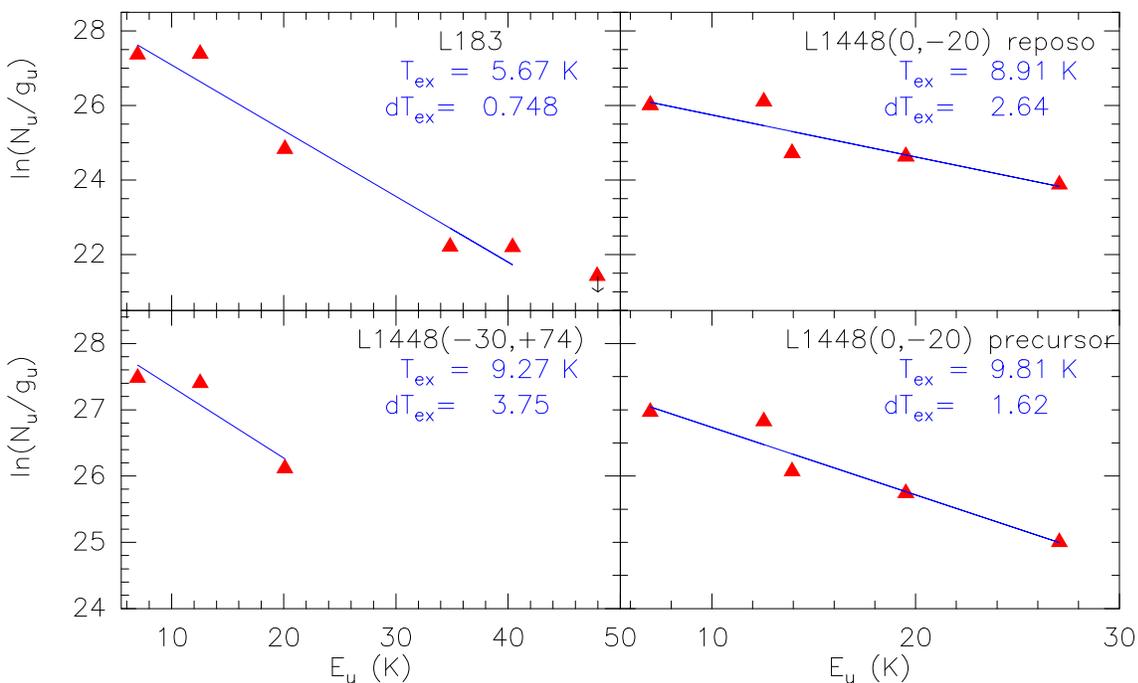


FIGURA 4.4: Diagramas de poblaciones de los niveles de CH_3OH en L183, L1448 ($0''$, $-20''$) (para las dos componentes, gas en reposo y precursor) y en L1448 ($-30''$, $+74''$).

relativas de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 , HCOOH y H_2CO con respecto a las de CH_3OH .

Como se puede esperar para el gas sin perturbar de L1448 ($0''$, $-20''$) y de L183 (entradas con -r de en reposo en la tabla), la abundancia de SiO es muy pequeña, $\leq 2 \times 10^{-12}$, ya que el SiO se pega a los granos de polvo y a sus mantos (Ziurys et al. 1989; Martín-Pintado et al. 1992). En el caso de CH_3OH y de H_2CO , las abundancias varían en el gas sin perturbar en uno y dos órdenes de magnitud respectivamente entre L1448-mm y L183. Para el resto de las MOCs, los límites superiores derivados para sus abundancias son similares para el gas sin perturbar de las dos fuentes.

Como se mencionó anteriormente, Jiménez-Serra et al. (2005) ha observado que la abundancia de CH_3OH en el precursor del choque (L1448 ($0''$, $-20''$)-p) aumenta de forma moderada (en un factor 3), mientras que la abundancia de SiO presenta un incremento mayor de un factor 15 con respecto a la del gas ambiente. También se observa un gran aumento, de más de un orden de magnitud en la abundancia de H_2CO en el precursor del choque para ambas posiciones de L1448-mm, como se espera para esta molécula debido a su eyección de los mantos de los granos como ocurre en el caso de SiO y CH_3OH . Los límites superiores en las abundancias de las MOCs son similares a aquéllos que se observan en el gas en reposo, lo que sugiere que las abundancias relativas de estas moléculas no están tan fuertemente afectadas por la eyección de los mantos de los granos.

Las abundancias de SiO y de CH_3OH en el gas chocado (L1448 ($0''$, $-20''$)-c en Tab. 4.3) se incrementan en cerca de 4 órdenes de magnitud con respecto a las que se observan en el gas sin perturbar debido a la erosión de los mantos de los granos eyectando moléculas

TABLA 4.3: ABUNDANCIAS DE LAS MOCs EN NUBES OSCURAS.

Fuente ¹	T_{ex} (K)	$N(\text{H}_2)$ $\times 10^{22} \text{cm}^{-2}$	X_{SiO} $\times 10^{-12}$	$X_{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-9}$	$\frac{\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{\text{HCOOCH}_3}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{\text{HCOOH}}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$	$\frac{\text{H}_2\text{CO}}{\text{CH}_3\text{OH}}$ $\times 10^{-2}$
L183-q	5.7	0.4	$\lesssim 4$	18.4	$\lesssim 0.4$	$\lesssim 3$	1.3	12.8
L1448 (0'',-20'')-r	8.9	1.2	$\lesssim 2$	1.4	$\lesssim 4$	$\lesssim 15$	$\lesssim 9$	$\lesssim 0.1$
L1448 (0'',-20'')-p	9.8	1.2	29.1	3.9	$\lesssim 3$	$\lesssim 9$	$\lesssim 5$	2.2
L1448 (-30'',+74'')-rp	9.3	3.7	12.5	2.2	$\lesssim 1$	$\lesssim 5$	$\lesssim 3$	15.0
L1448 (0'',-20'')-c								
6-8 km s ⁻¹	15	2.1×10^{-3}	2.3×10^4	1.5×10^3	$\lesssim 7$	$\lesssim 17$	$\lesssim 9$	$\lesssim 0.2$
8-10 km s ⁻¹	15	7.4×10^{-4}	1.4×10^4	2.8×10^3	$\lesssim 11$	$\lesssim 25$	$\lesssim 13$	$\lesssim 0.3$
10-12 km s ⁻¹	15	4.8×10^{-4}	$\lesssim 1.2 \times 10^4$	2.7×10^3	$\lesssim 17$	$\lesssim 40$	$\lesssim 21$	$\lesssim 0.4$
12-14 km s ⁻¹	15	3.2×10^{-4}	$\lesssim 1.8 \times 10^4$	2.6×10^3	$\lesssim 27$	$\lesssim 63$	$\lesssim 33$	$\lesssim 0.7$
14-16 km s ⁻¹	15	2.9×10^{-4}	$\lesssim 3.2 \times 10^4$	3.4×10^3	$\lesssim 45$	$\lesssim 76$	$\lesssim 35$	$\lesssim 0.9$
nubes del CG ²					~ 3.7	~ 3.9	~ 0.8	~ 1.1
NC masivos ³					~ 2.5	~ 6.9	$\sim 0.02^*$	~ 16.0
NC poco masivos ⁴						~ 160	~ 60	~ 190

NOTA- Densidades de columna de H_2 , temperaturas y abundancias relativas de las MOCs con respecto a H_2 y a CH_3OH . ¹ -r se utiliza para marcar el gas en reposo, -p para el precursor y -c para el gas afectado por el choque. ² Extraídos de los datos del Cap. 3. ³ Datos de núcleos calientes (NC) de Bisschop et al. (2007). ⁴ Datos de Bottinelli et al. (2007). * El autor asume que esta molécula proviene de un gas más frío que del que proceden el resto de MOCs.

a la fase gaseosa. Sorprendentemente, la razón entre H_2CO y CH_3OH decrece en más de un orden de magnitud en el gas chocado si la comparamos con la razón obtenida en el gas afectado por el precursor. Estos datos sugieren que la abundancia de H_2CO en los mantos de los granos es menor que la de CH_3OH . En cualquier caso, los límites superiores de las razones de abundancia de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, HCOOCH_3 , y HCOOH con respecto a la de CH_3OH en el gas chocado es pequeña comparada con la medida en núcleos calientes poco masivos, pero consistentes con los obtenidos en núcleos calientes masivos y en las nubes del CG.

4.5 Discusión

La abundancia de SiO y de las MOCs que se han derivado en nubes oscuras con diferente actividad en formación estelar muestra una tendencia muy clara con el paso de un choque. El gas ambiente de L183 y L1448-mm presenta una abundancia de SiO muy pequeña ($< 10^{-12}$) como cabe esperar de la química en fase gaseosa que no está afectada significativamente por la eyección de moléculas de los granos de polvo (Martín-Pintado et al. 1992). Los modelos químicos para la formación de las MOCs en nubes oscuras de Hasegawa et al. (1992) y Hasegawa & Herbst (1993a,b), predicen unas abundancias que son consistentes con los límites superiores que se han obtenido en el gas ambiente de L1448-mm para las moléculas de CH_3OH ($\sim 10^{-9}$), HCOOH (10^{-9} - 10^{-10} , dependiendo de la abundancia inicial de metales) y para $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 ($\sim 10^{-12}$). H_2CO (10^{-7} - 10^{-8} según los modelos), esta fuente muestra unas abundancias menores que las que se esperan de los modelos. Estas abundancias tan pequeñas de H_2CO ($\sim 10^{-10}$), que también presenta la envoltura de la posición central de L1448-mm, posiblemente sean producidas por el agotamiento en fase gaseosa del CO al

pegarse a los granos de polvo (Maret et al. 2005). En el caso de L183, se han encontrado discrepancias de hasta un orden de magnitud entre las predicciones de los modelos y las abundancias medidas de CH_3OH , HCOOH y H_2CO . No obstante los modelos en fase gaseosa de nubes oscuras deben ser actualizados puesto que Geppert et al. (2006) han demostrado recientemente que las reacciones empleadas en el pasado para la formación del CH_3OH en fase gaseosa no son eficientes. En vez de producirse el CH_3OH , lo que se produce es una disociación y se forman radicales más simples. En la actualidad se cree probable la posibilidad de que muchas de las MOCs de las nubes oscuras se puedan formar en los granos (Knez et al. 2005).

La abundancia de SiO en la componente del gas afectado por el precursor (posición L1448 ($0''$, $-20''$) a 5.2 km s^{-1}) se incrementa en más de un orden de magnitud debido a la eyección de SiO o de Si de los mantos de los granos producida por la repentina aceleración de los iones respecto de los neutros a medida que el choque de tipo-C se propaga a través del gas molecular ambiente de la nube (Jiménez-Serra et al. 2004,2005). La abundancia de H_2CO en esta componente crece también en más de un orden de magnitud. Un aumento menor (de solo un factor ~ 3) se observa en la abundancia de CH_3OH . Los límites superiores en las abundancias de HCOOH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 en el precursor del choque indican que estas moléculas no son eyectadas de los mantos de los granos en los primeros estadios del choque o que las abundancias de las mismas en los mantos son muy pequeñas. En la posición L1448 ($-30''$, $+74''$) tanto la componente en reposo como la del precursor se encuentran mezcladas. En esta mezcla se observa un incremento moderado de la abundancia de CH_3OH y un gran aumento en la abundancia de SiO y H_2CO , mientras que no se ve ningún cambio en las de las otras MOCs.

La tendencia que se observa en la abundancia de algunas moléculas en el precursor, se vuelve aún más dramática en el gas afectado por el choque joven del flujo bipolar L1448–mm. Mientras que las abundancias de SiO y de CH_3OH aumentan en 4 y 3 órdenes de magnitud en esta componente con respecto al gas ambiente, respectivamente, las razones de abundancias de las MOCs (incluyendo H_2CO) con respecto a CH_3OH permanecen relativamente constantes con respecto a las observadas en el gas ambiente.

Para comparar los resultados de una forma homogénea, en la Tab. 4.3 se muestran las razones de abundancia entre las MOCs con respecto a CH_3OH para todos los objetos donde estas moléculas han sido detectadas, y que tienen relevancia para este trabajo: núcleos calientes masivos y poco masivos, y las nubes moleculares del CG presentadas en el Cap. 3.

Las razones de abundancia $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{CH}_3\text{OH}$ y $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ en el CG y en núcleos calientes sugieren que estos objetos tienen una composición de los mantos de los granos similar. Los límites superiores para las abundancias relativas de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y HCOOCH_3 con respecto a CH_3OH en el gas sin perturbar y en el que está afectando el choque, son consistentes con las medidas de estas razones en núcleos calientes y en las nubes moleculares del CG, y por consiguiente, compatibles con una composición similar de los mantos para todos estos objetos. Sin embargo, las razones de las MOCs medidas en núcleos calientes poco masivos sobrepasan en más de un orden de magnitud aquéllas del gas afectado por el choque en L1448–mm. A menos que exista un cambio dramático en la composición de los mantos de los granos entre estos dos tipos de fuentes, este hecho sugiere que los importantes incrementos en abundancia de MOCs en fase gaseosa están restringidos al material que está

siendo eyectado por los procesos de formación estelar poco masiva.

Garrod & Herbst (2006) han propuesto recientemente que, en la evolución de la química que rodea la formación estelar, puede existir una fase intermedia entre el inicio del calentamiento de los granos de polvo y la evaporación de sus mantos. En esta fase, de “encendido” de la estrella, se podría producir un calentamiento del gas circunestelar y del polvo que lo rodea, induciendo una química mucho más efectiva para la formación de MOCs en la superficie de los granos y en la fase gaseosa. Aunque en estos modelos no se han podido reproducir las razones tan grandes de $\text{HCOOCH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ que se observan en los núcleos calientes poco masivos, al menos induce a pensar que cambios locales en las condiciones físicas del gas, asociados a la formación estelar, pueden originar estas razones de abundancias tan grandes. Sin embargo, las abundancias de MOCs observadas en las nubes moleculares del CG, no pueden ser explicadas mediante estos modelos, ya que la formación estelar no juega ningún papel a escalas espaciales tan grandes como es el caso del CG. Las reacciones en la superficie de los granos no son muy efectivas debido a que la temperatura de la mayoría de los granos es pequeña (<15 K, Rodríguez-Fernández et al. 2004).

4.6 Conclusiones del capítulo

Las pequeñas razones de abundancias de las MOCs que se encuentran en las dos nubes oscuras observadas, apoyan el escenario propuesto por Maret et al. (2005), donde las abundancias crecen localmente en el material circunestelar. Pero la mayoría del material en la nube ambiente podría tener la misma composición en los mantos de los granos que la observada en las nubes moleculares del CG y en los núcleos calientes, lo que apoya la existencia de una especie de composición “Universal” de los mantos de los granos de polvo, como ya se propuso en el Cap. 3. Las principales conclusiones a las que se llega son:

- Se ha detectado que las abundancias de muchas MOCs aumentan en la componente del precursor, y aún más en el gas que está afectado por el choque.
- Los límites superiores a las abundancias observadas en estas nubes concuerdan con las observadas en las nubes moleculares del CG y en los núcleos calientes de estrellas masivas.
- Las razones de abundancias diferentes que se observan en los núcleos calientes de estrellas poco masivas pueden ser producidas por los cambios locales en la química en las partes más internas de dichos núcleos.

Parte III

En los límites de la complejidad química en el centro Galáctico

Capítulo 5

Química de los aldehídos, isomerización y saturación de las moléculas en el centro Galáctico

5.1 Introducción

En los últimos años se ha ido incrementando nuestro conocimiento de la complejidad química del MI. Sólo en el núcleo caliente Sgr B2N, que se encuentra en el CG, se han descubierto en el año pasado 3 nuevas moléculas orgánicas complejas (MOCs): la ciclopropenona ($c\text{-H}_2\text{C}_3\text{O}$, Hollis et al. 2006a), la acetamida (CH_3CONH_2 , Hollis et al. 2006b), y la cetenimina (CH_2CNH , Lovas et al. 2006). También recientemente, se han detectado, en este núcleo caliente, otras moléculas orgánicas muy complejas, entre las que vamos a destacar la observación y detección de los siguientes aldehídos: propinal (HC_2CHO), propenal (CH_2CHCHO), propanal ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$) y glicolaldehído (CH_2OHCHO); y también la del alcohol etilenglicol ($\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, Hollis et al. 2000, 2002, 2004a; Halfen et al. 2006).

La detección de estas moléculas se ha basado sobre todo en observaciones de transiciones moleculares en el rango de las longitudes de onda centimétricas, donde la mayoría de las transiciones de estas moléculas han sido detectadas en absorción en la dirección del continuo que emite el núcleo caliente de Sgr B2N. En la Fig. 5.1 se muestran algunos perfiles de líneas moleculares de CH_2OHCHO y de $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ que han sido observadas por el grupo de Hollis et al.. Como se puede ver en la figura, los perfiles son muy complicados, con varias componentes en velocidad que en algunas transiciones se muestran en emisión y en otras en absorción. Las temperaturas de excitación que se derivan de las observaciones tienen además varias componentes, una templada de unos 50 K y otra fría de unos 8 K, con lo que no puede tratarse de gas molecular de la parte interna del núcleo caliente. En los estudios realizados hasta ahora se explica la emisión molecular mediante un halo de materia molecular que envuelve la concentración central.

Se han propuesto muchas formas diferentes para la formación de estas MOCs, tanto en fase gaseosa, como en la superficie de los granos de polvo. En los estudios de Hollis et al. se propone que la manera más probable de producir estas moléculas es en los mantos de los granos y que después se deben estar evaporando por un aumento de la temperatura o eyectando de éstos por choques. En muchos casos se supone que estas MOCs pueden formarse

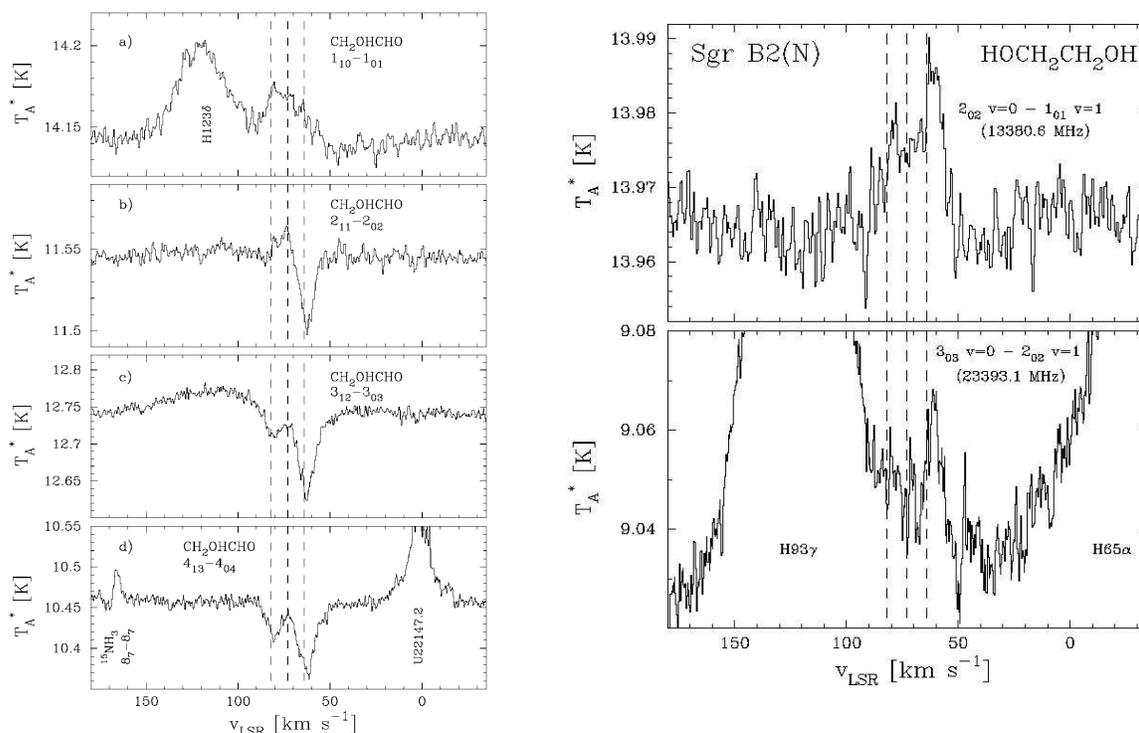


FIGURA 5.1: *Transiciones observadas de glicolaldehído y de etilenglicol por Hollis et al. (2002, 2004b) del núcleo molecular caliente Sgr B2N.*

mediante adición de carbonos y, posteriormente, por oxidación e hidrogenación de moléculas simples (Charnley & Roger 2005). Por ejemplo, la serie de HC_2CHO , que al hidrogenarse dos veces forma CH_2CHCHO , y al volver a hidrogenarse dos veces $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$ (Hollis et al. 2004b). Hiraoka et al. (2004), Watanabe (2005) y Fuchs et al. (2007, enviado) han demostrado que la hidrogenación de CO para formar H_2CO y después CH_3OH es muy eficiente. De todas maneras existen varias interpretaciones y hay grupos que creen que esta forma de incrementar la complejidad no es muy realista y que tienen que existir reacciones entre radicales en las superficie de los granos (Garrod, Widicus Weaver & Herbst, en preparación). Bennett & Kaiser (2007) muestran como los isómeros CH_2OHCHO y HCOOCH_3 se forman de manera eficiente en los mantos de los granos, al estudiar análogos de los mantos helados compuesto por una mezcla de CO y CH_3OH a una temperatura de ~ 10 K y con la incidencia de electrones energéticos para mimetizar el efecto de los rayos cósmicos.

Por otra parte, en fase gaseosa existe también una ruta de formación que ha de tenerse en cuenta, debido a las grandes abundancias de la molécula fundamental en esta reacción, el H_2CO . Halfen et al. (2006) muestran la ruta química para formar en fase gaseosa el CH_2OHCHO (Fig. 5.2). La detección del formaldehído protonado (H_2COH^+), que es el precursor del CH_2OHCHO en fase gaseosa, en núcleos calientes (Ohishi et al. 1996) con abundancias suficientemente grandes como para que las reacciones sean eficientes, indica que la formación de CH_2OHCHO puede ser en parte producida en fase gaseosa y que las abundancias observadas pueden ser generadas tanto en fase gaseosa como sobre los granos en los núcleos calientes.

Como ya se ha comentado en el Cap. 3, las observaciones de las nubes moleculares

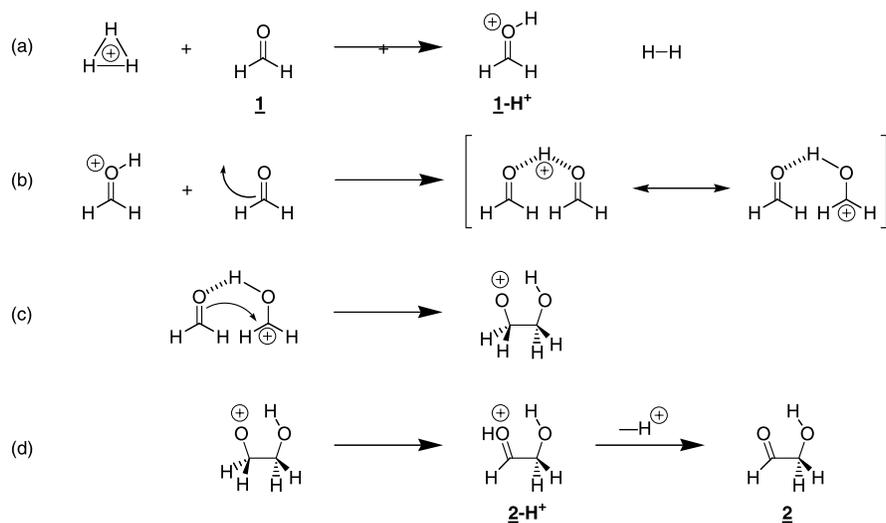


FIGURA 5.2: El H_2CO , después protonarse al reaccionar con H_3^+ puede reaccionar consigo mismo para formar la molécula de CH_2OHCHO . Figura adaptada de Halfen et al. (2006).

del CG, no sólo en los núcleos calientes sino también en la ZMC, muestran grandes abundancias de MOCs como el $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ o el HCOOCH_3 . Estas nubes moleculares muestran gas con temperaturas cinéticas grandes (>50 K) sobre regiones mayores de 10 pc y con densidades de algunos 10^5 cm^{-3} (Cap. 3). La hipótesis actual que explica las grandes abundancias de MOCs es que se está produciendo la erosión de los mantos de los granos por choques a velocidades moderadas ($\leq 40 \text{ km s}^{-1}$), a diferencia de lo que sucede en núcleos moleculares calientes, donde se evaporan de los granos de polvo calientes.

Con el fin de establecer si los aldehídos son observables en las nubes típicas del CG y comprender la formación de los mismos en el MI, en este capítulo se presentan observaciones de estas MOCs en tres de las nubes moleculares del CG que presentaban mayores abundancias en alcoholes. Estas nuevas observaciones sugieren otra vez una composición similar de los mantos de los granos en las regiones centrales de nuestra Galaxia, y dan información sobre su química en las regiones de choques lo que permitirán discernir entre las diferentes hipótesis actuales de formación de estas moléculas complejas. Se verá cómo los rayos cósmicos pueden jugar un papel fundamental para promover la química de MOCs en mantos helados y como el CG constituye uno de los mejores laboratorios para detectar nuevas MOCs y estudiar su formación.

5.2 Observaciones y análisis de datos

Para detectar los aldehídos complejos, se realizaron observaciones con el telescopio de 100 metros Robert C. Byrd Green Bank Telescope en Virginia del Oeste (EEUU), entre

Abril y Mayo del 2006. Esta radioantena pertenece al “National Radio Astronomy Observatory” (NRAO), opera en el rango centimétrico, y posee 10 receptores que cubren el rango de frecuencias desde 290 MHz a 49.8 GHz. En las observaciones realizadas se han usado las bandas Ku y K, que cubren las frecuencias entre 12 y 15.4 GHz y entre 18 y 26.5 GHz, respectivamente. A estas frecuencias se localizan transiciones muy intensas de los distintos aldehídos, así como de otras MOCs de gran interés para la comparación de abundancias con otros objetos y para establecer su química (ver Tab. 5.1).

Como autocorrelador se utilizó un espectrómetro seleccionando cuatro ventanas espectrales de 200 MHz de ancho cada una, con una resolución espectral de 24.4 kHz/0.6 km s⁻¹ para la banda Ku y 0.3 km s⁻¹ para la banda K. Las observaciones se realizaron usando el método de conmutación de posición, donde se utilizaron posiciones de referencia libres de emisión molecular, según los mapas de CS obtenidos por Bally et al. (1987) (ver Fig. 5.3).

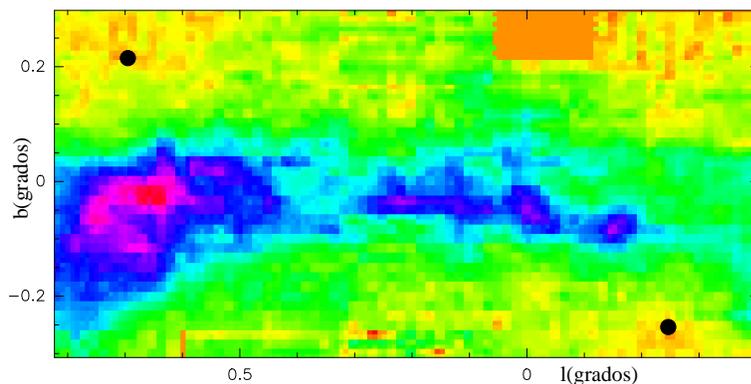


FIGURA 5.3: Mapa de CS de Bally et al. (1987), los puntos negros marcan las posiciones de referencia utilizadas en la observación, la emisión en estas posiciones es mínima.

Los receptores de polarización dual, proveen información de la emisión de las dos polarizaciones. Puesto que la emisión no está polarizada promediamos las dos polarizaciones para mejorar la razón señal-ruido. Además, como las nubes moleculares en las diferentes fuentes tienen anchuras de ~ 15 km s⁻¹, se ha suavizado el espectro hasta tener una resolución de ~ 3 km s⁻¹, mejorando la razón señal-ruido. La intensidad de las líneas se ha calibrado en unidades de T_A^* , ya que se puede suponer que la emisión es extensa, como se ha observado para otras moléculas en el Cap. 3. La calibración se produjo por medio de un tubo de ruido de intensidad conocida que se inyectó durante la observación. El error en la calibración es de un 10–20%.

Las fuentes observadas han sido MC G–0.11–0.08, situada en la nube de 20 km s⁻¹; MC G–0.02–0.07 en la nube de 50 km s⁻¹, y MC G+0.693–0.03, en la envoltura de Sgr B2 y a una distancia de 20'', 52'' de Sgr B2N (ver Tab. 5.2). Por comodidad estas fuentes se denominan como MC G–0.11, MC G–0.02, y MC G+0.693. Estas fuentes han sido seleccionadas a partir de aquellas que se utilizaron para el estudio de los alcoholes del Cap. 3. Son las que presentan mayores abundancias y densidades de columna en MOCs de la muestra, además de estar situadas en distintos complejos para obtener información de diferentes regiones del CG.

En las Figs. 5.4 y 5.5 se muestran las líneas espectrales observadas de las MOCs en las tres fuentes. Para la fuente MC G+0.693 se han detectado un mayor número de transiciones ya que se integró durante más tiempo. Las transiciones detectadas en todas

TABLA 5.1: FRECUENCIAS OBSERVADAS

molécula	transición	frecuencia	E_s
		(MHz)	(K)
H ₂ COH ⁺	2 _{1,1} →2 _{1,2}	15532.99 ¹	17.49
CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH *	6 _{1,5} →6 _{0,6}	20339.80 ¹	10.30
CH ₂ OHCHO	1 _{1,0} →1 _{0,1}	13477.17 ¹	1.20
CH ₂ OHCHO	2 _{1,1} →2 _{0,2}	15176.46 ¹	2.38
CH ₂ OHCHO	4 _{1,3} →3 _{2,2}	15261.66 ¹	6.48
CH ₂ OHCHO	4 _{1,3} →4 _{0,4}	22142.67 ¹	6.48
HOCH ₂ CH ₂ OH	3 _{0,3} (v0)→2 _{0,2} (v1)	23393.10 ¹	2.92
HOCH ₂ CH ₂ OH	2 _{0,2} (v0)→1 _{0,1} (v1)	13380.60 ¹	1.47
HC ₂ CHO	2 _{0,2} →1 _{0,1}	18650.31 ³	1.34
HC ₂ CHO*	2 _{1,1} →1 _{1,0}	18978.78 ³	4.41
CH ₂ CHCHO	2 _{1,1} →1 _{1,0}	18221.16 ³	3.37
CH ₂ CHCHO	3 _{1,3} →2 _{1,2}	26079.45 ³	4.56
CH ₃ CH ₂ CHO	2 _{1,2} →1 _{1,1}	19690.43 ³	1.97
CH ₃ CH ₂ CHO	3 _{0,3} →2 _{1,2}	21451.57 ³	3.00
CH ₃ OH	3 _{2,3} →3 _{1,3}	24928.70 ¹	36.18
CH ₃ OH	4 _{2,3} →4 _{1,3}	24933.47 ¹	45.46
CH ₃ OH	2 _{2,3} →2 _{1,3}	24934.38 ¹	29.21
CH ₃ OH	5 _{2,3} →5 _{1,3}	24959.08 ¹	57.07
CH ₃ OH	6 _{2,3} →6 _{1,3}	25018.12 ¹	71.01
HCOOCH ₃ -A	2 _{1,1} →1 _{1,0}	26048.52 ¹	2.54
HCOOCH ₃ -E	2 _{1,1} →1 _{1,0}	26044.83 ¹	2.56
CH ₃ CHO-A *	1 _{0,1} →0 _{0,0}	19265.16 ²	0.93
CH ₃ CHO-E *	1 _{0,1} →0 _{0,0}	19262.16 ²	1.02
H ₂ CCO*	1 _{0,1} →0 _{0,0}	20209.20 ¹	0.97
c-C ₂ H ₄ O	2 _{1,1} →2 _{0,2}	24923.64 ¹	6.15

NOTA- Transiciones moleculares observadas en cada moléculas en las fuentes MC G-0.11-0.08, MC G-0.02-0.07, y MC G+0.693-0.03. Las características espectroscópicas han sido obtenidas de las bases de datos de Colonia (¹ Müller et al. 2005), del catalogo del Jet propulsion laboratory (², Pickett et al. 1998) y del trabajo de Hollis et al. (2004b) (³). Las transiciones marcadas con un * sólo han sido observadas en la fuente MC G+0.693-0.03.

TABLA 5.2: PARÁMETROS DE LAS FUENTES

Fuente	α [J2000]	δ [J2000]	velocidad (km s ⁻¹)	n(H ₂) (cm ⁻²)	X(CH ₃ OH)
MC G-0.02-0.07	17 ^h 45 ^m 51 ^s	-28 ^o 59'06"	47	6.8×10 ²²	2.9×10 ⁻⁷
MC G-0.11-0.08	17 ^h 45 ^m 39 ^s	-29 ^o 04'05"	21	1.0×10 ²²	1.1×10 ⁻⁶
MC G+0.693-0.03	17 ^h 47 ^m 22 ^s	-28 ^o 21'27"	68	4.1×10 ²²	4.5×10 ⁻⁷

NOTA- Posiciones en coordenadas ecuatoriales, densidades de columna de H₂, y abundancias de CH₃OH relativas a H₂ para las diferentes fuentes derivadas a partir de la emisión de C¹⁸O del Cap. 3. Datos del Cap. 3.

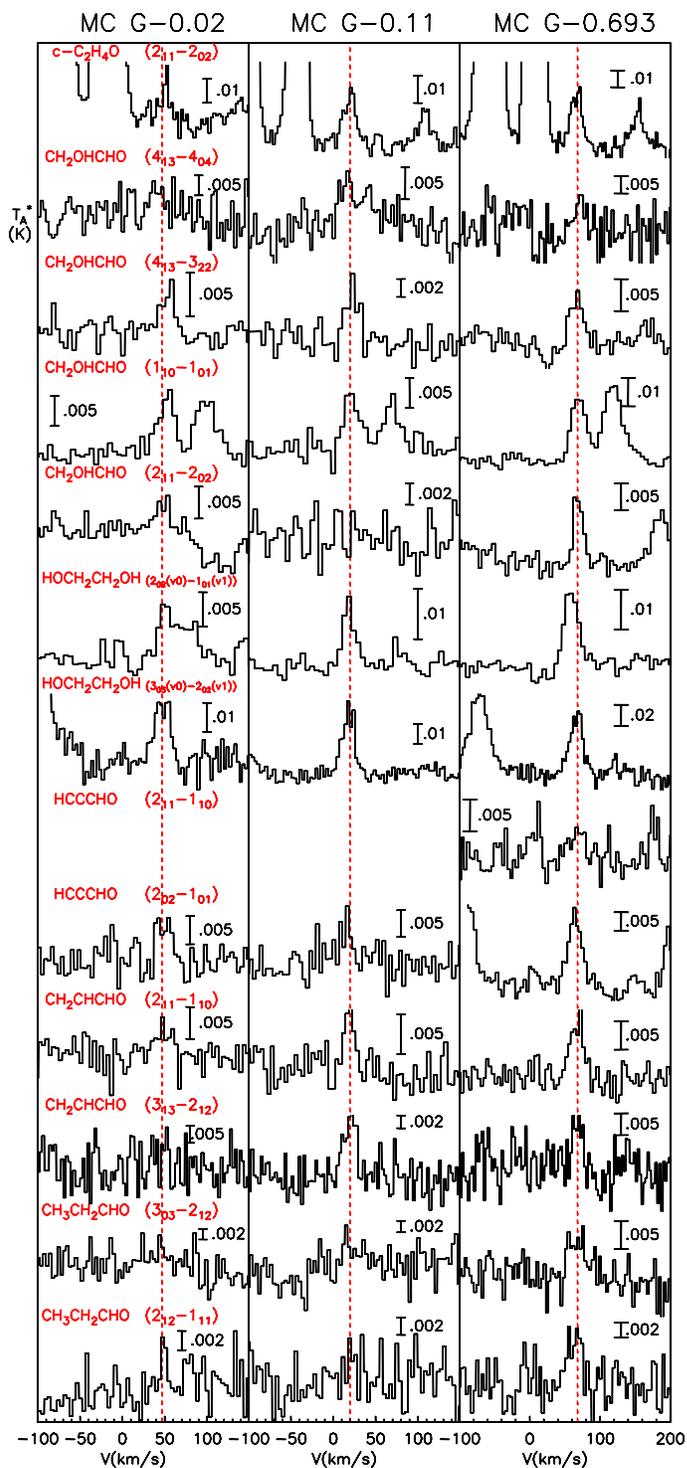


FIGURA 5.4: Espectros de las nuevas transiciones moleculares que han sido observadas (ver Tab. 5.1) en las tres fuentes del CG. MC G+0.693 es la fuente con más detecciones. Las líneas verticales marcan las velocidades de las nubes, a 20 km s^{-1} para MC G-0.11, a 49 km s^{-1} para MC G-0.02 y a 68 km s^{-1} para MC G+0.693.

las fuentes se muestran en la Tab. 5.1 junto con sus parámetros espectroscópicos. Aquellas que sólo se han podido observar en esta fuentes están marcadas con un * y se muestran en la Fig. 5.6. En esta tabla se puede ver como, además de las transiciones de los aldehídos

complejos, se han detectado líneas de otras moléculas: CH_3OH , HCOOCH_3 , acetaldehído (CH_3CHO), cetena (H_2CCO), óxido de etileno ($c\text{-C}_2\text{H}_4\text{O}$), y H_2COH^+ . La única molécula compleja que no ha podido ser detectada, aunque guarda relación con el resto, es el propanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$).

Para obtener la abundancia de H_2CO , que es una molécula clave para estudiar la química del

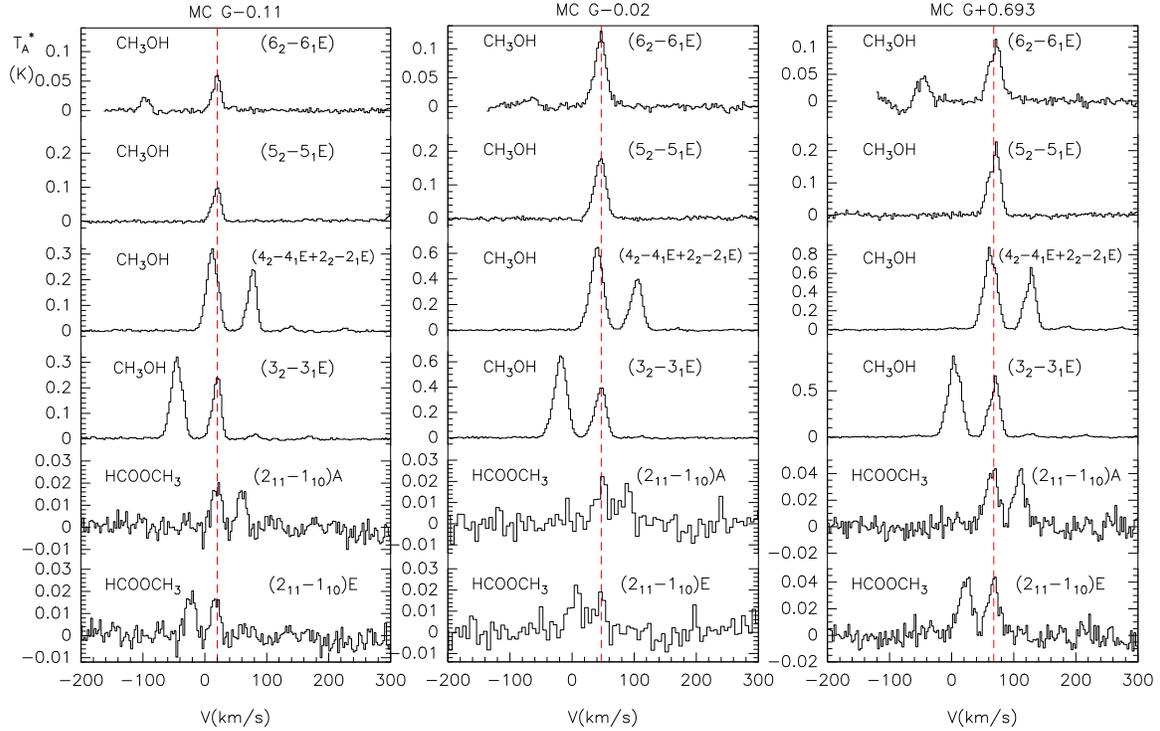


FIGURA 5.5: *Perfiles espectrales de las transiciones de moléculas que ya se habían observado (ver Tab. 5.1).*

CH_2OHCHO , se han utilizado datos de sus isotopólogos H_2^{13}CO y $\text{H}_2\text{C}^{18}\text{O}$ observados en los rastreos espectrales a 2 mm de Martín (2006a). En la Tab. 5.3 se presentan los parámetros de los ajustes gaussianos que se han obtenido de los espectros. En la fuente MC G+0.693 los perfiles de las líneas de CH_3OH muestran la existencia de dos componentes de velocidad solapadas, que no son separables en la mayoría de las otras transiciones moleculares. Por ello, en los cálculos que se han realizado se ha realizado un ajuste con una única gaussiana.

Para obtener las densidades de columna se ha utilizado una aproximación ETL y se han derivado las temperaturas de excitación de las moléculas usando diagramas de poblaciones de los niveles para CH_3OH y para otras moléculas con suficientes transiciones observadas como para tener un buen ajuste. En la Fig. 5.7 se muestran algunos de los diagramas de las poblaciones de los niveles derivados de las tres fuentes para CH_3OH , HCOOCH_3 y H_2CCO .

Las temperaturas de excitación obtenidas varían en un rango entre 8 y 16.4 K, muy parecido al que se obtuvo en el estudio de los alcoholes. Como se discutía en el Cap. 3, las pequeñas temperaturas de excitación obtenidas para estas moléculas se explican si el gas tiene temperaturas cinéticas elevadas (>100 K) y densidades relativamente pequeñas, de algunos 10^5 cm^{-3} .

Los diagramas de las poblaciones de los niveles derivados para la molécula de

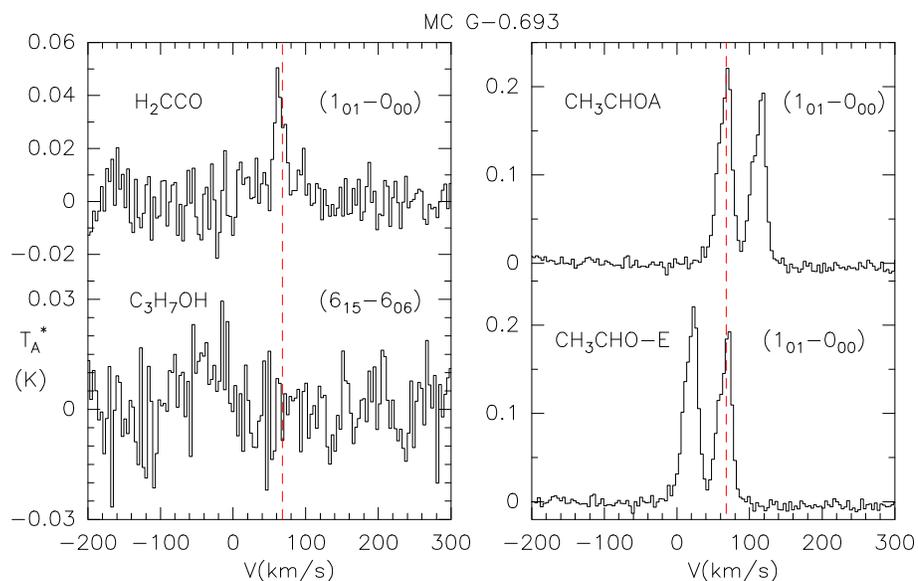


FIGURA 5.6: Perfiles de las líneas observadas en MC G+0.693 y no en el resto de las fuentes. El C_3H_7OH es la única molécula de la que sólo hemos obtenido límites superiores en su intensidad.

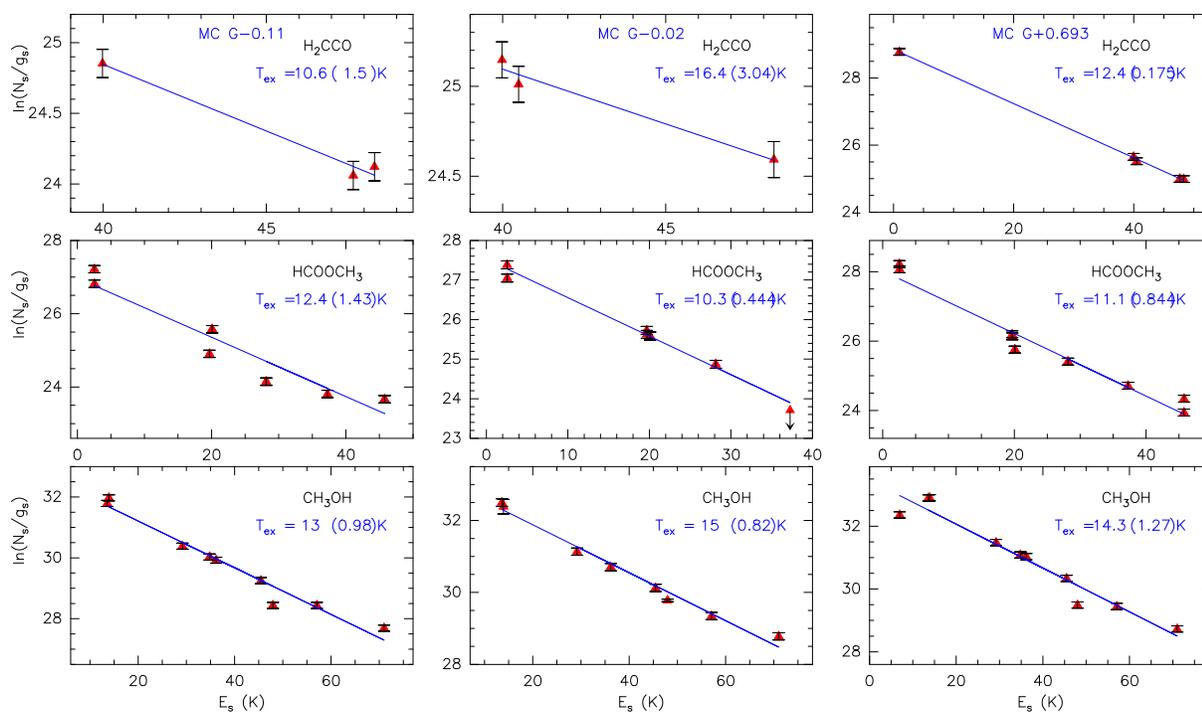


FIGURA 5.7: Diagramas de las poblaciones de los niveles de las moléculas H_2CCO , $HCOOCH_3$ y CH_3OH para las diferentes fuentes. Las temperaturas de excitación fluctúan entre 10 K y 16.4 K.

CH_3OHCHO muestran que las poblaciones de las diferentes transiciones no pueden ser reproducidas por una única temperatura de excitación, lo que indica una excitación que no se describe adecuadamente por la aproximación ETL. El mismo efecto se produce en las tres fuentes observadas. Esto es consistente con lo que ya observaron Hollis et al. (2004a). Las transiciones $2_{1,1} \rightarrow 2_{0,2}$ y $4_{1,3} \rightarrow 3_{0,4}$ se han observado en absorción, mientras que la transición

TABLA 5.3: PARÁMETROS OBSERVACIONALES

Molécula	Transición	Inten.	V	ΔV	Inten.	V	ΔV	Inten.	V	ΔV
		K	km s ⁻¹	km s ⁻¹	K	km s ⁻¹	km s ⁻¹	K	km s ⁻¹	km s ⁻¹
		MC G-0.02			MC G-0.11			MC G+0.693		
H ₂ COH ⁺	2 _{1,1} →2 _{1,2}	0.005(1)	73(3)	22(6)
CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	6 _{1,5} →6 _{0,6}	<0.024
CH ₂ OHCHO	1 _{1,0} →1 _{0,1}	0.010(1)	52(1)	23(3)	0.009(1)	22(1)	21(3)	0.023(1)	69(1)	24(1)
CH ₂ OHCHO	2 _{1,1} →2 _{0,2}	0.004(1)	47(3)	17(5)	<0.006	0.013(1)	69(1)	15(2)
CH ₂ OHCHO	4 _{1,3} →3 _{2,2}	0.005(1)	53(2)	19(4)	0.006(2)	22(2)	17(3)	0.007(1)	67(2)	21(5)
CH ₂ OHCHO	4 _{1,3} →4 _{0,4}	<0.015	0.008(1)	15(2)	21(6)	0.011(3)	71(3)	24(9)
HOCH ₂ CH ₂ OH	3 _{0,3} (0)→2 _{0,2} (1)	0.02(1)	47(1)	20(2)	0.032(4)	18(1)	17(1)	0.060(6)	67(3)	23(8)
HOCH ₂ CH ₂ OH	2 _{0,2} (0)→1 _{0,1} (1)	0.008(1)	50(2)	15(4)	0.013(1)	18(1)	14(2)	0.020(1)	59(1)	24(2)
HC ₂ CHO	2 _{0,2} →1 _{0,1}	0.007(2)	49(2)	19(3)	0.008(3)	15(2)	16(7)	0.019(1)	64(1)	23(2)
HC ₂ CHO	2 _{1,1} →1 _{1,0}	0.005(1)	70(3)	21(10)
CH ₂ CHCHO	2 _{1,1} →1 _{1,0}	0.004(1)	48(3)	20(5)	0.009(1)	19(1)	14(3)	0.009(1)	66(2)	23(3)
CH ₂ CHCHO	3 _{1,3} →2 _{1,2}	<0.015	0.010(2)	20(1)	17(3)	0.013(5)	67(2)	15(3)
CH ₃ CH ₂ CHO	2 _{1,2} →1 _{1,1}	0.006(1)	49(2)	15(5)	<0.006	0.006(2)	65(3)	21(6)
CH ₃ CH ₂ CHO	3 _{0,3} →2 _{1,2}	<0.009	<0.009	0.006(3)	68(3)	29(6)
CH ₃ OH	3 _{2,3} →3 _{1,3}	0.39(2)	46(1)	21(1)	0.24(2)	19(1)	16(3)	0.57(4)	69(1)	20(1)
CH ₃ OH	4 _{2,3} →4 _{1,3}	0.330(1)	46(1)	21(1)	0.177(1)	18(1)	16(1)	0.423(2)	69(1)	20(1)
CH ₃ OH	2 _{2,3} →2 _{1,3}	0.373(1)	46(1)	21(1)	0.226(1)	18(1)	16(1)	0.543(3)	69(1)	20(1)
CH ₃ OH	5 _{2,3} →5 _{1,3}	0.176(6)	45(1)	21(1)	0.097(6)	19(1)	16(7)	0.19(2)	69(1)	21(1)
CH ₃ OH	6 _{2,3} →6 _{1,3}	0.118(6)	45(1)	22(1)	0.060(4)	19(1)	15(1)	0.101(8)	70(1)	24(1)
HCOOCH ₃ -A	2 _{1,1} →1 _{1,0}	0.020(6)	49(2)	27(6)	0.021(2)	19(1)	19(1)	0.042(5)	65(1)	25(2)
HCOOCH ₃ -E	2 _{1,1} →1 _{1,0}	0.018(6)	46(2)	23(5)	0.022(2)	17(1)	17(1)	0.041(5)	67(1)	22(2)
CH ₃ CHO-A	1 _{0,1} →0 _{0,0}	0.21(2)	67(1)	23(1)
CH ₃ CHO-E	1 _{0,1} →0 _{0,0}	0.18(2)	67(1)	22(1)
H ₂ CCO	1 _{0,1} →0 _{0,0}	0.043(6)	64(1)	17(3)
c-C ₂ H ₄ O	2 _{1,1} →2 _{0,2}	0.017(5)	51(1)	12(3)	0.018(2)	17(1)	17(2)	0.032(4)	66(2)	20(3)

NOTA- Las temperaturas están expresadas en temperatura de antena, y los límites corresponden a 3σ .

1_{1,0}→1_{0,1} en emisión en el núcleo caliente de Sgr B2N. No se ha encontrado contaminación por otra especie ya detectada que pueda explicar este comportamiento. Debido a esto se ha decidido utilizar las transiciones 1_{1,0}→1_{0,1} y 4_{1,3}→3_{2,2}, que no muestran absorción en los espectros de Hollis et al. y que de ellos se deriva una densidad de columna similar a partir de ambas transiciones.

El error en las densidades de columna debido al uso de la aproximación ETL vendrá dado por el uso de una sola temperatura de excitación de los distintos niveles, obtenida a partir de los diagramas de poblaciones. De todas formas, en el caso extremo de que las temperaturas de excitación varíen en un factor 2, el error en la estimación de las densidades de columna de las MOCs será de menos de un factor 2. Por consiguiente se considerará que las densidades de columnas calculadas en este trabajo presentan unas incertidumbres de un factor 2, como se mencionaba en el Cap. 3.

Para determinar las abundancias se han asumido las densidades de columna de H_2 que se obtuvieron usando la emisión de $C^{18}O$ en el Cap. 3. Las densidades de columnas de H_2 son $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G-0.11, $6.8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G-0.02, y $4.1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G+0.693. En la Tab. 5.4 se presentan las abundancias relativas a H_2 para todas

TABLA 5.4: ABUNDANCIAS

Fuente	HC_2CHO $\times 10^{-9}$	CH_2CHCHO $\times 10^{-9}$	CH_3CH_2CHO $\times 10^{-9}$	CH_2OHCHO $\times 10^{-8}$	$HOCH_2CH_2OH$ $\times 10^{-8}$	$HCOOCH_3$ $\times 10^{-8}$
MC G-0.02	0.47	0.27	1.4	0.30	0.36	1.0
MC G-0.11	2.3	2.3	4.4	1.8	2.8	7.8
MC G+0.693	1.6	0.92	3.9	0.91	1.1	4.7
Fuente	$c-C_2H_4O$ $\times 10^{-9}$	CH_3CHO $\times 10^{-8}$	H_2CCO $\times 10^{-8}$	H_2CO $\times 10^{-8}$	H_2COH^+ $\times 10^{-9}$	CH_3OH $\times 10^{-6}$
MC G-0.02	1.1	1.0	0.19	1.6	<1.1	0.29
MC G-0.11	5.6	3.0	1.6	6.5	<1.3	1.1
MC G+0.693	3.0	3.6	0.71	0.88	2.4	0.45

NOTA- Las densidades de columna de H_2 utilizadas para calcular las abundancias relativas en cada fuente son: $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G-0.11, $6.8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G-0.02, y $4.1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ para MC G+0.693.

las MOCs detectadas. $CH_3CH_2CH_2OH$ sólo ha sido observada en MC G+0.693 derivándose un límite superior en su abundancia de $\leq 7.3 \times 10^{-9}$. Como en el Cap. 3 se obtienen grandes abundancias, entre 10^{-10} y $\sim 10^{-8}$, en todas las MOCs observadas. Además el CH_3OH presenta abundancias mayores, entre 10^{-7} y 10^{-6} .

5.3 Discusión

En el Cap. 3 se vio como los choques producían la erosión de los mantos de los granos de polvo en estas regiones, y que la química es rica en MOCs debido a la formación de éstas en los mantos de estos granos. Sin modelos químicos que ayuden a derivar las rutas de formación de estas moléculas, se van a comparar las abundancias de las diferentes MOCs con el fin de establecer las posibles vías de formación y diferencias en la química de las nubes moleculares del CG. Para ello se realiza la misma comparación que se hizo con los alcoholes para ver si se encuentran tendencias consistentes en las abundancias de las diferentes moléculas. En la Tab. 5.5 se presentan las abundancias relativas de las diferentes moléculas observadas en este estudio con respecto a la abundancia de CH_3OH . Las incertidumbres en las abundancias relativas se consideran dentro de un factor 3, al propagar los errores en las densidades de columna de las diferentes moléculas. Lo primero que llama la atención en cuanto a las abundancias de las MOCs en estas tres fuentes es que, al igual que en el caso de las moléculas más simples como C_2H_5OH , sus abundancias relativas respecto a CH_3OH son muy parecidas, con una dispersión $\lesssim 3$ entre fuentes. Aunque sólo se han observado tres posiciones es, sin embargo, un resultado relevante ya que estas posiciones están separadas por

cientos de parsecs en regiones muy diferentes dentro del CG. Este resultado refuerza todavía más la hipótesis de una composición similar en los mantos de los granos de polvo en la ZMC.

TABLA 5.5: RAZONES DE ABUNDANCIA DE LAS MOCs CON RESPECTO A CH₃OH.

Fuente	HC ₂ CHO ×10 ⁻³	CH ₂ CHCHO ×10 ⁻³	CH ₃ CH ₂ CHO ×10 ⁻³	CH ₂ OHCHO ×10 ⁻²	HOCH ₂ CH ₂ OH ×10 ⁻²	HCOOCH ₃ ×10 ⁻²
MC G-0.02	1.6	0.9	3.9	1.0	1.2	3.4
MC G-0.11	2.1	2.1	<4.0	1.5	2.0	7.1
MC G+0.693	3.6	2.0	8.7	2.0	2.4	10.0
Fuente	c-C ₂ H ₄ O ×10 ⁻³	CH ₃ CHO ×10 ⁻²	H ₂ CCO ×10 ⁻²	H ₂ CO ×10 ⁻²	H ₂ COH ⁺ ×10 ⁻³	CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH ×10 ⁻²
MC G-0.02	3.7	3.5	0.6	5.3	<3.8	...
MC G-0.11	5.1	2.7	1.5	5.9	<1.2	...
MC G+0.693	6.7	5.7	1.6	2.0	5.3	≤1.6

NOTA- Abundancias relativas de las diferentes moléculas con respecto a la de CH₃OH. Las abundancias de CH₃OH con respecto a la de H₂ son 2.9×10^{-7} para MC G-0.02, 1.1×10^{-6} para MC G-0.11, y 4.5×10^{-7} para MC G+0.693.

5.3.1 Formación de las moléculas orgánicas complejas

En el caso de las MOCs que se estudian en este capítulo, las rutas de formación tanto en fase gaseosa como en fase sólida no son del todo conocidas (Charnley & Rodgers 2005; Halfen et al. 2006). Además, hasta ahora, desde el punto de vista observacional, el conocimiento de las abundancias de las MOCs más complejas se restringía sólo a una fuente (Sgr B2N), que como se mostraba en los perfiles de las líneas tienen muchas componentes en velocidad que hacen difícil su estudio. En esta tesis se han observado estas moléculas en regiones más simples, que permite obtener información de las abundancias de muchas moléculas de manera fiable a la vez en varias fuentes diferentes.

Como se ha dicho anteriormente, se han obtenido abundancias relativas con respecto a la de H₂ muy grandes para estas MOCs, así como unas abundancias relativas con respecto a CH₃OH muy constantes, lo que refuerza la hipótesis de su formación en los mantos de los granos. Las reacciones en fase gaseosa no deberían producir unas abundancias relativas tan uniformes en regiones tan distantes, debido a que dependen fuertemente de la densidad y de la temperatura. Otra prueba de la posible formación de MOCs en fase gaseosa es la observación de H₂CO⁺, ya que la detección de esta molécula en el núcleo caliente de Sgr B2N sugeriría que su posible reacción en fase gaseosa con el H₂CO podría formar el CH₂OHCHO. Como se observa en la Tab. 5.6 donde se presentan también razones de abundancias que comentaremos posteriormente, las abundancia del H₂COH⁺ con respecto a la de CH₂OHCHO es bastante grande en el núcleo caliente, pero en el caso de las nubes de la ZMC, el ión es hasta un orden de magnitud menos abundante que el CH₂OHCHO, lo que sugiere que esta molécula es poco probable que se produzca en fase gaseosa. Además, las abundancias relativas entre estas tres moléculas en las tres posiciones del ZMC son muy similares, sin variaciones debidas a la localización dentro de la zona central de nuestra Galaxia.

Por ello, en las nubes moleculares de la ZMC, la ruta de formación más plausible es en la

superficie de los granos.

5.3.2 Química comparada de las diferentes moléculas. Los isómeros y la saturación de las moléculas.

La explicación más simple para la formación de estas moléculas en los mantos de los granos es la adición de carbonos, seguida de hidrogenaciones y oxidaciones, que van saturando la molécula, al romper los enlaces dobles o triples (Charnley & Rodgers 2005). En la Fig. 5.8 se presenta un esquema de la posible formación de las diferentes moléculas debido a la adición de átomos de O, C y de H al CO. Puede verse como horizontalmente se van incrementando la complejidad añadiendo carbonos y verticalmente hidrógenos u oxígenos. También se han incluido los isómeros más importantes observados, los relativos al glicolaldehído, al etanol y al acetaldehído (dentro de los rectángulos en la figura). En las columnas verticales se comienza con moléculas que contienen dobles o triples enlaces, que debido a la hidrogenación la molécula se va saturando hasta contener sólo enlaces simples.

Por otro lado, existe la hipótesis de que estas moléculas se deben formar por reacciones entre radicales a temperaturas templadas. Pero todavía no se han obtenido resultados para moléculas tan complejas como los aldehídos detectados en el CG (Garrod et al. 2006).

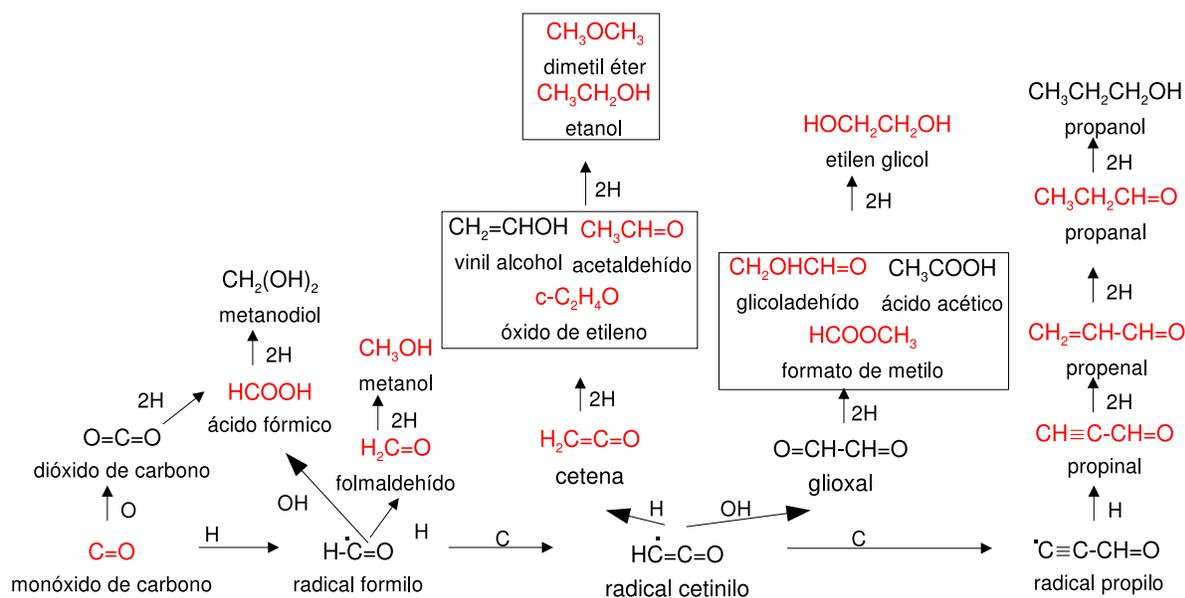


FIGURA 5.8: Posibles rutas de formación de MOCs en la superficie de los mantos de los granos. La complejidad química va aumentando a partir del CO de izquierda a derecha con la adición de C. Desde la base hacia la parte superior se van añadiendo O e H. Las especies dentro de las recuadros son isómeros. Las especies que se han detectado en las nubes moleculares del CG son las que se presentan en rojo.

Después de comprobar que las abundancias relativas con respecto a CH_3OH son muy parecidas, se va a testear la posible formación de las MOCs mediante el uso del esquema de la Fig. 5.8. Para ellos se estudian las abundancias relativas entre moléculas que estén relacionadas químicamente de manera directa, como pueden ser el caso de los isómeros, los pares aldehído/alcohol, o las moléculas con diferentes grados de hidrogenación. Estas abundancias

relativas observadas en el CG y en núcleos calientes se presentan en la Tab. 5.6 (Hollis et al. 2001, 20002, 2004b; Nummelin et al. 1998; Halfen et al. 2006; Ohishi et al. 1996). Para algunas moléculas se han podido utilizar datos medios de varios núcleos calientes observados de manera sistemática por Bisschop et al. (2007).

Los isómeros son otro grupo de moléculas muy interesante, que muchas veces se encuentran con distribuciones espaciales similares. En la tabla, los isómeros se comportan de manera parecida en las diferentes fuente del ZMC, con abundancias relativas que varían entre fuentes menos que un factor ~ 3 . En el caso de los isómeros $c\text{-C}_2\text{H}_4\text{O}:\text{CH}_3\text{CHO}$ también son parecidos a los valores que se observan en núcleos calientes, pero para el resto de los isómeros observados, $(\text{CH}_3)_2\text{O}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y $\text{CH}_3\text{COOH}:\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HCOOCH}_3$, las abundancias relativas presentan variaciones de hasta un orden de magnitud entre los núcleos calientes y las nubes moleculares del CG. En el caso de CH_3COOH sólo se observan límites superiores en su abundancia para las regiones del CG, y estos límites son consistentes con las abundancias de núcleos calientes.

Al estudiar familias de isómeros en núcleos calientes ya se había propuesto que los isómeros $\text{CH}_3\text{COOH}:\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HCOOCH}_3$ podrían producirse por rutas completamente diferentes. CH_2OHCHO se puede formar de forma eficiente tanto en fase sólida (Charnley & Rodgers 2005, Bennett & Kaiser 2007) como en fase gaseosa (Halfen et al. 2006). El HCOOCH_3 no tiene una ruta clara de formación, inicialmente se suponía que se formaba debido a que el CH_3OH_2^+ reaccionaba con el HCOOH , pero se ha demostrado que la reacción produce $\text{CH}_3\text{OCH}_2^+$ (Horn et al. 2004) y, por lo tanto, no se puede producir con eficiencia en fase gaseosa. Para CH_3COOH tampoco existe una ruta de formación clara y, como para sus isómeros, las grandes abundancias de esta molécula incitan a pensar en una formación en fase sólida (Sorrel et al. 2001) o que está muy relacionada con ésta ya que sólo se observan en regiones de formación estelar donde se están evaporando los mantos de los granos de polvo (Remijan et al. 2002). De cualquier manera, la similitud de las abundancias de los isómeros en la ZMC podría indicar que existe una composición de los mantos de los granos similar en esta región, que difiere de la de los núcleos calientes. Esto vuelve a dar fuerza a la hipótesis de una composición “Universal” de los mantos de los granos, pero sólo en las regiones de la ZMC, ya que para moléculas tan complejas como las que observamos ahora la química parece ser distinta.

Por otro lado, la observación de los pares aldehído:alcohol en núcleos calientes muestra como la química favorece los alcoholes reducidos respecto a sus correspondientes aldehídos (Bisschop et al. 2007; Ikeda et al. 2001): el enlace doble que une el C con el O parece que es destruido fácilmente. Se han observado cuatro pares diferentes de moléculas: $\text{H}_2\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{CHO}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, y $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}:\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ (en este caso sólo para MC G+0.693). En las nubes moleculares del CG se han detectado de nuevo con las mismas abundancias relativas que favorecen a los alcoholes de manera muy homogénea dentro de la ZMC, pero con diferencias de hasta dos órdenes de magnitud con respecto a las que se observan en núcleos calientes. Las abundancias relativas $\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ no se diferencian mucho, pero $\text{H}_2\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}$ pueden diferenciarse en un orden de magnitud

TABLA 5.6: ABUNDANCIAS RELATIVAS ENTRE MOLÉCULAS RELACIONADAS QUÍMICAMENTE

razones moleculares	MC G-0.02	MC G-0.11	MC G+0.693	núcleo caliente
$\text{H}_2\text{CO}:\text{H}_2\text{COH}^+:\text{CH}_2\text{OHCHO}$	1:<0.07:0.19	1:<0.02:0.25	1:0.27:1	1:~0.14:0.03
$c\text{-C}_2\text{H}_4\text{O}:\text{CH}_3\text{CHO}$	0.11:1	0.18:1	0.11:1	0.08-0.22:1
$(\text{CH}_3)_2\text{O}^1:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}^1$	1.25:1	0.93:1	0.36:1	3.20:1
$\text{CH}_3\text{COOH}^1:\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HCOOCH}_3$	<0.05:0.29:1	<0.05:0.21:1	<0.035:0.2:1	~0.038:0.019:1
$\text{H}_2\text{CO}:\text{CH}_3\text{OH}$	0.05:1	0.06:1	0.02:1	0.18:1 ²
$\text{CH}_3\text{CHO}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.85:1	0.50:1	0.82:1	1.5E-3:1 ²
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}:\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	>0.54:1	...
$\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$	0.83:1	0.75:1	0.83:1	0.45-1.4:1
$\text{H}_2\text{CCO}:\text{CH}_3\text{CHO}$	1:5.56	1:1.78	1:3.57	1:0.18 ²
$\text{HC}_2\text{CHO}:\text{CH}_2\text{CHCHO}:\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$	1:0.57:2.44	1:1.00:<1.91	1:0.55:2.41	1:0.75:4.68

NOTA- Los valores de la ZMC para los valores con ¹ provienen del Cap. 3. Los valores del núcleo caliente de Sgr B2N se han obtenido de: Hollis et al. (2002, 2004b), Bennet et al. (2005), Halfen et al. (2006) y Ohishi et al. (1996). Además, los valores con un ² son los obtenidos por Bisschop et al. (2007), y son valores medios para algunos núcleos calientes. En este último trabajo, el H_2CCO y el CH_3CHO no provienen del gas molecular caliente como el resto de MOCs, sino de uno algo más templado.

y $\text{CH}_3\text{CHO}:\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ en dos órdenes de magnitud. En el caso de este par, en los núcleos calientes podría pasar que el $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ proviniese de un gas más caliente que del que proviene el CH_3CHO (Bisschop et al. 2007), o que existe una hidrogenación más eficiente en las regiones de la ZMC, como se discutirá a continuación.

Finalmente, en la tabla se comparan las abundancias de las moléculas que se relacionan según el grado de saturación. En estas moléculas se van rompiendo enlaces triples o dobles para formar el siguiente compuesto. En las estructuras con dos carbonos, al hidrogenar dos veces el H_2CCO , se obtiene CH_3CHO en los mantos de los granos. La abundancia relativa de estas dos moléculas es completamente distinta en núcleos calientes con respecto a las nubes de la ZMC. El H_2CCO en núcleos calientes es mucho más abundante que el CH_3CHO , mientras que en la ZMC es el CH_3CHO el más abundante. En estas regiones centrales de la Galaxia la rotura del enlace doble se produce más eficientemente que en núcleos calientes, o quizás las tasas de hidrogenación son más rápidas y/o existe un mayor flujo de H en fase gaseosa.

Para el grupo de aldehídos que contienen 3 átomos de carbonos en su estructura, $\text{HC}_2\text{CHO}:\text{CH}_2\text{CHCHO}:\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$, de nuevo se observan abundancias similares entre las fuentes de la ZMC, pero ahora estos también concuerdan con los observados en Sgr B2N, si se asumen temperaturas de excitación pequeñas (~10 K, Hollis et al. 2004b). Desafortunadamente, en este caso las abundancias de estos aldehídos han sido observadas en una sola fuente, Sgr B2N que está en el CG y la explicación para la similitud entre las dos regiones es que la emisión/absorción proviene de la envoltura que está siendo afectado por choques (Martín-Pintado et al. 1990, Hollis et al. 2004b) y no del núcleo caliente. Esto también ayuda a explicar la similitud de la abundancia relativa del par aldehído/alcohol $\text{CH}_2\text{OHCHO}:\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$. Además, las abundancias de las moléculas más saturadas son

mayores que las no saturadas en las regiones del CG, no sólo para los aldehídos sino también en el siguiente paso de la saturación, la reducción a un alcohol, que ya se ha comentado anteriormente. La detección de los aldehídos más complejos en otros núcleos calientes es fundamental para poder establecer si la adición de carbonos y la hidrogenación funcionan de manera igualmente eficiente en núcleos calientes como en la ZMC.

La abundancias relativas de las MOCs observadas en la ZMC indican que la química que forma todas estas moléculas tienen que estar relacionadas con un proceso común que se está produciendo en todas las zonas. Además, la formación de estas moléculas mediante la hidrogenación del CO para formar H_2CO y a continuación CH_3OH parece ser muy eficiente en la superficie de los granos de polvo (Hiraoka et al. 2004; Watanabe 2005; y Fuchs et al. 2007, enviado). Utilizando esta misma hidrogenación se podrán producir moléculas cada vez más complicadas mediante la adición de carbonos u oxígenos. Como ejemplo de ello, una de las COMs más complejas, el $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ha sido detectado también en cometas por Crovisier et al. (2004).

Como ya se ha comentado a lo largo de esta tesis, la ZMC está más afectada por procesos mucho más energéticos; como la radiación UV, los restos de supernova, los choques, rayos cósmicos; que las regiones del disco. Estos procesos pueden influenciar en la química en fase gaseosa incrementando la abundancia de H, haciendo posible una mayor hidrogenación en los mantos de los granos en el CG. La existencia de una mayor hidrogenación en fase gaseosa también es posible, pero debido a la gran dependencia de estas reacciones a la temperatura y a la densidad, se deberían observar variaciones entre las diferentes fuentes observadas. En particular, se debería observar una dependencia temporal en las abundancias debido a que el grado de hidrogenación dependerá de las escalas de tiempo en las que las moléculas precursoras de las MOCs son eyectadas de los mantos de los granos de polvo. Como ocurre en el Cap. 3 no se observa ningún cambio en las abundancias de las moléculas más saturadas, como $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, lo que demuestra que la química en fase gaseosa posterior a la eyección de las moléculas precursoras de los mantos no es un proceso fundamental en la química de la ZMC.

Otra alternativa a la formación de estas moléculas en los mantos de los granos se puede deber la existencia de los procesos energéticos, que se comentaban anteriormente. Éstos pueden producir la fragmentación de moléculas simples que se han formado por la hidrogenación del CO, como H_2CO o CH_3OH , lo que desencadena nuevas reacciones e hidrogenaciones en las superficies. Bennett & Kaiser (2007) han irradiado una mezcla de CH_3OH y CO a una temperatura de 10 K con electrones energéticos para reproducir el efecto de los rayos cósmicos con energías del orden de los MeV (que como se ha comentado anteriormente es posible que su flujo en el la ZMC sea superior que en el disco). Los rayos cósmicos rompen los enlaces C–H del CH_3OH generando los radicales hidróxido de metilo (CH_2OH) o metoxilo (CH_3O) más un H con suficiente energía para superar barreras de potencial e hidrogenizar al CO y formar HCO. Este radical puede recombinarse con el CH_2OH para formar CH_2OHCHO , o con CH_3O para formar HCOOCH_3 . Los isómeros CH_2OHCHO y HCOOCH_3 se forman de manera muy eficiente, mientras que su otro isómero, el CH_3COOH , no se produce de forma tan eficiente. Esta misma tendencia se observa en las abundancias de estas moléculas en las

nubes moleculares del CG que se han observado en este trabajo. Además, Bennett & Kaiser (2007) observan como el HCOOCH_3 se forma de manera más eficiente que el CH_2OHCHO , siendo este último un orden de magnitud menos abundante que el primero en la muestra analizada, la misma proporción que se observa en la ZMC. Todo esto sugiere que los rayos cósmicos pueden jugar un papel fundamental en la química del CG. De todas maneras, no está claro si la estimación de la abundancia de estas moléculas en los hielos de 1% de $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ con respecto a H_2O , es suficientemente grande como para reproducir las abundancias observadas en la ZMC. En este caso se requerirían abundancias de CH_3OH en los mantos similares a las de H_2O .

En el Cap. 3, se proponía que las MOCs debían de estar produciéndose en los mantos de los granos y que sus abundancias relativas a CH_3OH constantes entre núcleos calientes y nubes de la ZMC podían indicar una composición de los mantos similar. Con estos nuevos datos, ya no se puede aplicar esta similitud, la química de la ZMC, que es bastante homogénea, parece ser diferente a la de los núcleos calientes, posiblemente debido a las condiciones extremas del gas molecular en las regiones moleculares del CG (radiación UV, rayos-X y rayos cósmicos) que afectarán de diferente manera a química que se produce en los mantos de los granos, y como consecuencia a su composición. La hipótesis de una composición “Universal” de los mantos de los granos sólo es aplicable dentro de la ZMC o para las moléculas orgánicas más simples como los alcoholes.

De cualquier manera, estas nuevas detecciones junto con sus grandes abundancias muestran como el CG es uno de los mejores laboratorios para el estudio de las MOCs. En los núcleos calientes, donde estas moléculas fueron detectadas inicialmente, la contaminación debida a líneas espectrales y las grandes funciones de partición de las moléculas hacen que la detección o identificación de nuevas moléculas sea difícil. En la ZMC, la distribución de las MOCs está bastante extendida y estas presentan temperaturas de excitación pequeñas, lo que evita las funciones de partición muy grandes y la gran contaminación entre moléculas que se observa en núcleos calientes. Además, se ha visto como las abundancias de las MOCs de algunas regiones de las nubes moleculares del CG son mayores que las de los núcleos calientes.

5.4 Conclusiones

- Se han detectado las moléculas HC_2CHO , CH_2CHCHO , $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$, CH_2OHCHO , $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$, $c\text{-C}_2\text{H}_4\text{O}$, CH_3CHO , HCCCHO en tres nubes moleculares típicas del centro de nuestra Galaxia.
- De estas moléculas se derivan abundancias muy grandes entre 10^{-10} y algunos 10^{-8} .
- Se observa de nuevo como las abundancias relativas respecto a CH_3OH son constantes en posiciones muy alejadas dentro de la ZMC, lo que refuerza la hipótesis de una composición “Universal” de los mantos helados de los granos de polvo que están siendo eyectados mediante choques en el centro de nuestra Galaxia.
- Las abundancias relativas de diferentes moléculas relacionadas químicamente son también muy homogéneas en todas las regiones del CG y muestran una inclinación importante a la saturación, siendo éstas las moléculas más abundantes.

- Con respecto a la comparación entre las abundancias observadas en las regiones de la ZMC y en los núcleos calientes, se han encontrado diferencias notables, posiblemente debidas a las diferentes historias químicas. Esto es muy probable ya que el CG es uno de los ambientes más extremos en la Galaxia, con procesos muy energéticos, como la posible existencia de flujos de rayos cósmicos, que afectan presumiblemente a los mantos de los granos en la ZMC más que en núcleos calientes.
- Dado el gran número de detecciones de MOCs observadas en las regiones centrales de nuestra Galaxia y a las grandes abundancias derivadas de estas, el CG aparece como uno de los mejores laboratorios para el estudio de moléculas cada vez más complejas.

Parte IV

Del centro Galáctico a otros centros de galaxias

Capítulo 6

En busca de los mejores trazadores químicos para observar regiones centrales de otras galaxias

6.1 Introducción

Hasta ahora, esta tesis se ha centrado en el estudio de la química del centro de nuestra Galaxia. Pero uno de los aspectos fundamentales para estudiar el CG es que éste representa el núcleo de una galaxia más cercano al que se tiene acceso, y por consiguiente el único en el que se pueden hacer estudios químicos detallados de nubes moleculares individuales. En los 500 parsecs centrales de nuestra Galaxia se pueden encontrar nubes moleculares gigantes, afectadas por procesos físicos muy diversos que, se supone, juegan un papel muy importante también en el calentamiento del MI de galaxias externas. Entre otros procesos, es posible encontrar regiones de formación de estrellas muy masivas, afectadas por choques (Martín-Pintado et al. 2001), cúmulos estelares masivos que producen gran cantidad de radiación foto-ionizante afectando a regiones muy extensas a su alrededor (Krabbe et al. 1995; Figier et al. 1999a), emisión de rayos-X duros y emisión difusa en rayos-X muy extensa (Sidoli et al. 2001), y en la zona más interna de la región nuclear se encuentra el mejor candidato a agujero negro súper-masivo (Eisenhauer et al. 2005; Ghez et al. 2005). El estudio detallado de las condiciones físicas y químicas de diferentes regiones afectadas por los diversos procesos que se han mencionado, nos ayudará a establecer referencias químicas y a encontrar los mejores trazadores moleculares de los diferentes mecanismos de calentamiento que dominan tanto la emisión del CG como la de las regiones centrales de galaxias externas (Mauersberger & Henkel 1993; Martín et al. 2006b).

6.1.1 Trazadores moleculares extragalácticos

NGC 253 es la galaxia con un brote de formación estelar que presenta el espectro más rico en cuanto a emisión molecular, tanto por la intensidad de la emisión observada como por el número de detecciones moleculares. Sin embargo, las observaciones extragalácticas miden la emisión molecular que proviene de regiones muy extensas en las que existe la mezcla de los efectos de distintos procesos químicos que existen en su interior (Martín et al. 2006b). Para determinar las propiedades fisico-químicas del gas se utilizan diferentes trazadores molecu-

lares. Como en el MI de nuestra galaxia, el CO y sus isotopólogos son trazadores de la masa total de gas molecular en galaxias externas. La observación de moléculas más complejas como el NH_3 darán una estimación de la temperatura cinética del gas, encontrándose galaxias con gas caliente, frío, o con varias componentes (Mauersberger et al. 2003). Para descubrir los choques se puede utilizar la emisión de SiO o el OCS, que nos dan información de la presencia de choques generados por ondas de densidad, por la formación estelar reciente o por súper vientos galácticos. En cuanto a las regiones de foto-disociación en galaxias, se utilizan varios trazadores como HCO, que aumenta en abundancia para grados de ionización pequeños, la razón CN/HCN , o iones como HCO^+/HO^+ , que mostrarían las regiones donde el grado de ionización es mayor. Para estudiar la existencia de un núcleo activo (AGN) en su interior se utiliza la razón HCN/CO , pero actualmente se utilizan modelos de XDRs, incluyendo la razón HCO^+/HO^+ para intentar estudiar la emisión en rayos-X que emite el núcleo activo.

6.1.2 En busca de trazadores fiables para el estudio de núcleos de galaxias

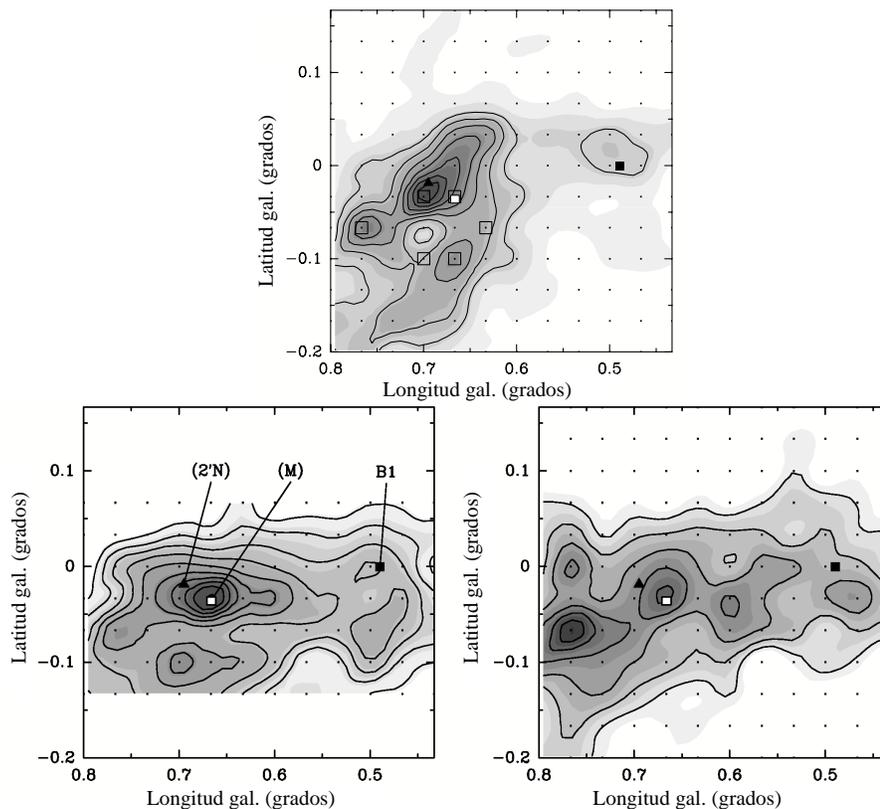


FIGURA 6.1: Distribución del gas molecular en Sgr B2 de Minh & Irvine (2006). En la parte superior se presenta la emisión de HNCO, donde se observa una estructura en forma de anillo. En la parte inferior se presenta la distribución de ^{13}CO , izquierda, y la de HCO^+ , derecha, donde no se observa esa estructura.

Dos aspectos son fundamentales para buscar trazadores químicos en galaxias: el primero tener una abundancia significativa para poder ser detectada fácilmente a grandes distancias, y el segundo tener un espectro relativamente simple, ya que las anchuras de las líneas observadas en galaxias externas son muy grandes (cientos de km s^{-1}). La existencia

de múltiples transiciones separadas relativamente poco en frecuencias, como ocurría con las transiciones $3_{k_a, k_c} \rightarrow 2_{k'_a, k'_c}$ o $J=5_{k_a, k_c} \rightarrow 4_{k'_a, k'_c}$ del CH_3OH , que se observaron en el Cap. 3, puede resultar muy complicado de analizar. En este capítulo se exploran las posibilidades de que el HNC0 sea un discriminador fiable de diferentes procesos físicos que afectan al calentamiento y a la química del MI.

El HNC0 es un rotor asimétrico y ha sido observado en núcleos calientes de protoestrellas masivas con abundancias relativas a H_2 de $\sim 10^{-9}$ (Zinchenko et al. 2000), así como en nubes oscuras y translúcidas con abundancias parecidas (Turner et al. 1999). En el centro de nuestra Galaxia, los mapas de Sgr A de escasa resolución espacial de la emisión de C^{18}O y HNC0 (Lindqvist et al. 1995) muestran claras diferencias en la distribución de ambas moléculas, que no pueden ser explicadas únicamente por la diferencia en excitación, pero sí por una diferenciación de las propiedades químicas de ambas moléculas. Observaciones de Minh & Irvine (2006) de la región de Sgr B2 identifican estructuras en expansión en forma de anillos donde la abundancia de HNC0 aumenta (ver Fig. 6.1 arriba), debido posiblemente a la interacción (choque) entre el anillo en expansión y la nube que lo envuelve. Estas estructuras no se observan en ^{13}CO y HCO^+ (ver Fig. 6.1 abajo izquierda y derecha respectivamente). Se observan diferencias químicas muy similares en la distribución de la emisión de HNC0 a grandes escalas en galaxias externas (Meier & Turner 2005).

6.2 Observaciones y resultados

Se han observado, utilizando el telescopio IRAM 30-m, trece fuentes distribuidas a lo largo de la nube molecular central de nuestra Galaxia. En la Tab. 6.1 se muestran las coordenadas y regiones del CG donde se sitúan cada una de las fuentes (existen varias fuentes de las observadas en capítulos anteriores de esta tesis). La selección de las fuentes se realizó abarcando un amplio rango de procesos físicos, entre los que se encuentran las nubes afectadas por radiación UV de estrellas cercanas, afectadas por formación estelar masiva o por choques. Además se utilizaron las dos posiciones de referencia usadas en el Cap. 5, que están libres de emisión molecular.

Las observaciones se realizaron en el telescopio IRAM 30-m. Se han observado las transiciones moleculares de C^{18}O ; C^{34}S ; ^{13}CS , que se presentan en la Tab. 6.2; y HNC0, que se presenta en la Tab. 6.3. Los receptores SIS se sintonizaron en banda lateral única, con una atenuación de la banda imagen por encima de 10 dB. A las frecuencias observadas el haz del telescopio fue $22''$ (3 mm), $16''$ (2 mm) y $10''$ (1.3 mm). Como espectrómetros se usaron los bancos de filtros de 512×1 MHz en las transiciones de 3 mm, y de 256×4 MHz para el resto de las frecuencias.

La Fig. 6.2 muestra un ejemplo de los espectros observados de cada fuente para una transición de cada molécula. Se han ajustado perfiles gaussianos a todas las transiciones observadas y las intensidades integradas resultantes para C^{18}O , C^{34}S y ^{13}CS se muestran en la Tab. 6.2 y las de HNC0 en la Tab. 6.3. Para las fuentes en las que se puede resolver claramente una estructura de velocidad, se han realizado ajustes de varias gaussianas a los perfiles.

Las abundancias y las temperaturas de excitación han sido calculados usando la

TABLA 6.1: COORDENADAS Y LOCALIZACIÓN DE LAS FUENTES OBSERVADAS

Fuente	α_{J2000}	δ_{J2000}	Región
Sgr B2M ^a	17 ^h 47 ^m 20 ^s 4	-28°23'07"	Sgr B
Sgr B2S	17 ^h 47 ^m 20 ^s 5	-28°23'45"	Sgr B
Sgr B2N	17 ^h 47 ^m 20 ^s 3	-28°22'19"	Sgr B
MC G+0.24+0.01	17 ^h 46 ^m 09 ^s 8	-28°43'42"	cresta
MC G-0.11-0.08	17 ^h 45 ^m 38 ^s 8	-29°04'05"	Sgr A
MC G+0.83-0.18	17 ^h 48 ^m 16 ^s 6	-28°19'17"	Sgr B
MC G-0.02-0.07	17 ^h 45 ^m 50 ^s 6	-28°59'09"	Sgr A
Sgr A* ^a	17 ^h 45 ^m 40 ^s 0	-29°00'28"	Sgr A
MC G+0.18-0.04	17 ^h 46 ^m 11 ^s 3	-28°48'22"	La Hoz

Nota- Algunas de estas fuentes han sido estudiadas en capítulos anteriores, ver Cap. 3. ^a en estas fuentes se han observado posiciones diferentes que se diferenciarán por sus desplazamientos en segundos de arco.

TABLA 6.2: INTENSIDAD INTEGRADA DE LAS TRANSICIONES DE C¹⁸O, C³⁴S Y ¹³CS

Fuentes	C ¹⁸ O		C ³⁴ S		¹³ CS
	1→0	2→1	3→2	5→4	3→2
	109.782	219.560	144.617	241.016	138.739
Sgr B2M	70 (1)	128 (2)	56 (2)	50 (10)	40 (1)
(20'',100'')	27 (1)	32 (1)	14.3 (8)	6.6(9)	8.6(5)
(-40'',0'')	7 (1)	14 (2)	25 (1)	7.2 (6)	8.4 (2)
	48 (1)	72 (3)	12(2)
(20'',-180'')	9.7 (6)	12 (3)	5.2 (6)	<0.6	3.4 (5)
	6.7 (8)	11 (4)
Sgr B2S	52 (1)	87 (1)	27.9 (7)	14 (2)	17.6 (6)
	4.8 (8)	4.4 (0.7)
Sgr B2N	65 (2)	81 (1)	21 (1)	...	48 (8)
Sgr A*					
(-30'',-30'')	15.8 (6)	24 (3)	16 (1)	8 (2)	10.4 (6)
(37'',277'')	19.7 (4)	26 (3)	8.6 (6)	1.5 (8)	4.0 (4)
	11.5 (3)	21 (3)	7.4 (6)	3.8 (8)	6.0 (5)
MC G+0.24+0.01	17 (1)	23 (2)	7.9 (6)	<1.6	4.8 (2)
MC G-0.11-0.08	14.9 (5)	23 (1)	7.8 (3)	2.0 (5)	6.1 (4)
	4.2 (7)	4 (1)
MC G+0.83-0.18	16.0 (5)	15.4 (6)	2.8 (5)	1.5 (2)	3.0 (3)
MC G-0.02-0.07	33 (1)	47 (2)	25.5 (6)	11.7 (7)	16.6 (5)
MC G+0.18-0.04	6.9 (6)	10 (2)	<1.1	<0.8	2.6 (6)
	6.3 (6)	9 (2)	<2.2	<1.6	3.4 (8)

NOTA- Intensidades integradas en unidades de T_A^* ($K km s^{-1}$). Se muestran los números cuánticos y frecuencias (GHz) para cada transición, los valores entre paréntesis indican el error en la última cifra. Varias entradas para la misma fuente indican que existen componentes de velocidad resueltas.

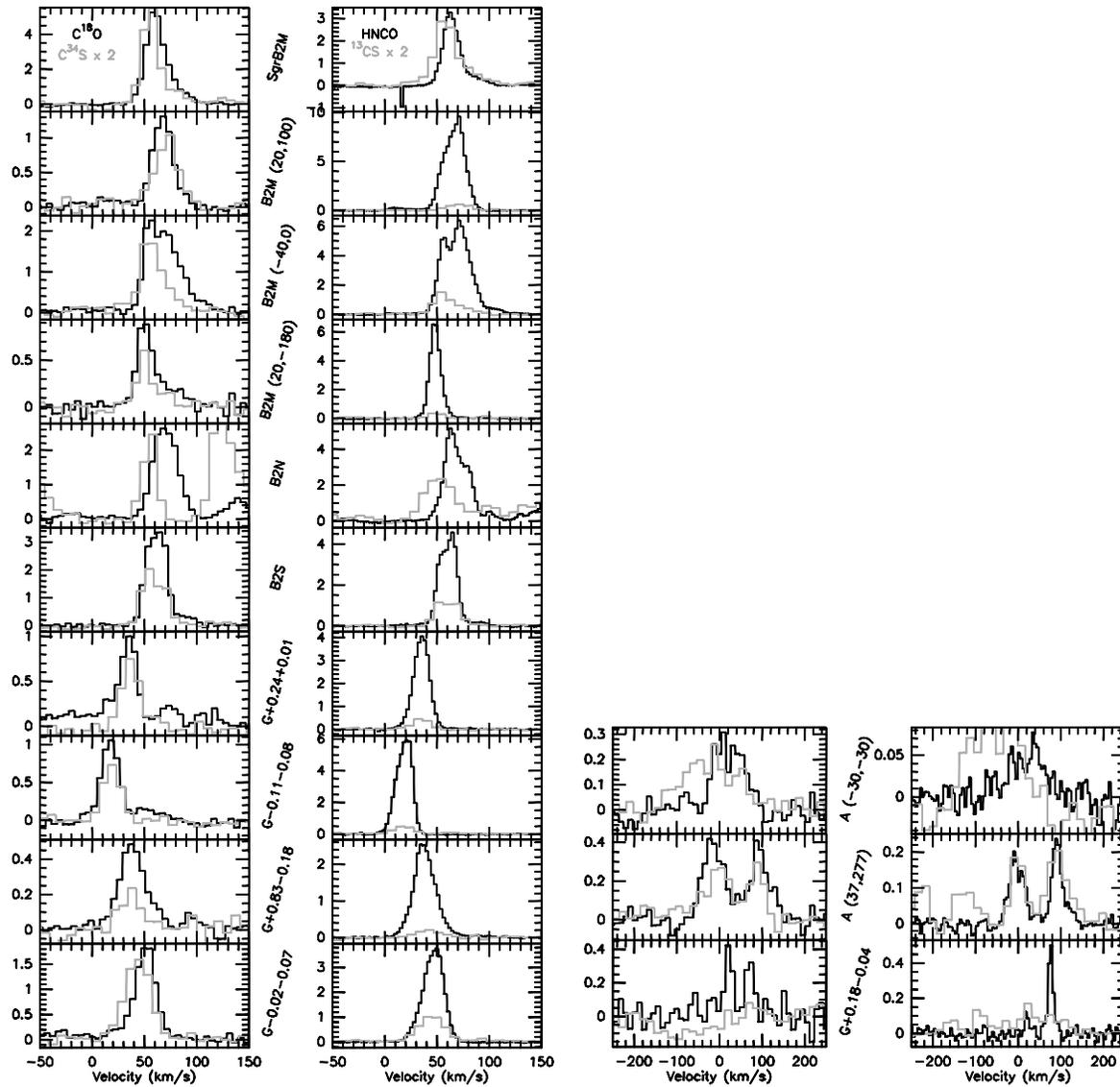


FIGURA 6.2: Muestra de los espectros de las transiciones más intensas de $C^{18}O(2 \rightarrow 1)$, $C^{34}S(3 \rightarrow 2)$, $HNC(5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4})$ y $^{13}CS(3 \rightarrow 2)$ para cada una de las fuentes. La resolución espectral original de 4 MHz se muestra en los paneles de la izquierda, mientras que en los de las tres fuentes de la derecha la emisión se ha suavizado, y tienen una resolución de 8 MHz para tener unos perfiles más claros. La intensidad de las líneas de $C^{34}S(3 \rightarrow 2)$ y de $^{13}CS(3 \rightarrow 2)$ han sido multiplicadas por un factor 2 para obtener una comparación más clara. La escala de temperaturas se muestra en unidades de $T_A^*(K)$.

TABLA 6.3: INTENSIDAD INTEGRADA DERIVADA DE LAS TRANSICIONES DE HNCO

Fuente	5 _{0,5} -4 _{0,4}	6 _{1,6} -5 _{1,5}	6 _{0,6} -5 _{0,5}	6 _{1,5} -5 _{1,4}	7 _{1,7} -6 _{1,6}	7 _{0,7} -6 _{0,6}	7 _{1,6} -6 _{1,5}
	109.905	131.394	131.885	132.356	153.291	153.865	154.414
Sgr B2M	64 (1)	13.7 (8)	76.8(8)	11.3 (9)	18.0 (8)	72 (1)	19 (2)
(20'',100'')	227.2 (8)	6 (2)	226 (1)	5 (1)	8.1 (4)	160 (3)	4.2 (4)
(-40'',0'')	204.4 (5)	14 (1)	201 (1)	10 (1)	14.2 (8)	194 (1)	11.3 (8)
(20'',-180'')	86.2 (2)	1.0 (3)	75 (2)	1.7 (3)	3.3 (3)	70.4 (5)	...
Sgr B2N	132 (5)	20 (2)	112 (3)	18 (2)	66 (2)	111 (4)	36 (5)
Sgr B2S	95.2 (4)	6 (2)	120 (1)	6.4 (8)	9.9 (4)	107 (2)	10.8 (5)
Sgr A*							
(-30'',-30'')	5.4 (6)	...	7 (1)	7.2 (7)	...
(37'',277'')	8.0 (3)	...	9.3 (6)	3.3 (3)	...
	6.8 (3)	...	8.1 (6)	3.2 ^a	...
MC G+0.24+0.01	76.8 (2)	...	78.3 (8)	...	2.1 (3)	45 (2)	...
MC G-0.11-0.08	116.9 (2)	...	112.0 (9)	...	1.8 (2)	76 (2)	0.6 (2)
MC G+0.83-0.18	64.3 (3)	...	45.8 (6)	26.1 (8)	0.6 (2)
MC G-0.02-0.07	93.9 (2)	...	90 (1)	1.5 (2)	...	56 (2)	...
MC G+0.18-0.04	1.6 (2)	2.3 (3)	...
	7.4 (2)	...	3.1 (8)	2.0 (2)	...
	8 _{1,8} -7 _{1,7}	10 _{2,k'} -9 _{2,k'}	10 _{0,10} -9 _{0,9}	11 _{1,11} -10 _{1,10}	11 _{1,10} -10 _{1,9}	12 _{2,k'} -11 _{2,k'}	12 _{0,12} -11 _{0,11}
	175.189	219.733	219.798	240.876	242.639	263.672	263.748
Sgr B2M	31 (5)	7 (1)	40 (2)	16 (2)	44 (2)	22 (9)	57 (2)
(20'',100'')	6.8 (4)	...	48 (4)	...	0.9 (3)	...	16.4 (6)
(-40'',0'')	14.1 (7)	4.1 (5)	94 (1)	6.6 (6)	4.7 (2)	...	45 (1)
(20'',-180'')	1.5 (1)	...	17.3 (5)	14 (1)
Sgr B2N	49 (2)	22 (4)	45 (2)	66 (6)	22 (3)	49 (4)	81 (2)
Sgr B2S	11.0 (3)	2 (1)	63 (1)	7.5 (6)	10 (1)	1.6 (5)	43 (3)
MC G+0.24+0.01	1.3 (3)	...	10.6 (6)
MC G-0.11-0.08	1.2 (3)	...	13.8 (6)
MC G+0.83-0.18	3.3 (5)
MC G-0.02-0.07	2.8 (3)	...	15 (1)

NOTA-ver Fig. 6.2. ^a Se ha extraído del ajuste gaussiano la contaminación estimada debida a una componente de velocidad de CH₃C₂H

aproximación ETL y asumiendo que las fuentes son extensas cuando se comparan con el haz del telescopio. Las densidades de columna derivadas en el análisis se muestran en la Tab. 6.4. En la Fig. 6.3 se muestran los diagramas de poblaciones de los niveles de C¹⁸O, C³⁴S y HNCO. Las temperaturas de excitación rotacionales (T_{ex}) derivadas de estos diagramas son similares en todas las fuentes con valores medios de 10 ± 2 K y 12 ± 3 K, para C¹⁸O, C³⁴S respectivamente. Por consiguiente se ha asumido una $T_{\text{ex}} \sim 10$ K para derivar las densidades de columna de ¹³CS. Solamente HNCO muestra una variación mayor de temperaturas de excitación, entre 10 K y 60 K. Como era de esperar, en los núcleos calientes de Sgr B2, Sgr B2N, Sgr B2M y Sgr B2S, las poblaciones de los niveles se pueden ajustar con dos componentes, una de un gas frío a ~ 20 K que corresponde a la envoltura y otra más caliente a ~ 100 K correspondiente al núcleo caliente. Temperaturas de excitación muy similares se

derivaban para las MOCs en capítulos anteriores, para las nubes moleculares que no están asociadas a los núcleos calientes.

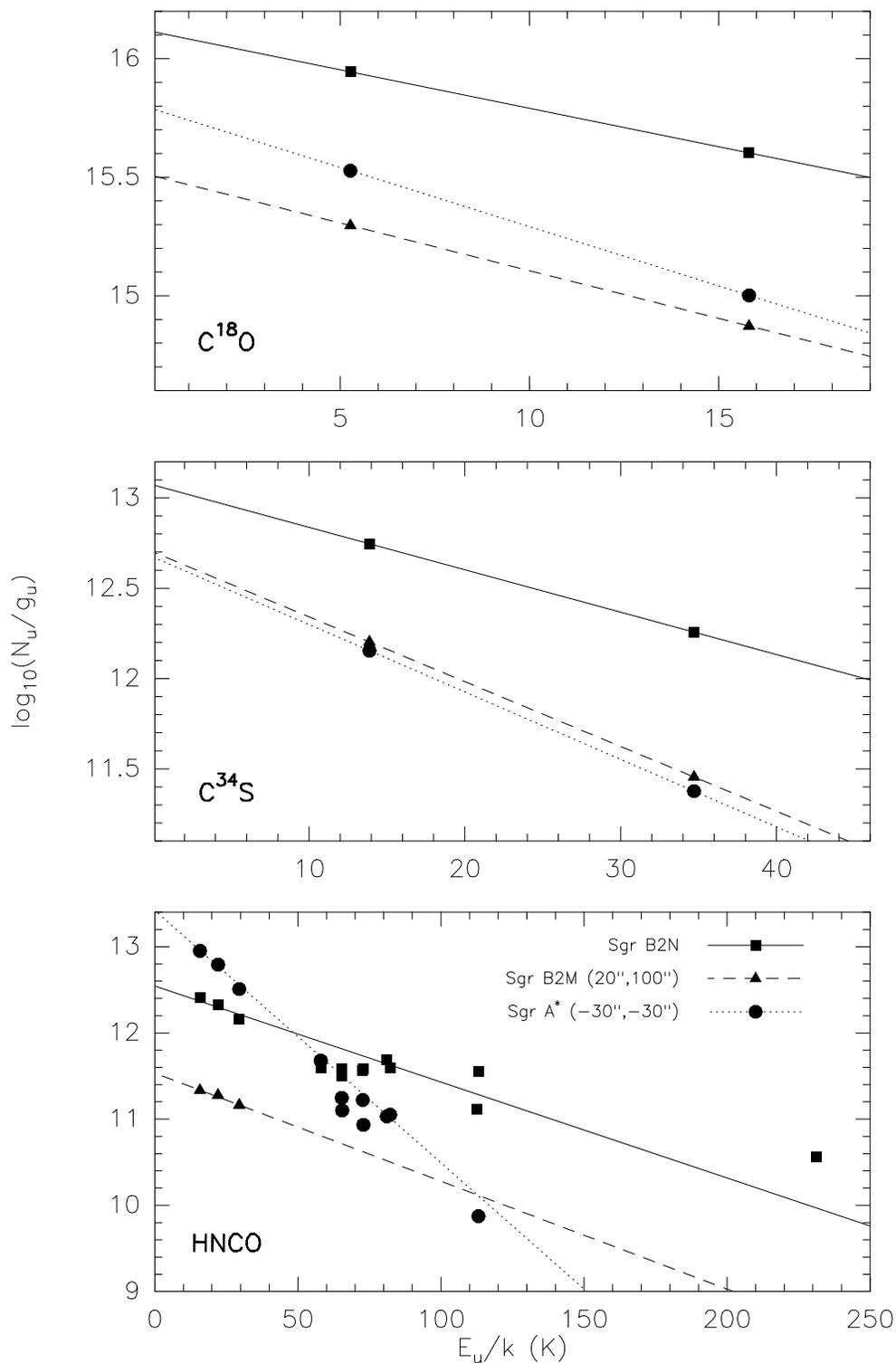


FIGURA 6.3: Diagramas de poblaciones de $C^{18}O$, $C^{34}S$, y $HNC0$ para tres posiciones representativas de la muestra. Diagrama de Martín et al., en preparación.

La Fig. 6.4 se muestran las abundancias de $C^{34}S$, ^{13}CS y $HNC0$ con respecto a

TABLA 6.4: DENSIDADES DE COLUMNA DERIVADAS PARA CADA POSICIÓN OBSERVADA

Fuente	C ¹⁸ O ($\times 10^{15} \text{cm}^{-2}$)	C ³⁴ S ($\times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)	¹³ CS ($\times 10^{13} \text{cm}^{-2}$)	HNCO ($\times 10^{14} \text{cm}^{-2}$)
Sgr B2M	73(2)	19(4)	9.4(4)	13.0(3)
Sgr B2M(20'',100'')	23(2)	5.0(7)	3.2(2)	26(2)
Sgr B2M(-40'',0'')	50(3)	9.1(9)	7.6(8)	24(2)
Sgr B2M(20'',-180'')	8(2)	1.9(0)	1.2(2)	10(1)
Sgr B2N	54(2)	7.5(4)	6.5(2)	23.2(7)
Sgr B2S	50(2)	9(1)	17(3)	13.1(2)
MC G+0.24+0.01	15(1)	3.5(0)	1.8(1)	8.6(2)
MC G-0.11-0.08	14(1)	3.0(6)	2.2(2)	13.0(2)
MC G+0.83-0.18	12(7)	1.1(3)	1.1(2)	7.8(3)
MC G-0.02-0.07	29(2)	8.7(5)	6.1(2)	10.5(2)
Sgr A*(37'',277'')	17(2)	3(2)	1.5(2)	10(2)
	11(2)	2.5(6)	2.2(2)	0.8(1)
Sgr A*(-30'',-30'')	14(2)	5(2)	3.8(2)	1.1(6)
MC G+0.18-0.04	6(1)	<0.4	1.0(2)	4(2)
	6(1)	<0.7	1.2(2)	1.1(2)

H₂. Se ha usado un factor de conversión CO/H₂= 1×10^{-4} de Hüttemeister et al. (1998), y una relación de abundancias de las especies isotópicas ¹⁶O/¹⁸O de 250 como se veía en el Cap. 1. Los isotopólogos de CS muestran abundancias similares para todas las fuentes, con diferencias menores de un factor 4. Sin embargo, no se ha obtenido ninguna detección de C³⁴S en MC G+0.18-0.04, lo que implica una abundancia sorprendentemente pequeña respecto a la sustitución isotópica típica observada a partir de las medidas de ¹³CS. Los límites superiores de la razón C³⁴S/¹³CS $\lesssim 0.5$ es un factor 3 más pequeño que la razón media en el resto de las posiciones, lo que sugiere una deficiencia significativa de ³⁴S en MC G+0.18-0.04.

6.3 Razones de abundancia de HNCO

Como se puede ver en la Fig. 6.4 la molécula de HNCO muestra abundancias muy elevadas, con variaciones de fuente a fuente de un factor ~ 20 , mientras que otras moléculas como ¹³CS o C³⁴S presentan sólo variaciones de un factor ~ 4 . En este trabajo no se ha usado el isotopólogo principal del CS, para evitar problemas de opacidad, por eso es por lo que consideramos directamente la razón HNCO/¹³CS. Estas diferencias en las abundancias de cada molécula se ven más claramente en la Fig. 6.5 donde se muestra la razón de abundancias de HNCO/¹³CS con respecto a la densidad de columna de C¹⁸O. Se puede observar como la razón HNCO/¹³CS muestra variaciones de hasta 1.5 órdenes de magnitud entre fuentes.

La molécula de CS se ha usado comúnmente como trazador de gas denso, típicamente 100 veces más denso que el trazado por CO ($n > 10^4 \text{cm}^{-3}$, McQuinn et al. 2002; Mauersberger et al. 1989). El precursor principal en la formación de CS es S⁺ (a través de reacciones formando CS⁺ y HCS⁺, Drdla et al. 1989). Por ello, aunque la foto-disociación sea el principal mecanismo de destrucción de CS, puede sobrevivir en regiones con campos de radiación UV intensos debido al incremento de S⁺. Además, CS ha sido usado como trazador de la abun-

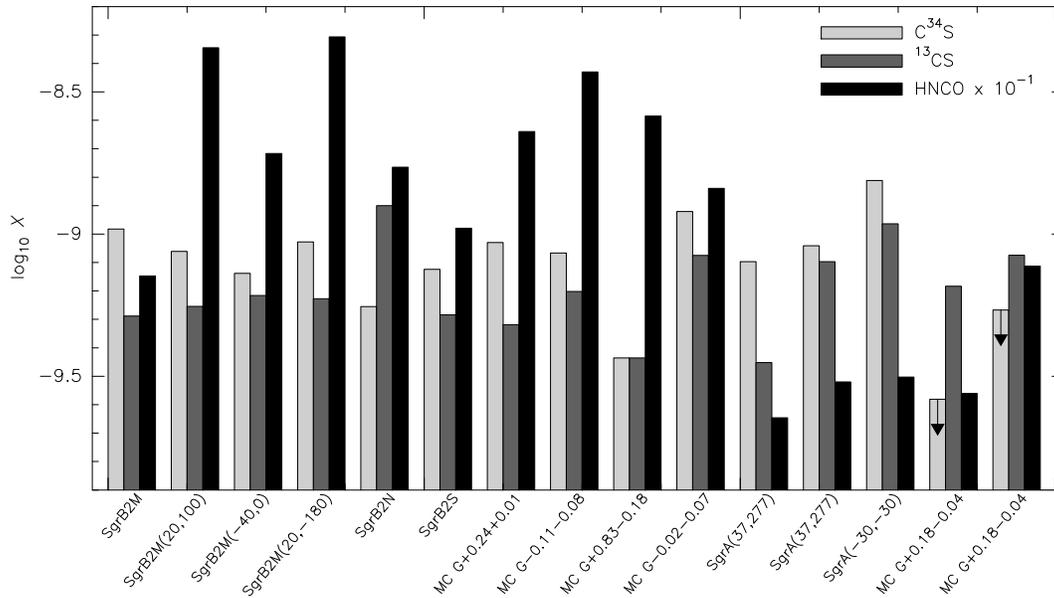


FIGURA 6.4: Abundancias relativas a H_2 asumiendo un factor de conversión de $C^{18}O/H_2=4\times 10^{-7}$. Las flechas representan límites superiores a las abundancias.

dancia de S^+ en PDRs, ya que es difícilmente observable (Goicoechea et al. 2006).

Por otra parte, la molécula de HNC0 traza material aun más denso que el que traza el CS ($n_{H_2} \gtrsim 10^6 \text{cm}^{-3}$; Jackson et al. 1984). Aunque HNC0 puede formarse a través de reacciones en fase gaseosa (Iglesias 1977; Turner et al. 1999) su formación en fase sólida parece mucho más eficiente (Hasegawa & Herbst 1993b). Esta molécula no ha sido observada directamente en fase sólida, pero la detección de OCN^- en granos puede indicar su presencia, debido a que este ion se forma en los mantos helados por reacciones entre HNC0 y NH_3 (Novozamsky et al. 2001). Hay que hacer notar que esta molécula puede formarse por el mismo mecanismo discutido en el capítulo anterior por adición de N y H al CO. La correlación observada entre la emisión de HNC0 y SiO en regiones de formación estelar masiva sugiere que la abundancia de HNC0 en fase gaseosa aumenta debido a la erosión o destrucción de los granos de polvo por choques (Zinchenko et al. 2000).

En la Fig. 6.5, debido a las grandes variaciones de la abundancia de HNC0 con respecto a las otras dos moléculas, las fuentes observadas se distribuyen en tres grupos que corresponden a tres tipos diferentes de nubes.

6.3.1 Nubes moleculares del CG

En la parte superior de la la Fig. 6.5 se encuentran las nubes típicas del CG que muestran grandes abundancias de HNC0, entre 2 y 5×10^{-8} . Este grupo de fuentes incluye las posiciones tales como la envoltura de la región Sgr B2, MC G+0.24+0.01, MC G-0.11-0.08, y MC G+0.83-0.18, desde ahora denominadas nubes moleculares del CG (NMCG). Aunque se encuentren en posiciones muy distantes, estas regiones muestran abundancias de HNC0 relativas a ^{13}CS muy similares, siendo su valor promedio de ~ 68 , mientras que la densidad de columna de $C^{18}O$ varía también poco, en tan sólo un factor ~ 3 . La emisión molecular

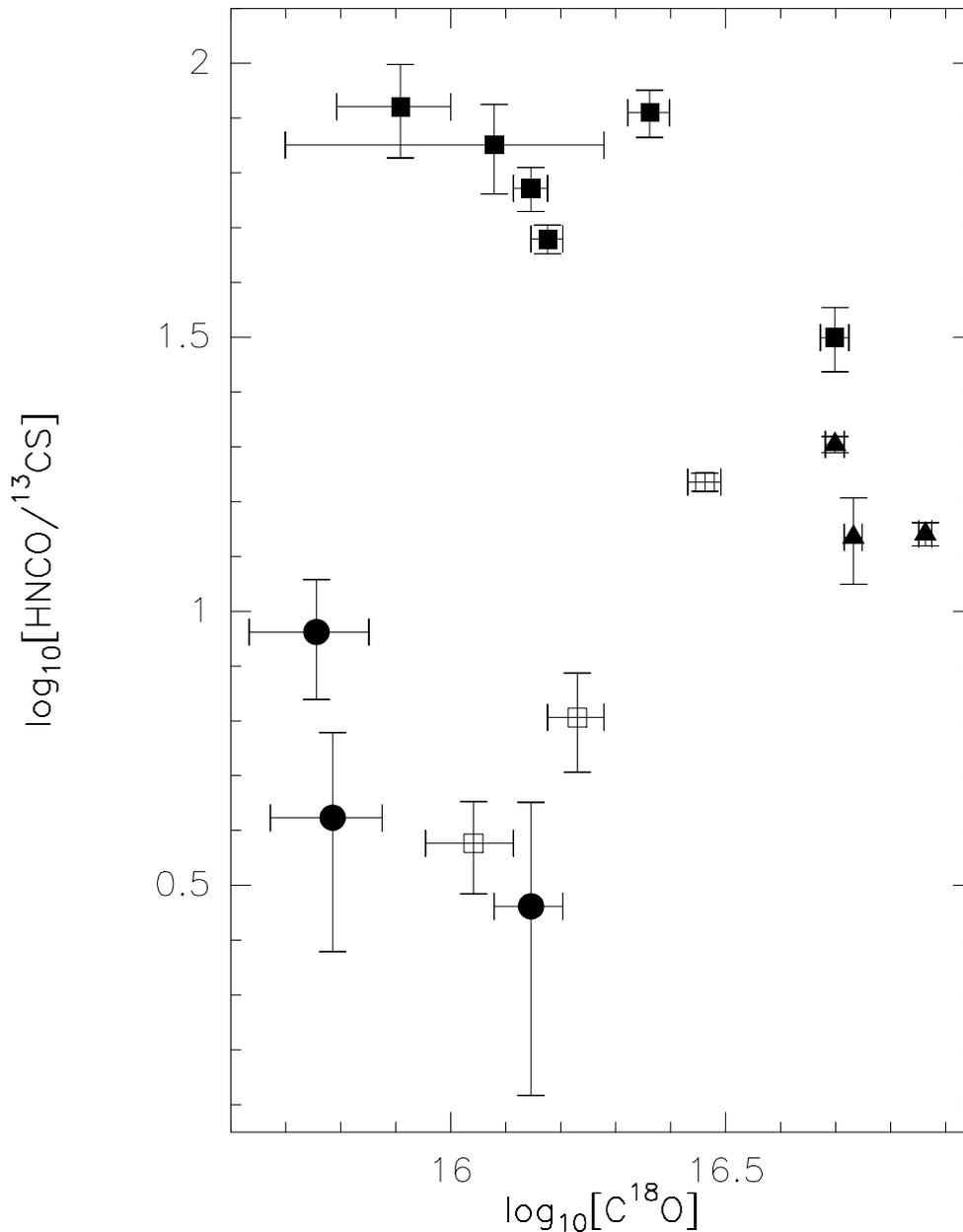


FIGURA 6.5: Razón de abundancias $^{13}\text{CS}/\text{HNCO}$ respecto a la densidad de columna de C^{18}O en escala logarítmica para la muestra de fuentes observadas en el centro Galáctico. Los círculos rellenos representan las nubes donde domina la radiación UV, los cuadrados vacíos las regiones afectadas por choques de tipo-J, los cuadrados rellenos las nubes moleculares típicas del centro Galáctico, los triángulos los núcleos calientes.

de las NMCG está producida principalmente por choques de velocidades moderadas, según los estudios de la emisión de SiO, $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (Hüttemeister et al. 1998; Martín-Pintado et al. 2001) y de las moléculas complejas estudiadas en esta tesis. Por consiguiente, la abundancia de HNCO en esas posiciones puede ser explicada por su eyección a la fase gaseosa por la erosión de los mantos de granos de polvo en las nubes moleculares del CG.

6.3.2 Foto-disociación

En la parte inferior de la figura, se observa un grupo de fuentes con abundancias de HNCO respecto a las ^{13}CS menores en más de un orden de magnitud respecto a las fuentes NMCG. En este caso se trata de las fuentes Sgr A $^*(-30'', -30'')$ y MC G+0.18–0.04 (círculos rellenos en la Fig. 6.5). Estas fuentes tienen en común el estar en la vecindad de los cúmulos estelares masivos del CG y por consiguiente representan los mejores candidatos a ser referencias de química de PDRs en el CG. Desde ahora las denominaremos como nubes UV.

Sgr A $^*(-30'', -30'')$, en la región del disco circunuclear, está situado ~ 1.5 pc de Sgr A * (asumiendo nuestra distancia al CG de ~ 8 kpc), y por consiguiente está fuertemente afectado por la radiación UV que proviene del Cúmulo Central (Krabbe et al. 1995). Como se veían en los Caps. 1 y 3, MC G+0.18–0.04, en la Hoz, está siendo irradiada por las estrellas masivas del Cúmulo del Quintuplete (Figer et al. 1999). La diferencia entre las razones de abundancias observadas de las dos componentes de velocidad a 20 y 70 km s $^{-1}$ son debidas posiblemente a los diferentes grados de radiación que afecta a cada una, ya que la distribución espacial de cada una de las componentes es diferente (Serabyn & Güsten 1991).

En este tipo de condiciones extremas de radiación UV, como los alrededores de los cúmulos de estrellas masivas, se espera que la abundancia relativa de los isotopólogos de CS que son resistentes a los fotones UV aumente, mientras que la molécula de HNCO parece que se foto-disocia rápidamente al acercarse a la fuente emisora de la radiación.

Junto a estas fuentes, donde la radiación UV procedente de estrellas es la razón de la disminución de la abundancia de HNCO, nos encontramos también con la posición Sgr A $^*(37'', 277'')$, conocida como CO 0.02–0.02 (Oka et al. 1998), es una nube muy compacta que parece ser el resultado de la aceleración, calentamiento y compresión del gas por una serie de choques de supernovas de gran velocidad. Aquí la radiación del Cúmulo Central no parece estar calentando la nube ya que está muy lejos, pero el precursor radiativo de choque tipo-J, que se forma debido a que la supernova (Shull & McKee 1979) podría ser la explicación de las pequeñas abundancias de HNCO observadas. En esta hipótesis, la disociación del HNCO se produciría por la radiación UV que se genera en el choque, siendo equivalente a la observada en PDRs.

La media de la razón HNCO/ ^{13}CS en estas fuentes es de $\sim 5 \pm 2$, algo más de un orden de magnitud más pequeña que las NMCG, la abundancia de HNCO/ ^{13}CS medida en el CNL es un factor 20 menor que las de las NMCG. Las observaciones muestran como la razón entre la molécula foto-resistente CS y el HNCO, eyectado por choques y fácilmente foto-disociable, puede ser una herramienta muy potente para discriminar entre regiones afectadas fuertemente por la radiación UV (nubes UV) o aquellas calentadas principalmente por choques, lejos de los campos de radiación UV.

6.3.3 Otras fuentes

En la zona intermedia del diagrama se sitúan con fuentes con razones de abundancias más pequeñas que las observadas en las NMCG, pero significativamente superiores que

las de las nubes UV. Además, estas fuentes muestran unas densidades de columna de $C^{18}O$ que son un factor ~ 5 mayores que en las otras fuentes del CG. Estas fuentes son los tres núcleos moleculares calientes, Sgr B2M, N y S, así como las fuentes MC G-0.02-0.07 y la posición Sgr B2M(-40'',0''). Para este grupo de fuentes se han derivado abundancias relativas a H_2 de 1.2×10^{-8} . Las abundancias observadas anteriormente por Zinchenko et al. (2000) en regiones de formación estelar masiva tienen un valor máximo de 2.5×10^{-9} , un factor 5 menores que las que se observan en los núcleos calientes del CG, y uno mínimo de 2×10^{-10} , menores que las observadas en las nubes UV del CG. En mapas de Zinchenko et al. (2000) ya se muestra que el pico de emisión del HNCO no concuerda con la fuente IRAS en las fuentes G301.12-0.20 y G270.26+0.83, aunque las incertidumbres en la posición son bastante grandes. Este mismo comportamiento ya se había observado en Sgr B2, como se comentó en la Sec. 6.1.2, lo que indica que la molécula de HNCO parece tener abundancias menores en los núcleos moleculares calientes. Existen dos excepciones en la muestra de Zinchenko et al. (2000), Orion-KL y Sgr A, que muestran mayores abundancias de HNCO, 9×10^{-9} y 6×10^{-9} respectivamente, y que se asemejan más a las abundancias observadas en las regiones del CG. La fuente en la región de Sgr A se refiere a una posición a 65'' de MC G-0.11-0.08, con abundancias similares a las que se observan en las otras nubes del CG y la fuente de Orion-KL, cuyas diferencias con los núcleos calientes de Sgr B2 pueden ser debidas al estado evolutivo de este núcleo caliente en particular.

Por otro lado, tenemos MC G-0.02-0.07 donde se observa una abundancia relativa de HNCO parecida a las de las regiones de formación estelar. MC G-0.02-0.07, conocida como la nube de 50 km s^{-1} (Güsten et al. 1981), parece que está envuelta e interaccionando con Sgr A Este, un resto de supernova localizado justo detrás del CG (Zylka et al. 1990; Yusef-Zadeh et al. 1996). De forma parecida a lo que ocurría en Sgr A*(37'',277''), los choques de tipo-J producidos por la supernova pueden ser los responsables de la disminución de la abundancia de HNCO. En cuanto a la otra fuente que presenta una abundancia relativa y densidades similares a la de los núcleos calientes, Sgr B2M(-40'',0''), ésta está situada muy cerca del núcleo caliente Sgr B2M y podría estar afectada por algún proceso relacionado con la formación estelar masiva que se observa en ese núcleo.

6.3.4 El origen de la variación de las abundancias de HNCO en el CG

La abundancia de HNCO derivada de los datos en este trabajo parece ser relativamente constante en las NMCG. Esta constancia en la abundancia es más evidente cuando consideramos la razón $HNCO/^{13}CS$. Como ya se había comentado, la abundancia de HNCO en fase gaseosa indica que está producida, seguramente, por la eyección desde los mantos de los granos debido a choques de velocidades moderadas, como sucedía con otras moléculas orgánicas complejas que se han estudiado en capítulos anteriores.

Se observa como las abundancias de HNCO están afectadas fuertemente por los diferentes mecanismos de calentamiento presentes en núcleos moleculares calientes, restos de supernovas y regiones de foto-disociación. Siendo el coeficiente de foto-disociación de HNCO al menos un factor dos mayor que el de CH_3OH , e incluso ligeramente mayor que el de NH_3 (Roberge et al. 1991), la molécula de HNCO es muy sensible a los campos de radiación UV. Por lo que, mientras el HNCO subsiste en fase gaseosa en nubes moleculares

densas donde están muy protegidas de la radiación, es destruida casi completamente en las regiones sin protección que están siendo irradiadas por campos de radiación UV. Este efecto de destrucción parece que también se produce en las inter-fases entre los choques de supernova de tipo-J y las nubes moleculares, donde la radiación UV generada por el plasma caliente del frente de choque, es capaz de foto-ionizar y disociar el gas en el que está penetrando el choque.

Adicionalmente, las abundancias de HNCO están afectadas en menor medida por la presencia de núcleos densos de formación estelar. Zinchenko et al. (2000) ha mostrado que la emisión de HNCO a través de los núcleos de formación estelar masiva no muestran las alas en la velocidad que se observan en SiO, lo que indica que el HNCO es más abundante en choques de velocidad pequeñas, pero hay un defecto en su abundancia en los choques a grandes velocidades. Zinchenko et al. (2000) explican las pequeñas abundancias de HNCO como resultado de la destrucción de O₂ (importante para la formación en fase gaseosa de HNCO) en los choques de velocidades muy grandes. Pero, tanto la pobre eficiencia en la formación en fase gaseosa de HNCO como lo homogéneo de su abundancia en las regiones del CG, parecen apuntar a la destrucción de la molécula de HNCO por los choques rápidos, como los que provocan los restos de supernovas. Aún más, el campo UV inducido por estos choques (Viti et al. 2002) podría ser importante en la disociación del HNCO.

6.4 Del centro Galáctico a otras galaxias

Para poder establecer si la complejidad química del MI en núcleos de galaxias puede servir para establecer el mecanismo de calentamiento, se necesitan identificar los mejores trazadores para establecer qué química es la que domina en el MI. Los resultados de este trabajo muestran como el HNCO es un buen discriminador entre la química que se deriva de los choques de velocidades pequeñas y aquellas que se derivan de la foto-disociación, que se supone que es un mecanismo importante en los núcleos de galaxias. Esta molécula tiene la ventaja de tener transiciones cerca de las de la molécula de C¹⁸O, permitiendo la fácil obtención de las abundancias relativas a H₂ en una observación. Además, comparada con otros trazadores como CH₃OH, el HNCO muestra unas características espectrales mucho más simples, fundamentales para las fuentes extragalácticas con anchuras en las líneas espectrales de algunos cientos de km s⁻¹.

En la Fig. 6.7 se muestra la razón de abundancias HNCO/¹³CS con respecto a la razón HNCO/C¹⁸O en las fuentes del CG. Esta representación de las abundancias puede ser usada como un diagrama diagnóstico para diferenciar entre los dos tipos de procesos físicos que pueden estar dominando el calentamiento del MI en galaxias con brotes de formación estelar (*Starburst*, SB). En este diagrama las galaxias en las que el MI está dominado por PDRs se dispondrán en la esquina inferior izquierda, mientras que en las que no haya material afectado por la radiación UV, se colocarán en la parte superior derecha, con grandes abundancias relativas de HNCO.

En este trabajo se ha iniciado también la utilización de este diagrama para establecer el mecanismo dominante en el calentamiento y de la química en algunas galaxias. En la Tab. 6.5 se presentan las razones de abundancias de una muestra de galaxias en las que

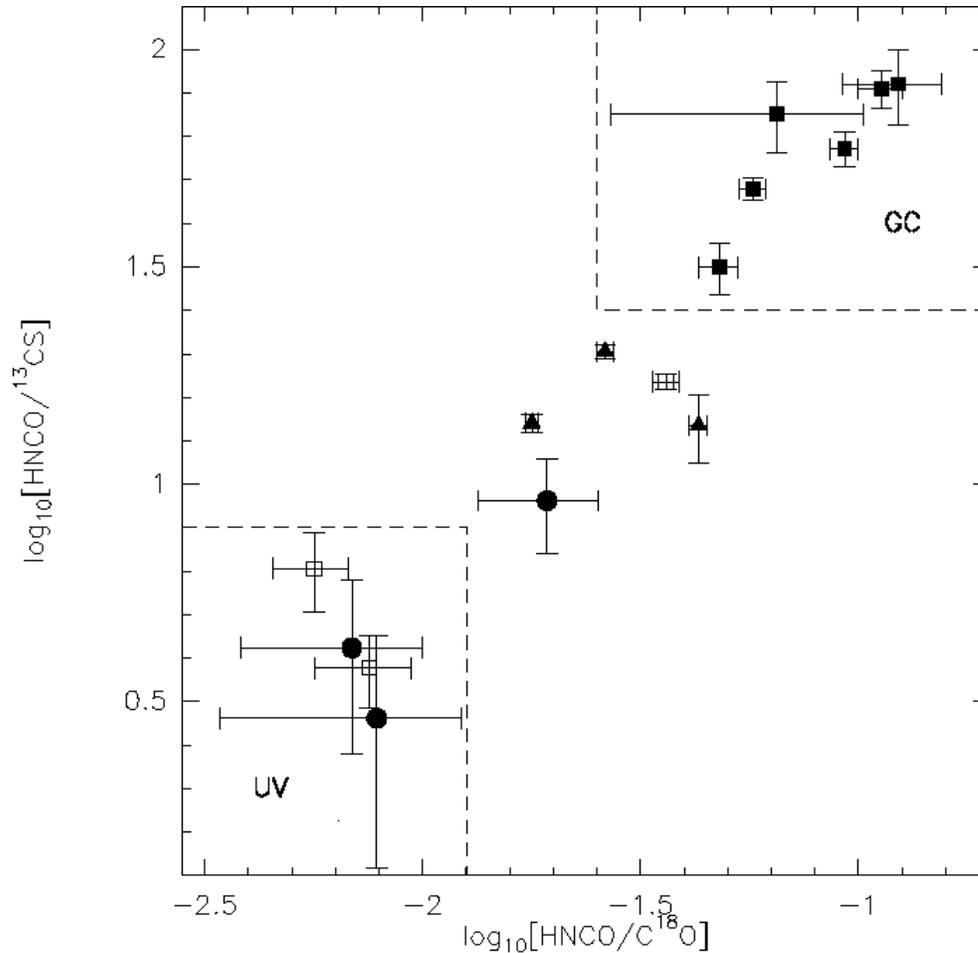


FIGURA 6.6: Razones de abundancia $^{13}\text{CS}/\text{HNCO}$ respecto a la razón $\text{C}^{18}\text{O}/\text{HNCO}$ en escala logarítmica para la muestra de fuentes observadas en el CG. Ver la correspondencia de los símbolos en Fig. 6.5.

existen datos de C^{18}O , CS y de HNCO (Martín et al. 2007, en preparación). Las densidades de columna de ^{13}CS han sido obtenidas a partir de las de CS, asumiendo un abundancia relativa de $\text{CS}/^{13}\text{CS}$ de 40 en todas las galaxias (puede haber variaciones debido a efectos de opacidad). En esta muestra se tienen desde galaxias afectadas por PDRs, como son M82 y IC342, Seyferts como NCG 1068 y NGC 3079, o SB típicas como las distintas componentes de Maffei 2.

Las razones de abundancias de las galaxias se han representado en rojo en la Fig. 6.7 junto con las que se habían obtenido anteriormente en el CG. Esta figura muestra otra vez la razón de abundancias $\text{HNCO}/^{13}\text{CS}$ respecto a $\text{HNCO}/\text{C}^{18}\text{O}$. De la misma manera que ocurre con la nubes moleculares del CG, las galaxias se distribuyen a lo largo del diagrama. Las galaxias en las que el MI está dominado por PDRs están localizadas en la esquina inferior izquierda del diagrama, como por ejemplo, el caso extremo de M82. Mientras, las galaxias cuyo material no está afectado por radiación UV y pero si por choques de velocidades pequeñas, se deben observar en la zona donde las abundancias relativas en los dos ejes son mayores. El otro caso extremo es el de Maffei2c. Las galaxias Seyfert se encuentran en la

TABLA 6.5: RAZONES DE ABUNDANCIAS EN OTRAS GALAXIAS

Fuente	$\text{HNCO}/^{13}\text{CS}$	$\text{HNCO}/\text{C}^{18}\text{O}$
M82 (13'', 7.5'')	<2.2	<0.0002
Maffei 2a	85(29)	0.009(2)
Maffei 2b	342(120)	0.029(3)
Maffei 2c	<228	<0.02
IC342	10(3)	0.00093(3)
NGC1068	31(9)	0.0021(6)
NGC3079	<36	<0.008

NOTA- Razones de abundancias obtenidas de Martín et al., en preparación.

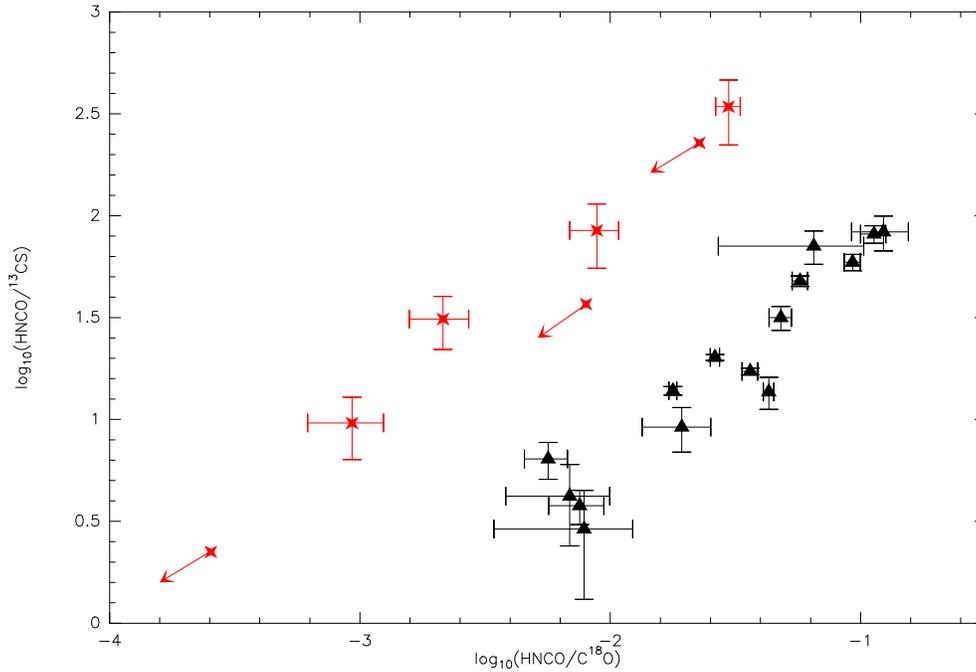


FIGURA 6.7: Razones de abundancia $^{13}\text{CS}/\text{HNCO}$ respecto a la razón $\text{C}^{18}\text{O}/\text{HNCO}$ en escala logarítmica para la muestra de fuentes observadas en el centro Galáctico y para las galaxias que se presentan en la Tab. 6.5. Los triángulos negros representan las nubes del CG y las estrellas rojas las galaxias, en dos de ellas sólo se han derivado límites en la densidad de columna de HNCO y se muestra con la flecha la dirección del límite.

parte central del diagrama indicando que en su núcleo hay una combinación de una parte del MI dominado por regiones de foto-disociación y otra dominada por choques. Esto se observa claramente en el caso de NGC 1068 con una región central dominada por el AGN y un anillo de formación estelar con el MI afectado por choques. Existe una separación apreciable entre las razones de galaxias externas y las regiones del CG. Ésta puede ser debida a efectos de opacidad. Las densidades de columna de ^{13}CS han sido calculadas a partir de la molécula de CS que puede estar siendo afectada de opacidad, lo que produciría una disminución de la razón $\text{HNCO}/^{13}\text{CS}$, acercando los dos grupos de fuentes de la Fig. 6.7. Lo extraño es que la opacidad afecte de igual manera a todos los núcleos de galaxias. Quizás lo que está ocurriendo es que, al estar observando con el mismo haz del telescopio, las observaciones de núcleos de

galaxias son el promedio de una cantidad mayor de gas, con diferentes componentes en lo referente a la excitación. En la región observada en galaxias a lo mejor estamos introduciendo una componente de gas de menor excitación en la que la molécula de $C^{18}O$ pueda estar excitada, mientras que el ^{13}CS no haciendo variar la posición en el diagrama. La Fig. 6.7 puede ser usada como un diagrama de diagnóstico para discriminar entre los dos procesos físicos que dominan la química de las galaxias con brotes de formación estelar (SB) en el núcleo.

6.5 Conclusiones

La conclusión de este capítulo es que la molécula de HNCO puede ser un buen trazador de los fenómenos de calentamiento en los núcleos de las galaxias externas. Además el diagrama de diagnóstico que se representa en la Fig. 6.7 es útil a la hora de diferenciar claramente los tipos de galaxias, las dominadas por choques como Maffei 2 o las dominadas por radiación UV como M82. Este diagrama debe compararse con los que utilizan las especies moleculares HCN y HCO^+ que se usan para discriminar entre fenómenos AGN y SB en núcleos de galaxias (Imanishi, Nakanishi, & Kohno 2006; Krips et al. 2007).

Capítulo 7

Conclusiones y Perspectivas

7.1 Conclusions

From the work presented in this thesis we can draw the following conclusions:

- The abundance of complex organic molecules (COMs) in the Galactic center (GC) are very high. CH_3OH ranges between 1.1×10^{-6} and 2.4×10^{-8} ; $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ranges $\leq 4 \times 10^{-10}$ to 6×10^{-8} ; $(\text{CH}_3)_2\text{O}$ from $\leq 2 \times 10^{-9}$ to 5.6×10^{-8} ; HCOOCH_3 from $\leq 3 \times 10^{-9}$ to 7.5×10^{-8} ; HCOOH from $\leq 3 \times 10^{-10}$ to 4.1×10^{-9} and H_2CO from $\leq 7 \times 10^{-10}$ to 19.5×10^{-9} . These abundances are even higher than those observed in hot molecular cores in the Galactic disk. We have only derived upper limits to the abundance of CH_3COOH .
- The abundance ratios of the COMs related with the alcohol chemistry with respect to that of CH_3OH in the regions of the GC are constant in a factor of 4–8. These are also similar to the abundance ratios derived for hot molecular cores.
- Our abundance ratios do not show the temporal evolution predicted by the chemical models for the formation of MOCs in gas phase. The molecules that are believed to be formed on grain mantles and $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, which could also be formed in gas-phase, show very similar trends in their abundance ratios. The formation of all the COMs related with the alcohol chemistry seems to be produced on the grain mantles.
- In the GC the frequent shocks are the responsible for the ejection of the molecules from the grain mantles, since evaporation is very unlikely because the temperature of the grains is low ($\sim 15\text{K}$).
- After the shocks, the gas cools rapidly, and the molecules are depleted very quickly from gas phase onto the grains. Time scales of $\sim 10^3$ years for the cooling and $\sim 10^5$ years for the sticking of the molecules on the grains are derived for the regions where the high abundances of MOCs are detected.
- Frequent shocks with time scales of $\sim 10^5$ years are needed to maintain the high abundances of the COMs in gas phase. This could be produced by the turbulence observed in the GC.

- The Sickle and the Thermal Radio Arcs show very different trends in the abundances of the COMs. In these PDR regions the COMs are destroyed by the UV photons from the Quintuplet and the Arches clusters. C_2H_5OH is destroyed faster than the CH_3OH explaining the difference in their relative abundances in these regions. A simple photodissociation model with the presence of shocks can explain the observed abundance between these molecules.
- The abundances of the COMs observed in gas phase give us information on the composition of the grain mantles in the GC. This composition seems to be very uniform in the whole GC region. Moreover, the composition on the grain mantles of the alcohol related molecules can be similar in GC and in hot core regions. Hot corino regions show similar trends in the relative abundances between MOCs but with higher abundances of some of the molecules. We propose the existence of an “Universal” grain mantle composition.
- In dark clouds with presence of shocks, the abundances of CH_3OH and SiO are enhanced in the gas affected by the shock precursor by a factor of ~ 4 and in ~ 1 order of magnitude respectively. But this enhancement is larger in the shocked gas in ~ 3 orders of magnitude for both molecules.
- In this shocked gas we can establish if the “Universal” composition observed in the GC and hot cores also applies to dark clouds. We have only obtained upper limits for the more complex molecules studied in the GC for the different stages of the shocks produced by the outflows. Our results are consistent with the idea of a Universal grain mantle composition also for the dark clouds.
- The differences observed in the alcohol chemistry between the GC/hot core regions with respect to that of the hot corinos can not be explained by differences in the grain mantle composition between high mass and low mass primordial molecular clouds. This suggest that the large abundances of some of these COMs like $HCOOCH_3$ in hot corinos must be produced during the star formation process.
- The most complex COMs like the complex aldehydes CH_3CHO , HC_2CHO , CH_2CHCHO , CH_3CH_2CHO and CH_2OHCHO , the alcohol $HOCH_2CH_2OH$ and the molecules $c-C_2H_4O$ and H_2CCO have been also detected in these GC clouds. They show also large abundances, ranging from 2×10^{-10} to $\sim 3 \times 10^{-8}$, in sources very distant within the GC region (by ~ 100 pc).
- These complex aldehydes also show similar relative abundances with respect to that of CH_3OH for the GC molecular clouds. In addition, we obtain similar relative abundances between related molecules like the aldehyde/alcohol pairs and their isomers.
- The complex aldehydes show differences in their relative abundances between the GC regions and the hot core regions. This result show that there is not a “Universal” grain mantle composition for the most complex molecules in the whole Galaxy, but strongly suggest a “Uniform” mantle composition in the whole GC.
- Saturation seems to be very important in the GC molecular clouds with higher abundances for the more saturated molecules; maybe due to the efficient hydrogenation of

molecules on the grain mantles.

- Due to the large number, and large abundance of COMS observed in the molecular clouds within the GC, this region stands out as one of the best sources for detecting and studying even larger complex molecules expected to be formed from the ones that have been already observed.
- The systematic observation of the HNC emission in several selected clouds in the GC shows this molecule to be a very good tracer of the photo-dissociation regions. Its abundance decreases by a factor of 20 between the typical GC clouds and the clouds affected by PDRs.
- We propose observations of this molecule as a diagnostic to discriminate between shock and the PDR as the main heating mechanisms of the molecular gas in extragalactic nuclei. This will be a tool for the future ALMA era.

7.2 Perspectives

I plan to make my first postdoc at the Max-Planck Institute für Radioastronomie (MPIfR) at Bonn Germany, where I expect to work on:

- To extend my study to the more complex organic molecules in different frequency ranges for several GC molecular clouds to have a complete view of the chemistry in the GC region. I will not only study the oxygenated molecules but also the nitrogenated and the sulfured ones that seem to be also very abundant in the GC. For that I will use again the GBT and the IRAM 30-m telescopes (observing time in the IRAM 30-m has been approved) and other telescopes like the MOPRA telescope in Australia and the APEX telescope in Chile (again, time in the MOPRA telescope has been approved). For this project there is a collaboration with groups at the University of California, Los Angeles (UCLA), at the Harvard Center for Astrophysics (CfA) in USA, and at the MPIfR.
- One important result from the Chapters 1 and 6 is the differentiation in the chemistry of the COMs in the PDRs. The changes in the abundances of these molecules can give us information of the degree of dissociation. I plan to obtain detections of the COMs in some PDRs to study the real trend between the variation of the abundances and the UV field in the PDRs.
- The grain mantle composition of very complex molecules are very intriguing and difficult to measure in space for the IR spectroscopy. The only way to understand the grain mantle chemistry is working on Earth laboratories under space conditions. It will be interesting to contact laboratories to try to model the GC conditions to study the composition of the mantles.
- For the understanding of the processes affecting these COMs in hot corinos, we plan to study the inner part of the hot corino in L1448-mm, observing the changes in the abundances of COMs when we are approaching the inner core. For this we will use the interferometers of IRAM Plateau de Bure and the SMA (time in the Plateau de

Bure has been obtained to start this study). This study is a collaboration between Leiden Observatory in Holland, the Laboratoire d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble in France, and the DAMIR.

- The study of the deuterated CH_3OH and H_2CO in the GC regions. The deuteration can give us information about the grain mantle processing and the gas phase abundances by comparing the observed abundances with models of the deuteration in grain mantles and in gas phase. For this study we have already observation time in the MOPRA and IRAM 30-m telescopes. This project is a collaboration between the MPIfR and the DAMIR.
- I'm involved in the large scale study of the molecular complexity in the GC that has just been started using the MOPRA telescope. The 8 GHz bandwidth provided by this telescope is being used to obtain a large scale map that will cover most of the GC inner clouds, from the $l=1^\circ6$ cloud to the Sgr C complex. This study is a collaboration between groups in the University of New South Wales in Australia, the MPIfR, and the DAMIR.
- A detailed study of excitation in the GC molecular clouds will be obtained by fitting the CH_3OH line intensities from the cm to the submm range, using a model with a LVG approximation. During this thesis it has been obtained a huge amount of data for the CH_3OH molecule, very useful to better constrain the temperature and the density in the GC clouds. This project is a collaboration between the MPIfR, the ESO in Germany, the CfA and DAMIR. More observations with the IRAM 30-m, APEX and Effelsberg would be requested.
- The X-ray images provided by CHANDRA and XMM of the GC have shown very prominent peaks of the Fe 6.4 keV lines in the Sgr B2 region. The comparison between these X-ray maps with the molecular emission of SiO, CH_3OH , HNC and other tracers can help us to understand the dynamics of the clouds and the physical conditions that drive the chemistry and produce the Fe 6.4 keV lines.
- Next year the HERSCHEL space telescope will be available with the instruments SPIRE, PACS and HIFI. I'm involved in one of the open time programs, MAPS/O that will provide large scale maps with all the instrument of several molecular and atomic fine structure lines of the two more important star forming regions, Sgr B2 and Orion. I will be involved in the Sgr B2 mapping.
- All the data obtained in the GC regions will be used for the comparison of the chemistry with other galactic nuclei, like M82, ARP220, and NGC253. This project will involve observations with several telescopes and will be run together with people at the CfA.

Apéndice A

Propiedades espectroscópicas de las moléculas orgánicas complejas

Las propiedades espectroscópicas de cada molécula varían según los átomos que la compongan y, sobre todo, por su geometría y estructura. En este capítulo veremos las generalidades de los espectros rotacionales de las moléculas orgánicas complejas (MOCs) que se han observado en este trabajo. Profundizaremos en las características de las moléculas con rotaciones internas.

A.1 Generalidades

En cuanto al espectro rotacional las moléculas que nos encontraremos en el MI se pueden dividir en lineales, simétricas o asimétricas. Dependiendo de la geometría de la molécula encontraremos momentos de inercia diferentes en cada eje, que van a ser importantes para definir la rotación de la molécula. Para estudiar el espectro rotacional se definen las constantes rotacionales, $\frac{h}{8\pi^2 I_x}$, siendo I_x el momento de inercia con respecto uno de los ejes principales de la molécula. En el caso de moléculas lineales nos encontramos con sólo una constante de rotación, B, con el momento de inercia a lo largo del eje de la molécula; en el caso de las simétricas se tienen dos ejes principales, B y C; y en el caso de las asimétricas tres, A, B y C. Las moléculas simétricas se pueden diferenciar en: oblatas (o con forma de tarta) o prolatas (o con forma de puro). Dentro de las asimétricas, se introduce un parámetro de asimetría, parámetro de Ray $\kappa = \frac{2B-A-C}{A-C}$, que nos indica cuándo la molécula va a ser más parecida a una forma prolata $\kappa = -1$ o a una oblata $\kappa = 0$.

En el caso de moléculas lineales los niveles de energía van a estar representados por el número cuántico J, en el de las simétricas por J y K; y en el de las asimétricas se suelen usar J, K_a y K_c o J y τ . Uno de los parámetros fundamentales para poder extraer propiedades a partir del espectro rotacional de las moléculas es el momento dipolar. Las moléculas que no tengan momento dipolar permanente son difícilmente observables. En el caso de las MOCs que vamos a estudiar, las propiedades espectroscópicas más importantes dependen de la simetría y de la rotación interna, de la capacidad que tengan diferentes partes de las moléculas de rotar con respecto al resto de la estructura molecular. Para el estudio de estas moléculas se han usado dos referencias fundamentales: Internal rotation and Inversion

de Lister et al. (1978), y Microwave Spectroscopy de Townes & Schawlow (1955).

A.2 Moléculas con rotaciones internas

Para estudiar espectroscópicamente una molécula es necesario conocer el Hamiltoniano. Si la molécula contiene una rotación interna éste tendrá la forma:

$$H = H_r + H_t + H_{rt} \quad (\text{A.1})$$

Donde H_r es el Hamiltoniano de rotación pura, H_t el de torsión o rotación interna pura y H_{rt} el de la interacción entre ambos. Para calcular este Hamiltoniano se suelen utilizar dos sistemas de referencia distintos. El primero es el método del eje principal (Principal Axis Method, PAM, Fig. A.1 izq.), en el que se utilizan, como ejes de referencia, los tres ejes principales de la molécula; los ejes de la rotación interna en general no coinciden con ninguno de los ejes principales. El segundo método es el método del eje interno (Internal Axis Method,

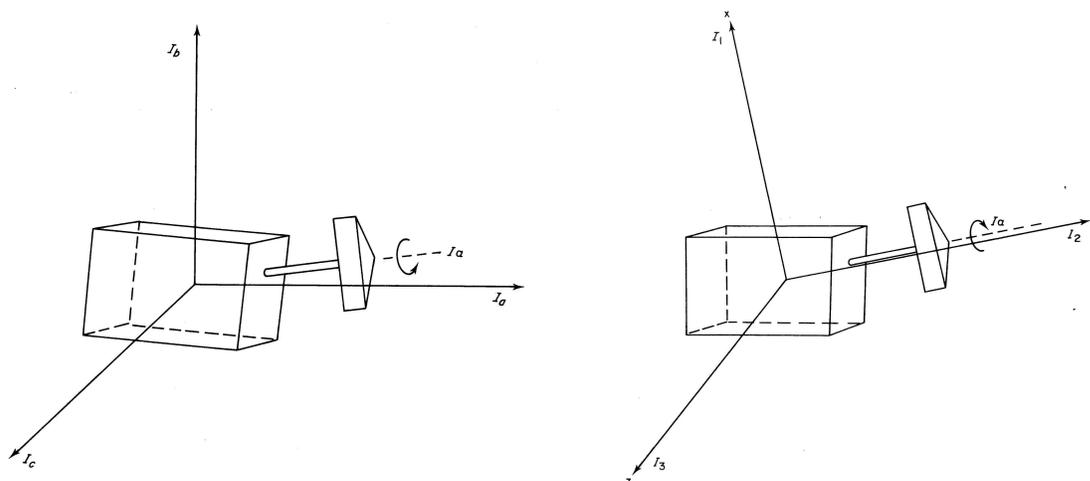


FIGURA A.1: Se presentan los dos sistemas de coordenadas usados para calcular los parámetros de las rotaciones internas. El de la izquierda es el PAM y el de la derecha el IAM. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

IAM, Fig. A.1 dcha.), en donde uno de los ejes que se utilizan para calcular el Hamiltoniano es en el que se produce la rotación o paralelo a él. Los otros dos ejes se eligen ortogonales al primero y entre ellos, de forma que el origen se sitúa en el centro de masas.

El método IAM presenta la ventaja de que los términos de energía de interacción se minimizan, pero tiene la desventaja de que el Hamiltoniano rotacional es más complicado: se introducen términos que tienen productos de inercia. Se utilizan también funciones no periódicas más complicadas que con el otro método.

A.2.1 Barreras de potencial

Las rotaciones que se pueden producir entorno a un enlace, estarán influenciadas por unas barreras de potencial que las moléculas deberán sobrepasar. Estas barreras vendrán

dadas por las diferentes fuerzas internas que intentarán mantener la molécula en las formas más estables.

Las fuerzas internas que entrarán en juego serán:

- Fuerza del enlace entre los átomos que van a sentir el giro. El que exista un enlace doble o triple va a influir para que la posible rotación no se produzca.
- Interacción de electrones emparejados de un átomo de la molécula con otro de los átomos. Ésta producirá que un enlace entre los dos átomos sea menos propenso a una rotación, es decir una barrera de potencial mayor para esa rotación. Se tendría un efecto similar a tener un enlace de mayor fuerza entre dos átomos de una molécula.

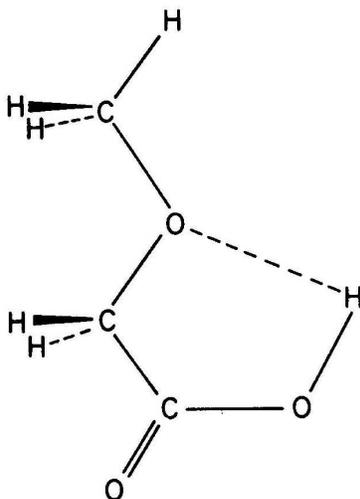


FIGURA A.2: Molécula del ácido metoxiacético con un puente de hidrógeno que produce una estructura más estable. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

- Puentes de hidrógeno. Este tipo de fuerzas se producen cuando un hidrógeno se acerca a otro átomo de la molécula; se suelen formar sobre todo puentes H–C o H–O. Estas uniones entorpecerán el movimiento de rotación y favorecerán unas estructuras respecto a otras. Podemos ver en la molécula de ácido metoxiacético, Fig. A.2, cómo se producirá un puente de hidrógeno entre el O y el H.
- Efectos estéricos. Se producen por la repulsión o la atracción entre dos átomos de la molécula debido a la carga que éstos tengan. Entre hidrógenos habrá una cierta repulsión que va a influir en las posibles rotaciones que se produzcan. Este efecto se podrá ver posteriormente en el caso de $(\text{CH}_3)_2\text{O}$.

A.2.2 Rotación interna en rotores simétricos:

Un prototipo de rotaciones internas de grupos simétricos es el etano (CH_3CH_3), molécula en la que se tienen dos grupos metilos unidos por un enlace covalente. El problema de esta molécula es que no tiene momento dipolar permanente, con lo cual el espectro rotacional no será accesible. La torsión no va a cambiar el dipolo, así que tampoco lo podremos observar.

En cambio sí se ha podido estudiar la rotación en el $\text{CH}_3\text{-CD}_3$, el cambio de H a D produce un pequeño dipolo, y en ese caso sí se puede observar el espectro rotacional.

La energía potencial para la rotación interna con triple simetría, como la que presenta el CH_3CH_3 , tiene tres mínimos en una rotación de 360° del grupo metilo, (Fig. A.3). La barrera de potencial en este caso se puede expresar como:

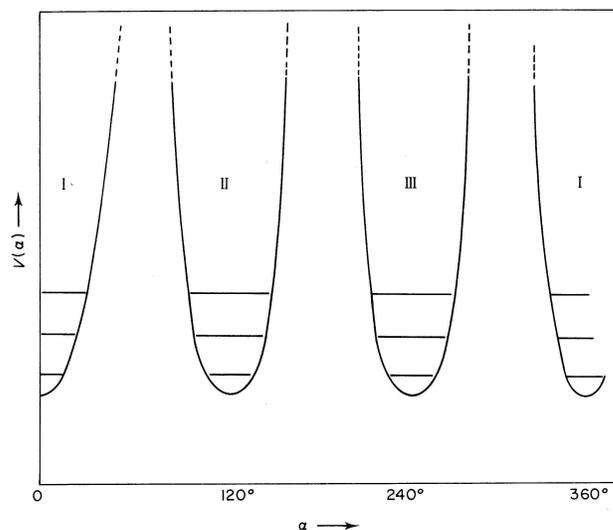


FIGURA A.3: Barrera de potencial para la rotación de un grupo triple como el metilo. Existe un mínimo cada 120° por la simetría del grupo metilo. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

$$V = \frac{V_0}{2}(1 - \cos n\alpha) \quad (\text{A.2})$$

siendo n el número de posiciones de equilibrio (mínimos) que se pueden tener, en este caso serán tres, pero en otros como H_2CCF_2 y F_3CSF_5 se tendrán dos y doce posiciones de equilibrio respectivamente. La altura de las barreras entre los mínimos dependerá de cada molécula.

En el caso de barreras de potencial infinitas los niveles de cada mínimo están triplemente degenerados, y el sistema se representa con tres funciones de onda, una para cada mínimo, ψ_I , ψ_{II} y ψ_{III} . Cuando las barreras de potencial son menores, como en el caso de CH_3CH_3 , se puede pasar de uno a otro mínimo por efecto túnel; así la molécula se puede representar como dos subestados o especies diferentes, un subestado no degenerado A y otro doblemente degenerado E. Los niveles de energía rotacional del CH_3CH_3 estarán desdoblados en estas especies. Las funciones de onda serán combinaciones de las que tenían cada mínimo:

$$\begin{aligned} \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_I + \psi_{II} + \psi_{III}) \\ \psi_{E_1} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_I - \psi_{II} + \psi_{III}) \\ \psi_{E_2} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_I + \psi_{II} - \psi_{III}) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

El momento dipolar para esta molécula es simétrico a cualquier operación con el grupo C_{3v} (rotación del grupo metilo), debido a esto el momento de una transición $\langle i|\mu|j\rangle$ será distinto

de cero (transiciones permitidas) cuando los subestados (i,j) sean iguales, $A \leftrightarrow A$; $E \leftrightarrow E$; $A \leftrightarrow E$. Esta regla de selección, que no permite las transiciones entre especies diferentes, es válida generalmente para todas las moléculas con rotación interna, aunque hay excepciones. Para saber cuál de las dos especies tendrá mayor intensidad en el espectro se deberá observar el peso estadístico de espín para cada una de ellas. Para ello sólo se tendrán que tener en cuenta las funciones de onda de torsión y del espín nuclear, ya que las funciones electrónicas y de rotación son totalmente simétricas. Para el grupo CH_3 existirán ocho posibles funciones de onda del espín nuclear según sea la configuración de los espines nucleares de los tres hidrógenos. Se puede demostrar que el peso de los espines para los dos subestados será el mismo, por lo que la intensidad de las líneas espectrales de las transiciones será similar en ambas especies. En otros casos, como en el del $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, habrá especies en las que las líneas espectrales de unas especies son más intensas que otras, debido a que la estadística de espín es diferente. En las moléculas asimétricas, como veremos en la siguiente sección, la interacción entre la rotación total y la rotación interna va a producir que los niveles A se dividan en dos, de forma similar a la de los doblemente degenerados E. En las moléculas simétricas no se va a producir este efecto. En el caso intermedio se puede tener rota la degeneración y estar los niveles degenerados separados, como se puede apreciar en la Fig. A.4.

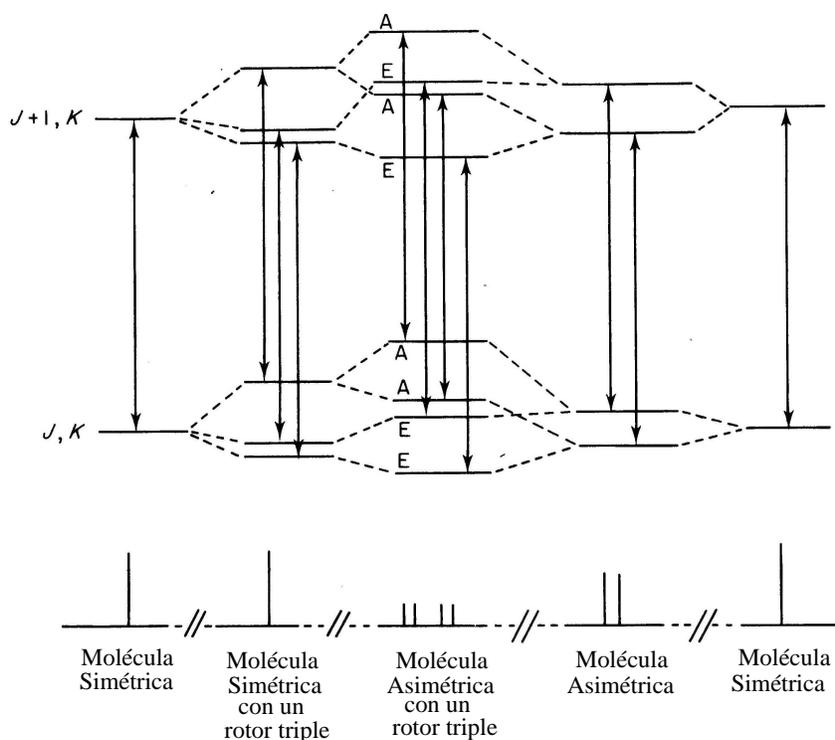


FIGURA A.4: División de los niveles rotacionales para moléculas simétricas o asimétricas en el caso de que exista una rotación interna de un grupo metilo. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

Teniendo en cuenta lo que ocurre en el CH_3CH_3 podemos estimar las variaciones de la barrera de potencial en otras moléculas similares:

- Al sustituir elementos dentro de la molécula, las barreras variarán porque entrarán en juego otras fuerzas entre átomos. Los efectos estéricos son los que más afectan.
- Cambiando en esta configuración de etano un grupo metilo por otro grupo, como por

ejemplo un COX, siendo X otro radical, las barreras de potencial serán algo más débiles (Fig. A.5). En el caso de ser un grupo COO, lo que tendríamos es una molécula con una barrera de potencial mucho más débil por la existencia de otra simetría en el sistema, la cual hace que al rotar 180° nos encontremos otra vez con la misma configuración. El potencial tendrá seis mínimos en vez de tres (Fig. A.5). Casos especiales se dan cuando uno de los metilos se intercambia con los grupos OH, SH o SeH, encontrándose anomalías con respecto al caso general.

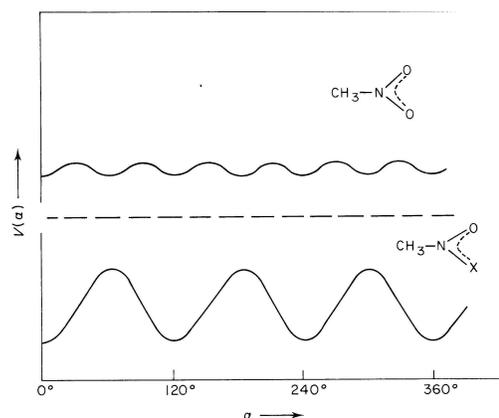


FIGURA A.5: Caso de barrera de potencial para COO y COX. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

- Cambiar el carbono de un grupo metilo por otro elemento también disminuiría las barreras de potencial.

En el caso de múltiples grupos simétricos, lo normal es que los dos grupos en rotación interactúen. El Hamiltoniano en el caso de múltiples rotores sería de la forma:

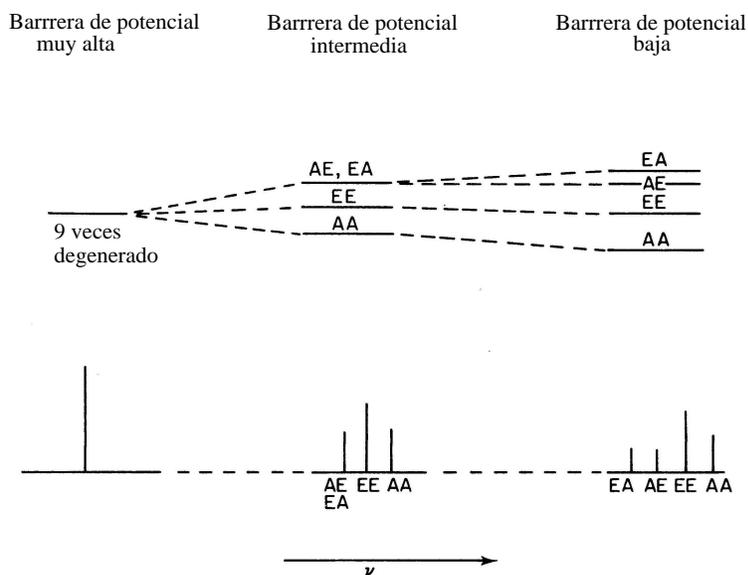


FIGURA A.6: División de un nivel rotacional por la rotación de dos rotores simétricos. Los niveles rotacionales se dividen en cuatro especies, que dependiendo de la barrera de potencial a la rotación se podrán ver separadas en el espectro o no. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

$$H = H_R + H_T + H_{TT} + H_{RT} \quad (\text{A.4})$$

donde H_R es el Hamiltoniano de rotación, H_T el de rotación interna, H_{TT} el de la interacción entre los rotores internos y H_{RT} el de la interacción entre la rotación interna y externa. Los Hamiltonianos H_{TT} y H_{RT} serán menos importantes que los de las rotaciones y se podrán tratar como perturbaciones.

Con dos grupos metilos rotando se tiene un estado nueve veces degenerado, que se podrá representar con cuatro subestados o especies: AA, EE, AE y EA. El subestado AA no está degenerado, los EA y AE están doblemente degenerados y el subestado EE que está cuatro veces degenerado. Las reglas de selección para las transiciones permitidas dependerán de cada molécula. Para moléculas con una barrera de potencial intermedia se encuentra que los subestados AE y EA están degenerados en un solo nivel. En la Fig. A.6 se ve como se desdoblan los niveles y como la estadística de espín daría diferentes pesos de espín a cada uno de los subestados por lo que las líneas espectrales de cada uno tienen intensidades diferentes.

A.2.3 Rotación interna de rotores asimétricos

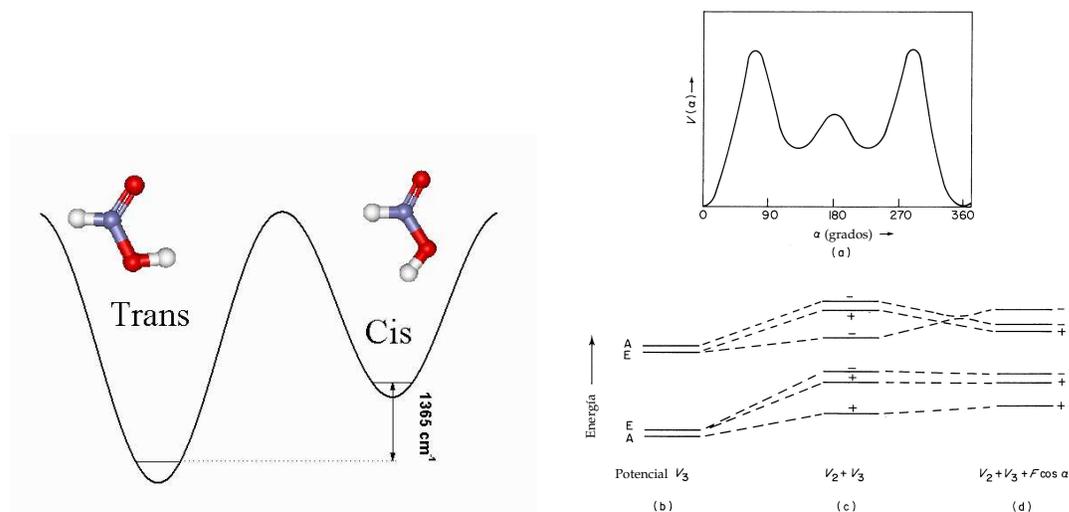


FIGURA A.7: Izq. Configuraciones Cis y Trans para el HCOOH. Dcha arriba: ejemplo de potenciales para rotores asimétricos. Dcha abajo: efecto de la asimetría sobre los niveles rotacionales de una molécula asimétrica con rotación interna. Figura adaptada de Lister et al. (1978).

Nos encontramos ahora con una parte de la molécula que es asimétrica y que rota con respecto al resto. En el caso de los rotores simétricos el momento de inercia no variaba con la rotación debido a la simetría. En el caso del rotor asimétrico sí va a haber variación con la rotación y el cálculo de todos los parámetros va a resultar mucho más complicado. Se suele introducir otro potencial que indica la asimetría, V_2 . Este potencial se suele unir a la barrera de potencial que describen los rotores simétricos pudiendo ser más importante una u otra dependiendo de las magnitudes relativas. Un ejemplo de estos potenciales se muestra en el panel de la derecha de la Fig. A.7.

Estas moléculas suelen dividirse en distintas configuraciones estables: Trans, Cis o Gauche, según esté distribuida la parte de la molécula que puede rotar con respecto al resto. En la configuración Cis el átomo más significativo del rotor (el átomo final o el más pesado) está en el mismo plano y sentido que el resto de la molécula, en la Trans está en el mismo plano y sentido opuesto y la Gauche está fuera del plano. En el caso de la Fig. A.7 Izq. se observa que en la molécula de ácido fórmico la configuración Trans se da cuando el H del grupo OH se encuentra en el mismo lado que el O con doble enlace y la configuración Cis se producirá cuando esté en el otro sentido. En el caso del C_2H_5OH , Fig. A.11 en la Sec. A.3.3, nos encontraremos con un H en posición Trans o Gauche.

En el caso de que la rotación se produzca en una molécula totalmente asimétrica, se suele dividir ésta en dos partes unidas por un enlace en el cual se puede producir la rotación.

A.3 Propiedades espectroscópicas de algunas moléculas

Veremos a continuación una breve descripción de algunas de las moléculas que se han utilizado en este trabajo. Cada una de ellas será un ejemplo de la complejidad de la muestra.

A.3.1 CO y CS

Las moléculas más simples que se han estudiado son las lineales, como el sulfuro de carbono (CS) y el monóxido de carbono (CO). Son moléculas fácilmente observables en el MI. Debido a que las transiciones de la molécula de CO están fuertemente afectadas por opacidad, se suelen utilizar sus isotopólogos más abundantes, ^{13}CO y $C^{18}O$. Los datos de estas moléculas, al tener una bibliografía muy extensa y ser fácilmente estudiadas por su condición de moléculas lineales, han sido obtenidos directamente del catálogo del Jet Propulsion Laboratory. De esas moléculas conocemos sus momentos dipolares, $\mu_a=1.957$ D para CS, $\mu_a=0.111$ D para $C^{18}O$ y ^{13}CO ; y sus constantes rotacionales $B=24495.56$ MHz para CS, para $B=54891.42$ MHz $C^{18}O$ y $B=55101.01$ MHz para ^{13}CO . El momento dipolar que presenta CS es mayor que el de CO, motivo por el cual traza gas más denso. La función de partición utilizada para ellas es la aproximación para moléculas lineales: $Q=\frac{\kappa T}{hB}$. En el caso de CS será: $Q=0.84T_{rot}$, en el de $C^{18}O$: $Q=0.38T_{rot}$ y en el de ^{13}CO : $Q=0.38T_{rot}$.

A.3.2 Metanol- CH_3OH

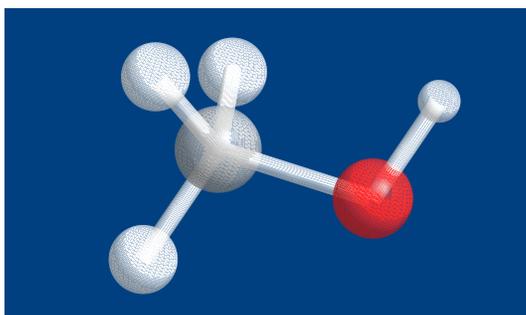


FIGURA A.8: Estructura del CH_3OH .

El alcohol de metilo o metanol, Fig. A.8 es el más simple de los alcoholes. Los primeros trabajos sobre su estructura los realizaron Hughes et al. (1951), Burkhard & Dennison (1951) y Lees & Baker (1968). Los más actuales son los de Anderson et al. (1990, 1992) que estudiaron con detalle su espectro milimétrico y submilimétrico, y de cuyo trabajo obtenemos los datos que vamos a utilizar, tanto los momentos dipolares: $\mu_a=0.885$ D y $\mu_b=1.440$ D; como las constantes rotacionales de la molécula: $A=127484.00$ MHz, $B=24679.98$ MHz, $C=23769.70$ MHz. Es una de las moléculas más simple con una rotación interna obsta-

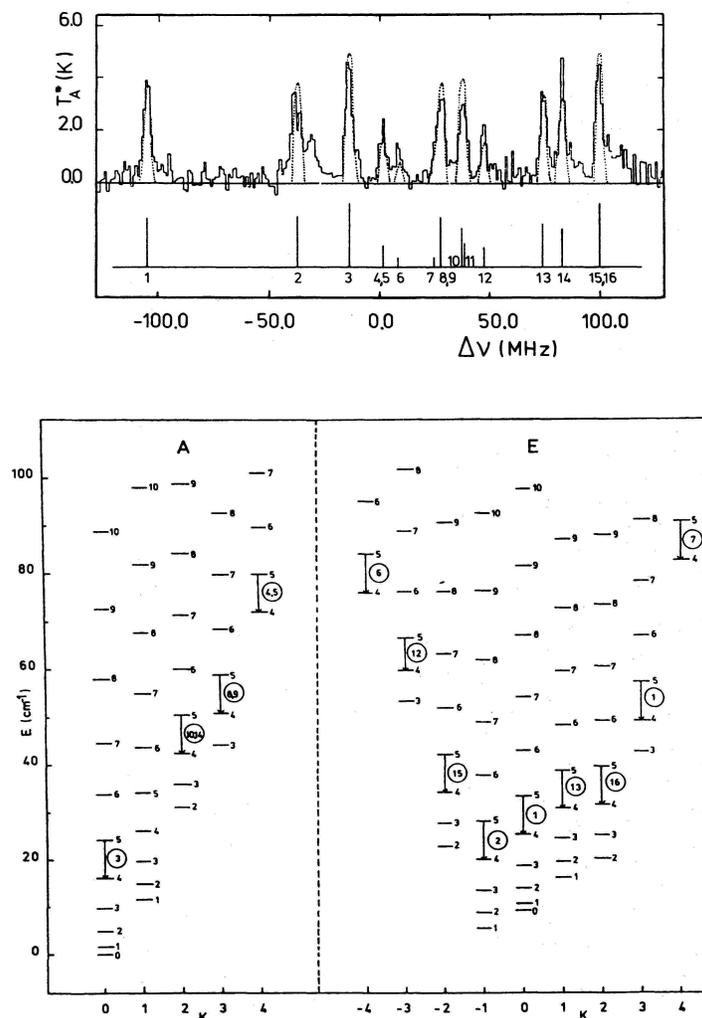


FIGURA A.9: Estructura de niveles del CH_3OH . El nivel fundamental de la especie A está por debajo del de la especie E. Se puede observar una sección del espectro rotacional con las líneas marcadas en el diagrama de niveles para una transición $J=5-4$; tendremos una gran cantidad de líneas de las dos especies siendo muchas veces difícil el separarlas. La intensidad de cada línea dependerá de la población de cada nivel. Figura de Boland et al. (1983)

culizada por las fuerzas internas. El grupo metilo (CH_3) gira con respecto al grupo hidroxilo (OH); su estructura es ligeramente asimétrica ya que el grupo OH no es completamente paralelo al eje de simetría C-O .

En el CH_3OH nos encontramos una triple barrera de torsión del grupo metilo que crea dos subestados en la molécula, el subestado A y el subestado E, que a su vez se subdivide en los

subestados E1 y E2. Estos subestados se pueden representar como dos especies moleculares diferentes A y E, teniendo esta última la posibilidad de tener el número cuántico K con valores tanto positivos como negativos. En la Fig. A.9 podemos observar la estructura de niveles rotacionales de las dos especies y un ejemplo de la cercanía de las líneas espectrales de las transiciones K para J=5→4. Los niveles de la especie A están doblemente degenerados (excepto para K=0), pero esta degeneración se rompe por la asimetría de la molécula, por lo que también se tendrán los dobletes A+ y A- (Lees & Baker 1968). Este desdoblamiento es análogo al del doblete K que tienen las moléculas rígidas asimétricas, es por ello que hay autores que utilizan directamente los dobletes K. En el nivel fundamental, la especie E se encuentra 10 cm^{-1} por encima del nivel de la especie A (Burkhard & Dennison 1959)

En esta molécula existen gran cantidad de transiciones permitidas, debido a la existencia un momento dipolar significativo tanto en el eje *a* como en el *b*. La función de partición que se usa en este trabajo es la aproximación de Menten et al. (1986) $Q = 1.28T_{\text{rot}}^{1.5}$, en la cual ya se tiene en cuenta la existencia de las dos subespecies (ver Apéndice B).

$^{13}\text{CH}_3\text{OH}$

El isotópologo ^{13}C del metanol presenta una estructura muy parecida a la del CH_3OH (Hughes et al. 1951; Xu & Lovas 1997). Este isotópologo permitirá conocer la razón isotópica $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, y en nuestro caso nos ayudará también los efectos de la opacidad en las transiciones de CH_3OH , puesto que esta razón isotópica ($^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$) es conocida en el CG. Sus momentos dipolares son: $\mu_a=0.899\text{ D}$ y $\mu_b=1.440\text{ D}$, sus constantes rotacionales: A=127527.40 MHz, B=24083.50 MHz, C=23197.00 MHz.

A.3.3 Etanol- $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

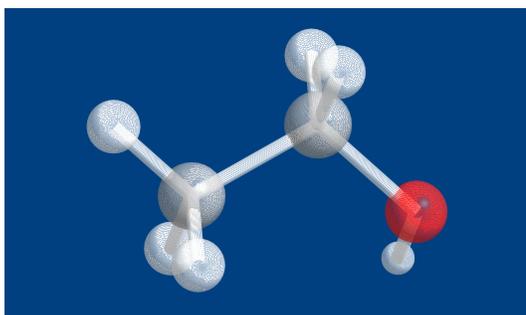


FIGURA A.10: Estructura del $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$.

Los primeros estudios espectroscópicos del $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, Fig. A.10, los realizaron Sasada et al. (1971), y uno de los estudios más recientes de su espectro milimétrico es el de Pearson et al. (1995,1997), que midieron los momentos dipolares; $\mu_a=0.046\text{ D}$ y $\mu_b=1.438\text{ D}$, y las constantes rotacionales; A=34891.77 MHz, B=9350.68 MHz y C=8135.23 MHz.

En esta molécula asimétrica con forma prolata tenemos dos rotaciones internas, una del grupo metilo, que es simétrica, y otra del grupo hidroxilo, que es asimétrica. La rotación del grupo hidroxilo presenta una barrera de potencial intermedia con tres mínimos (Fig. A.11), el más pequeño representa la configuración Trans, y los otros dos mínimos la Gauche. El subestado Gauche tendrá una conformación simétrica (Gauche+) y otra antisimétrica

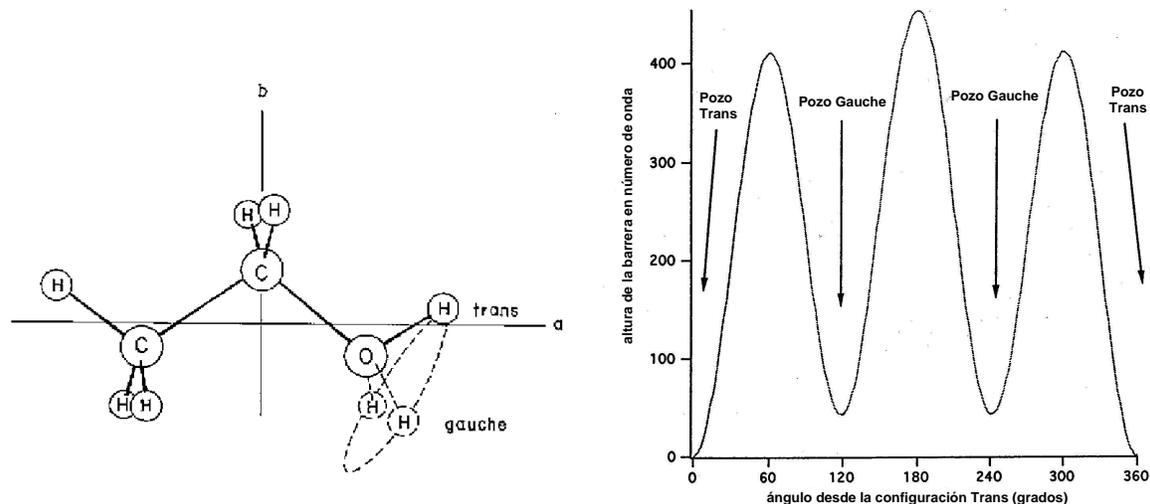


FIGURA A.11: Izq. Rotación del grupo OH del C_2H_5OH en la que se pueden ver las conformaciones Trans y Gauche. Drcha. Las barreras de potencial para el C_2H_5OH . Figuras de Zuckerman et al. (1975) y de Pearson et al. (1995).

(Gauche-); por efecto túnel se podrá pasar de una a otra, pasando el hidrógeno de un lado a otro del plano que forma el resto de la molécula. El subestado Trans es menor en energía, lo suficiente como para que sus niveles inferiores no estén afectados por una posible interacción con los del subestado Gauche. En cambio para niveles superiores del Trans y para todos los niveles del Gauche se tendrán que tener en cuenta las perturbaciones entre niveles. Se puede ver la diferencia en las energías en la Fig. A.12.

El desdoblamiento de estos niveles en subestados A y E, producidos por la rotación de grupo metilo con respecto al resto de la molécula, tiene una diferencia muy pequeña en frecuencias, menos de 1 MHz, y por ello son difíciles de resolver. En ocasiones en las medidas de laboratorio los subestados A y E se puede resolver en el Trans, pero casi nunca en el Gauche (Pearson et al. 1997). Esta separación no ha sido observada todavía en el espectro milimétrico.

La función de partición que se ha utilizado para esta molécula es la aproximación de Pearson et al. (1997):

$$Q = T_{\text{rot}}^{1.5} [3.27 + 3.34e^{-56.89/T} + 3.34e^{-61.54/T}] \quad (\text{A.5})$$

en donde se presentan las contribuciones de los tres posibles subestados Trans, Gauche+ y Gauche-. En nuestro caso podremos tomar sólo la primera parte de la ecuación como aproximación, puesto que la temperatura de excitación es baja y sólo se excita la especie Trans.

A.3.4 Dimetil éter- $(CH_3)_2O$

Se han hecho numerosos estudios en el laboratorio de esta molécula. Los primeros fueron llevados a cabo por Blukis, Kasai & Myers (1963), y un estudio posterior del espectro de microondas lo realizaron Lovas, Lutz & Dreizler (1979). Posteriormente Neustock

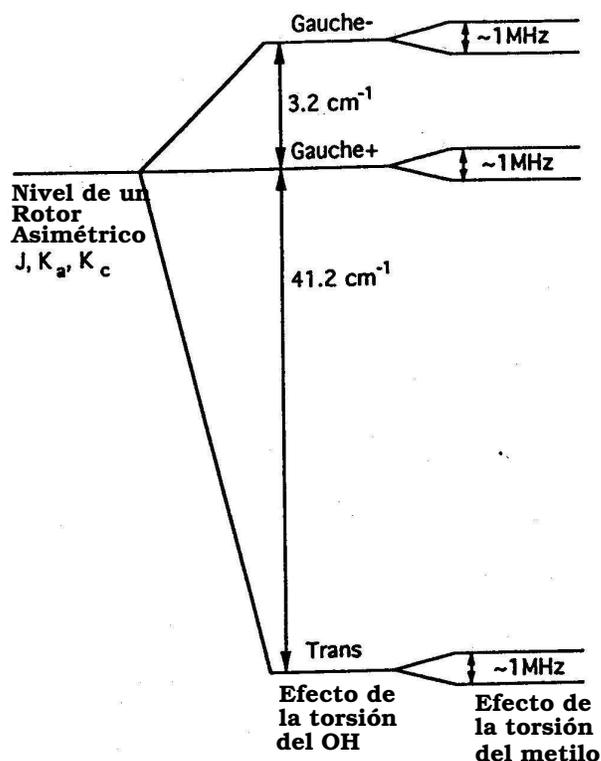


FIGURA A.12: Un nivel del C_2H_5OH dividido por las rotaciones internas, tanto la del OH como la del CH_3 , la separación que produce esta última es muy pequeña. Figura de Pearson et al. (1995).

et al. (1990) ampliaron el espectro del rango milimétrico, y el estudio más actual es el de Groner et al. (1998), del que hemos obtenido la mayoría de los datos, como los momentos dipolares; $\mu_b=1.302$ D, y las constantes rotacionales; $A=38788.20$ MHz, $B=10056.50$ MHz, $C=8886.80$ MHz.

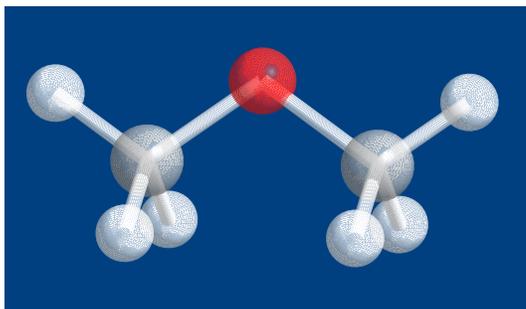


FIGURA A.13: Estructura del $(CH_3)_2O$

El $(CH_3)_2O$, Fig. A.13, es una de las moléculas más simples con dos rotores internos: dos grupos metilos pueden rotar alrededor de sus enlaces C-O. La molécula es casi simétrica prolata ($\kappa=-0.922$) con una simetría C_{2v} (un átomo o estructura unida a dos radicales iguales), por la unión del O con los dos carbonos y $C_{3v} \times C_{3v}$ (dos estructuras simétricas con tres radicales iguales cada una), teniendo en cuenta los dos grupos metilos. Un ejemplo

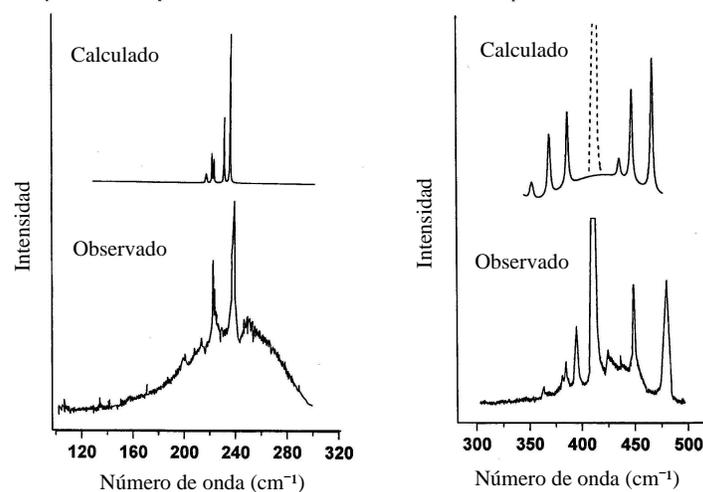


FIGURA A.14: Espectro obtenido a partir de cálculos *ab initio* sin tener en cuenta las fuerzas estéricas (líneas continuas en la parte superior de los paneles), comparado con el observado (parte inferior de los paneles). En el panel de la izquierda se observa que la posición en número de ondas de las líneas calculadas no concuerda con las observadas. En el panel de la derecha se puede ver como se pierden líneas espectrales. La línea punteada aparece al introducir las fuerzas estéricas. Figura de Senent et al. (1995).

interesante de la importancia de los efectos estéricos en la rotación se puede observar en esta molécula. Existirá una interacción entre los hidrógenos de los diferentes grupos metilos al rotar, cuando se estén acercando se producirá una separación de los grupos metilos produciendo una flexión en la molécula. Se puede observar en la Fig. A.14 (Senent et al. 1995) cómo si no se supone esta flexión en el espectro faltarían algunas líneas (línea continua en la parte superior de los paneles), además de que otras estarían desplazadas. Teniendo en cuenta la flexión, el espectro que se calcula es más parecido al observado en microondas.

Las rotaciones y sus interacciones producen cuatro subestados que se denominan AA, AE, EA y EE. La separación entre las transiciones de los diferentes subestados es bastante pequeña ya que la barrera de potencial es muy alta, produciéndose muchas veces su solapamiento. Los diferentes subestados de torsión tienen diferentes pesos de espín. En AA el peso del espín es 6 ($K_a K_c : pp \leftrightarrow ii$) y 10 ($K_a K_c : ip \leftrightarrow pi$), en el EE es 16, en AE es 2 ($K_a K_c : pp \leftrightarrow ii$) y 6 ($K_a K_c : ip \leftrightarrow pi$), y en el EA es 4. Como vemos el peso del espín depende de la paridad de los números cuánticos $K_a K_c$, que puede ser $pp \leftrightarrow ii$ o $pi \leftrightarrow ip$, donde p y i significan par o impar.

El estudio de estas moléculas en las que se tienen diferentes pesos del espín se tiene que hacer cuidadosamente, ya que las intensidades de las líneas que se obtienen en un espectro van a estar afectadas por el peso del espín de cada especie (ver Fig. A.15). En nuestro caso, para calcular de la densidad de columna, habrá que tener en cuenta la función de partición y la degeneración de espín, Ec. 3.3. La dificultad aparece a la hora de definir el cálculo de la función de partición. Hay diferentes formas de hacerlo para el $(\text{CH}_3)_2\text{O}$, algunos autores no tienen en cuenta los pesos de espín y toman la intensidad total de las cuatro especies juntas. En otros como Groner et al. (1998), $Q=91.627T_{\text{rot}}^{1.5}$, se calcula a partir de la función de partición de las moléculas asimétricas simples (Townes & Schawlow

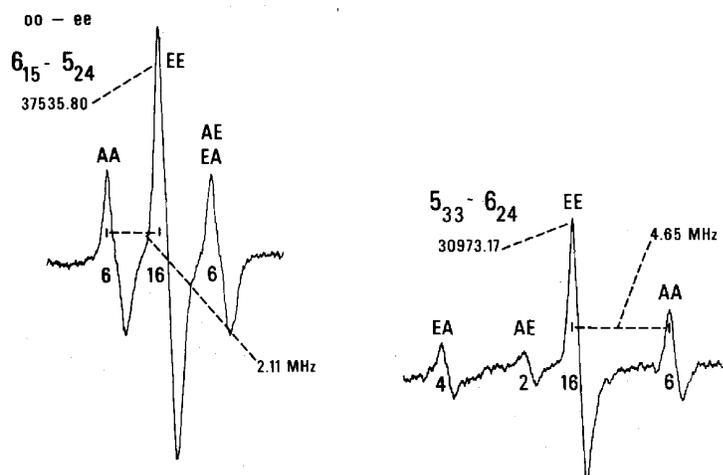


FIGURA A.15: Algunos ejemplos de líneas espectrales medidas en el laboratorio para las diferentes especies. Se puede apreciar como la intensidad de las líneas varía según la degeneración de espín. Figura de Clark et al. (1979).

1955), pero multiplicando cada nivel por su degeneración, teniendo en cuenta la degeneración del espín. Además habrá que dividir esta función por el grado de simetría general para el grupo C_{2v} que es 2.

Utilizando esta función de partición, se deberá tener en cuenta la degeneración del espín, g_i , cuando se calcule la densidad de columna total. Si se tiene una línea espectral para sólo uno de los subestados, se deberá usar la degeneración correspondiente, y si se tienen los subestados solapados se debe usar la suma de las degeneraciones, $g_i=2+4+6+16=28$ en el caso de que $K_a K_c$ sea $ii \leftrightarrow pp$ o $g_i=4+6+10+16=36$ cuando sea $pi \leftrightarrow ip$.

A.3.5 Formato de metilo-HCOOCH₃

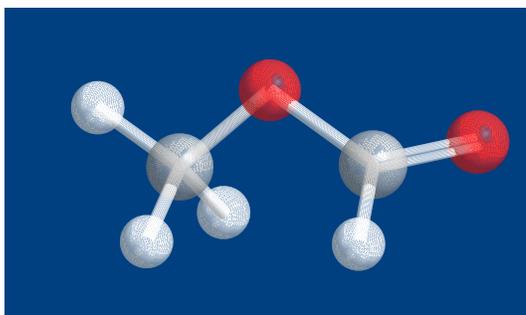


FIGURA A.16: Estructura del HCOOCH₃.

Los primeros estudios de la estructura de la molécula de HCOOCH₃ fueron realizados por O'Gorman et al. (1950) y Curl (1958); Bauder (1979) presentaron su espectro microondas. El espectro milimétrico y submilimétrico se estudia en Plummer et al. (1984), para la especie A y en Plummer et al. (1986), para la especie E. El estudio más actual es el realizado por Oesterling et al. (1999). Los momentos dipolares; $\mu_a=1.630$ D y $\mu_b=0.680$ D, y las constantes rotacionales; A=19985.76 MHz, B=6914.75 MHz, C=5304.47 MHz para el

subestado A, y $A=19980.39$ MHz, $B=6913.68$ MHz, $C=5304.51$ MHz para el subestado E, utilizadas en este trabajo son las que proponen Plumber et al. (1984, 1986).

En esta molécula tenemos un grupo metilo unido a un oxígeno, y éste unido a un grupo HCO (Fig. A.16). Todos los átomos excepto los hidrógenos del grupo metilo se sitúan en un plano, pudiendo tener dos configuraciones, Cis o Trans, según la posición del oxígeno con doble enlace con respecto al grupo metilo (Curl 1958). El isómero Cis posee mayor estabilidad por la interacción del dipolo de la unión C-O y el dipolo del grupo carbonil. Esta mayor estabilidad es la que produce que esta molécula se observe siempre como Cis y sea sobre esta configuración sobre la que se han hecho los estudios antes mencionados.

Como el grupo metilo puede rotar con respecto a la molécula, cada nivel rotacional se divide en dos subestados: el nivel no degenerado A y el doblemente degenerado nivel E (Fig. A.17). La barrera para esta rotación es bastante grande (~ 400 cm $^{-1}$), y por ello la separación entre los niveles es pequeña. En general los dos subestados de esta molécula se suelen representar como dos moléculas con constantes de rotación ligeramente diferentes. En el estado A los efectos de la torsión no son muy importantes, pudiéndose analizar como una molécula asimétrica semirígida. En el subestado E se tiene una pequeña perturbación por la torsión.

La función de partición que se ha utilizado es $Q=12.45T_{\text{rot}}^{1.5}$ (Kuan & Snyder 1996).

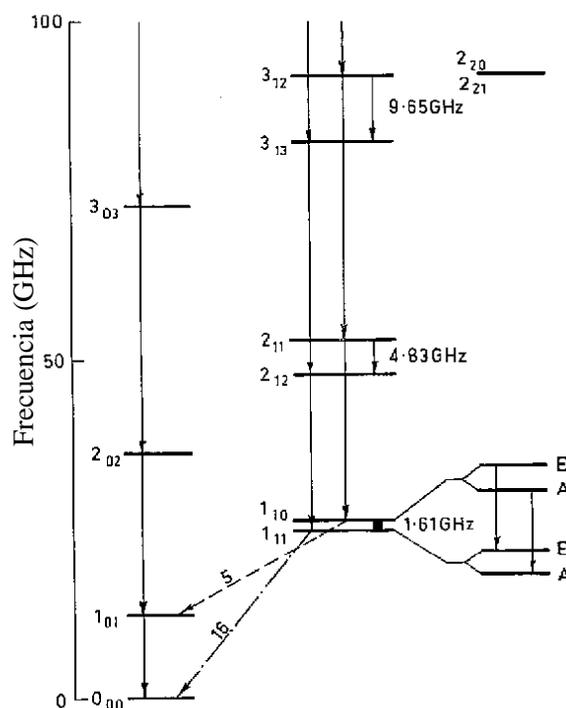


FIGURA A.17: Estructura de niveles del HCOOCH_3 . Figura de Churchwell et al. (1980).

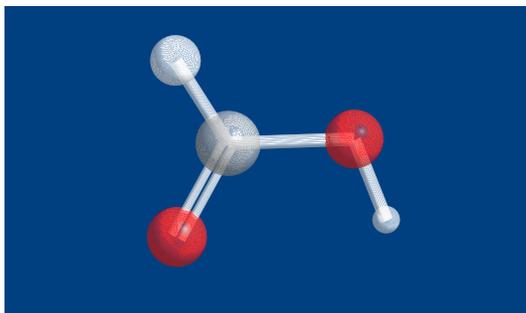


FIGURA A.18: Estructura de HCOOH.

A.3.6 Ácido Fórmico-HCOOH

El HCOOH (Fig. A.18) es el más simple de los ácidos orgánicos; está presente en los mordiscos de hormigas, en las picaduras de abejas y en la irritación que producen algunas plantas. Sobre este ácido se han realizado muchos estudios espectroscópicos entre los que

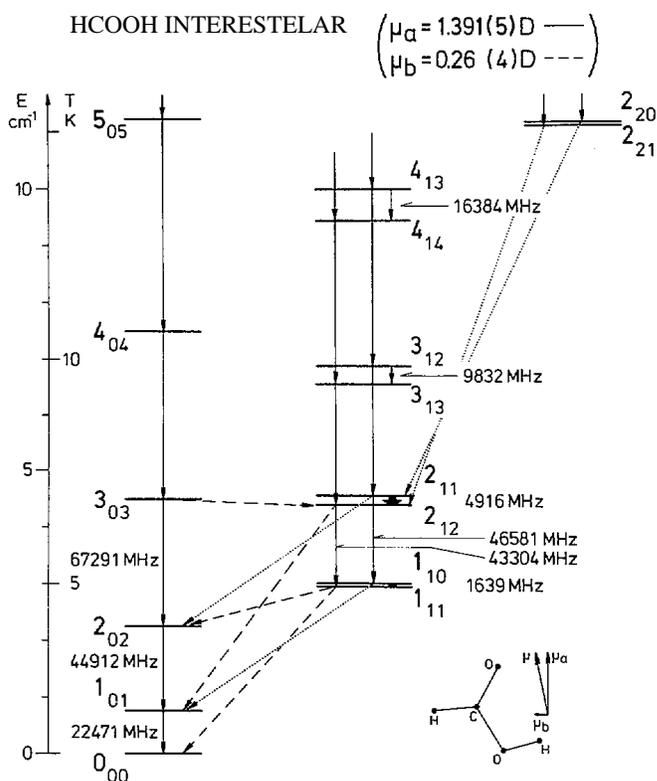


FIGURA A.19: Estructura de niveles de HCOOH. Figura adaptada de Winnewisser & Churchwell (1975).

destaca el de Willemot et al. (1980). En este artículo se presentan las características de 284 transiciones de HCOOH entre 8 GHz y 300 GHz, así como las transiciones de algunos de sus isotopólogos en el mismo rango espectral. De este estudio obtenemos los momentos dipolares del HCOOH; $\mu_a=1.396 D$ y $\mu_b=0.260 D$, y sus constantes rotacionales; $A=77512.25 \text{ MHz}$,

B=12055.11 MHz, C=10416.12 MHz.

Esta molécula tiene una configuración Trans, con los hidrógenos enfrentados a uno y otro lado de la molécula. La configuración Cis es 1000 veces menos probable e isomeriza rápidamente. La molécula es débilmente asimétrica y con forma de rotor prolato, $\kappa = -0.095$ (Hurtmans et al. 2000), la estructura de niveles (Fig. A.19) se representará por los números cuánticos J, K_a y K_c . La función de partición que se utiliza en este trabajo es la aproximación que usaron Liu et al. (2002), $Q = 1.68T_{\text{rot}}^{1.5}$.

A.3.7 Formaldehído- H_2CO

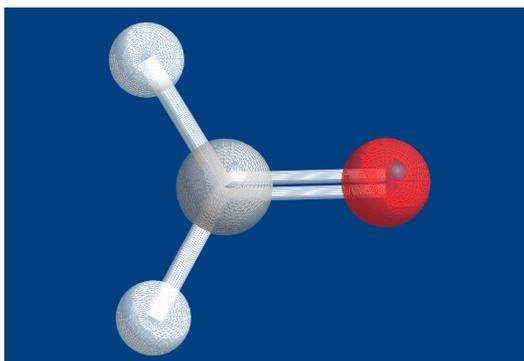


FIGURA A.20: Estructura de H_2CO .

La estructura de esta molécula y las frecuencias de su espectro rotacional entre 1 MHz y 300 MHz fueron estudiadas por Johnson et al. (1971). Es de este trabajo de donde obtenemos los valores para el momento dipolar, $\mu_a = 2.332$ D, y las constantes rotacionales: A=281993.58 MHz, B=38833.99 MHz, C=34004.24 MHz.

Es una molécula pequeña de cuatro átomos, y sus propiedades han sido fácilmente obtenidas mediante cálculos ab initio. Se trata de un rotor asimétrico prolato, Fig. A.20, muy cerca del límite de simetría ($\kappa = -0.9610$). Esta molécula va a presentar dos especies: la orto, cuando el número cuántico K_a sea impar, y la para, cuando K_a sea par. Esta división de los niveles se debe a las estadísticas de espín de los niveles rotacionales, y tendrán pesos de espín diferentes, 3 y 1 respectivamente (Brünken et al. 2003), ver Fig. A.21. La función de partición se obtiene con la aproximación para moléculas asimétricas (Rohlfs & Wilson 2004) multiplicada por la degeneración de espín total ($3+1=4$) y dividida por la simetría (2): $Q = \frac{4}{2} \sqrt{\frac{\pi(\kappa T)^3}{h^3 ABC}} = 0.55T_{\text{rot}}^{1.5}$. Para calcular la densidad de columna total de la molécula habrá que tener en cuenta que tendremos degeneración de espín 1 o 3 dependiendo si es una transición para u orto.

A.3.8 Ácido acético- CH_3COOH

Un estudio de las transiciones rotacionales de esta molécula, del que se han obtenido las características de las transiciones rotacionales, es el de Wlodarczad & Demaison (1988). En esta molécula se encuentran grupos de transiciones que se solapan y se suelen represen-

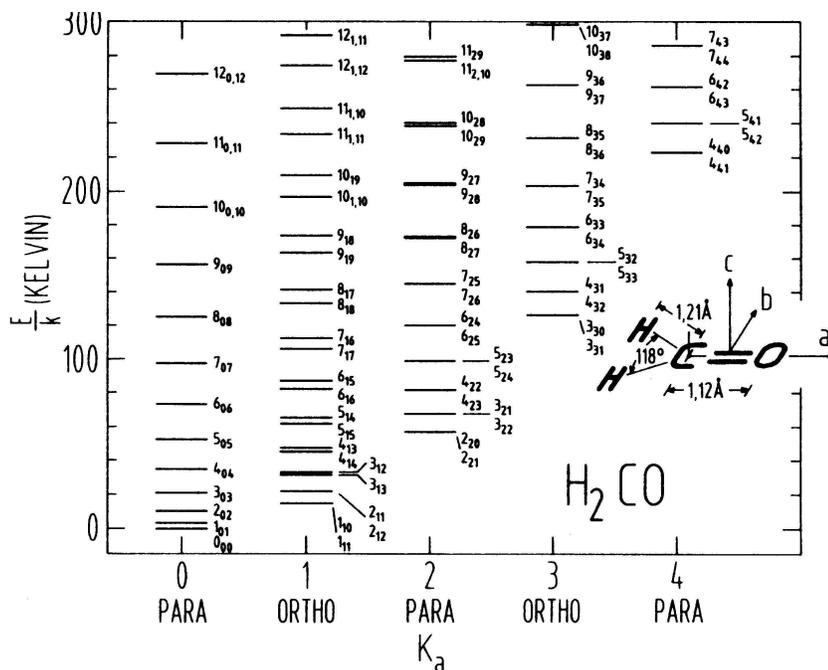


FIGURA A.21: Estructura de niveles de H_2CO . Figura de Rohlfs & Wilson (2004).

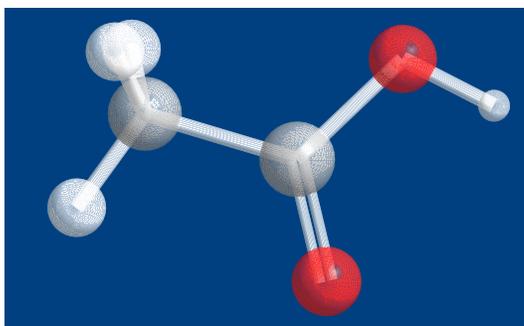


FIGURA A.22: Estructura de CH_3COOH .

tar de la forma: J_{*,K_c} . Del estudio de Wlodarczad & Demaison se obtienen los momentos dipolares: $\mu_a=0.860$ D y $\mu_b=1.470$ D y sus constantes rotacionales: $A=11335.58$ MHz, $B=9478.73$ MHz, $C=5324.99$ MHz.

En el CH_3COOH (Fig. A.22) se encuentra un rotor simétrico, el grupo metilo, pegado a una parte asimétrica. Como pasaba con el $HCOOCH_3$, presenta una barrera intermedia a la rotación por lo que los subestados A/E, que se presentan por la rotación del grupo metilo, están bien separados. El rotor interno es oblató ($\kappa=+0.38$), con el eje de rotación del grupo metilo perpendicular al eje casi simétrico de la molécula (Ilyushin et al. 2001). La función de partición utilizada para esta molécula es la aproximación que proponen Mehringer et al. (1997), $Q=14.1T_{rot}^{1.5}$.

A.3.9 glicolaldehído- CH_2OHCHO

El glicolaldehído es el azúcar más pequeño. Su estructura contiene dos grupos, uno carbonilo (CHO) y otro hidroxilo (OH), en posición Cis uno respecto del otro, el cual

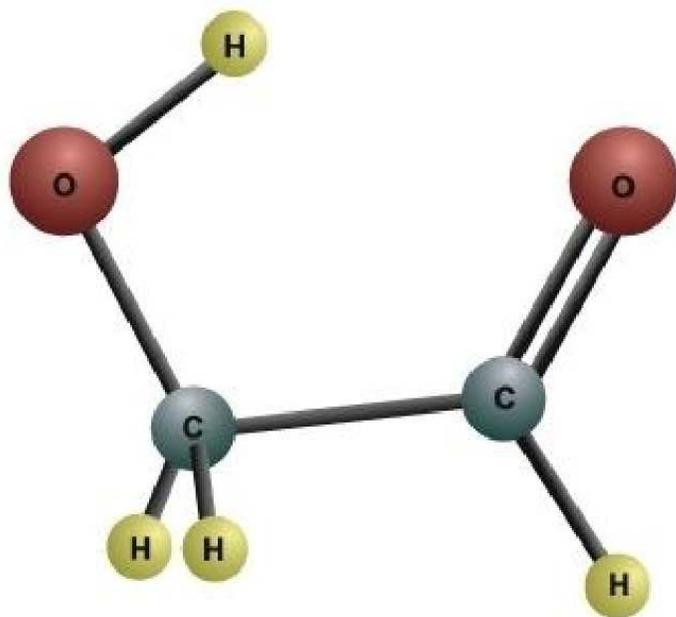


FIGURA A.23: Estructura del CH_2OHCHO . Entre el hidrógeno del grupo hidroxilo y el oxígeno del carbonilo se forma un puente de hidrógeno haciendo que la estructura Cis sea la más estable.

será el conformero más importante de la molécula. En este conformero, se forma un puente de hidrógeno entre el hidrógeno del grupo hidroxilo y el oxígeno del carbonilo (ver Fig. A.23).

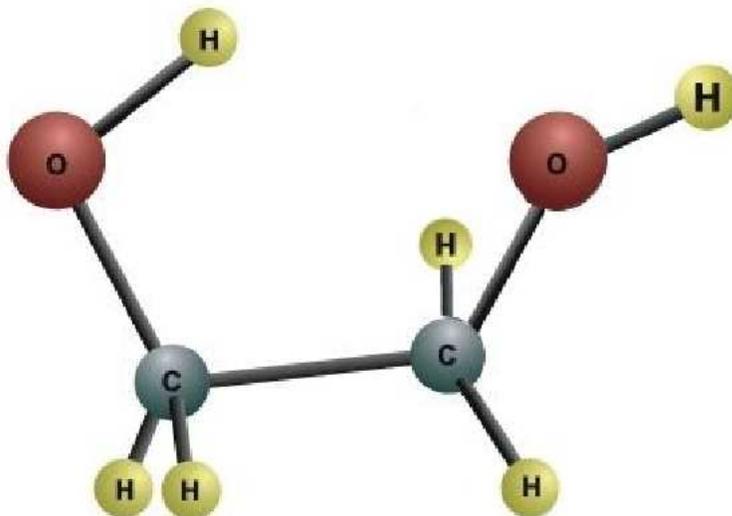
Su espectro milimétrico ha sido estudiado por Butler et al. (2001) y Widicus Weaver et al. (2005) y ha sido detectado en el MI, en el núcleo caliente Sgr B2N por Hollis et al. (2000,2001,2004a). Posteriormente otro grupo observó la molécula para establecer su correcta detección (Halfen et al. 2006). El conformero Trans no ha sido detectado en el medio interestelar, pero Senent (2004), lo ha estudiado mostrando que sus niveles rotacionales están 1111.56 cm^{-1} por encima del fundamental Cis.

Los momentos dipolares de esta molécula son $\mu_a=0.262\text{ D}$ y $\mu_b=2.33\text{ D}$. Las constantes rotacionales son $A=18446.26\text{ MHz}$, $B=6526.00\text{ MHz}$ y $C=4969.24\text{ MHz}$. A temperaturas pequeñas, se puede utilizar como función de partición: $Q=6.9 T_{\text{rot}}^{1.5}$ (Gordy & Cook 1984, p. 58). A temperaturas mayores los estados vibracionalmente excitados hacen que la función de partición sea mayor (Widicus Weaver et al. 2005).

A.3.10 Etilenglicol- $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

Esta molécula es el alcohol reducido del glicolaldehído. Este alcohol se suele usar como anticongelante en los sistema de refrigeración de los automóviles y está asociado a la síntesis de los azúcares prebióticos.

Etilenglicol es una molécula con tres rotores, dos rotaciones entre las uniones de los C y los O, y otra entre los dos carbonos (Christen et al. 1995), que pueden tener movimientos bastante amplios (ver Fig. A.24). Las torsiones alrededor de la unión C–O y C–C producen 10 conformeros diferentes de esta molécula. El conformero con menor energía, y más estable,

FIGURA A.24: Estructura del $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{OH}$.

se denomina aGg', el cual mantiene su estructura gracias a puentes de hidrógeno.

Para esta especie aGg' (Christen & Müller 2004), la molécula tiene dos posibles configuraciones dependiendo de los ángulos de giro de los grupos hidroxilos. Se encuentran dobletes debidos a la rotación de los grupos hidroxilos, que se etiquetan como $v=0$ o $v=1$. $\Delta v=0$, representa un rotor rígido y sus transiciones siguen el μ_b . Se podrán tener transiciones $\Delta v=\pm 1$, pero estos están afectados por los momentos dipolares μ_a y μ_c . En los dobletes, el peso de los espines hace que la razón de intensidades sea 7:9, al ser la suma K_a+K_c+v par o impar respectivamente. Para este conformero, y según la base de datos de la Universidad de Colonia, los momentos dipolares son $\mu_a=2.080$ D, $\mu_b=0.936$ D y $\mu_c=-0.47$ D. Las constantes rotacionales son $A=15361.186$ MHz, $B=5588.243$ MHz y $C=4614.490$ MHz.

El siguiente conformero más estable es el gGg' (Müller & Christen 2004), cuyo espectro rotacional también está influenciado por la rotación de los dos grupos hidroxilos, produciendo el desdoblamiento de las líneas. Pero, en este caso, la separación entre los dobletes es más pequeña que en el conformero más estable.

Para este conformero, y según la base de datos de Colonia, los momentos dipolares son $\mu_a=1.30$ D, $\mu_b=1.37$ D y $\mu_c=-1.42$ D. Las constantes rotacionales son $A=15210.06$ MHz, $B=5542.43$ MHz y $C=4595.44$ MHz. En este caso la función de partición se podrá aproximar como la de una molécula asimétrica, pero multiplicada por la degeneración total ($7+9=16$).

A.3.11 Aldehídos de tres carbonos

En la Fig. A.25 se presentan las estructuras de los aldehídos de dos carbonos, propinal (HCCCHO), propenal (CH_2CHCHO) y propanal ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$) de izquierda a derecha, en las que se puede pasar de una estructura a otra por medio de la doble hidrogenización consecutiva de la más simple.

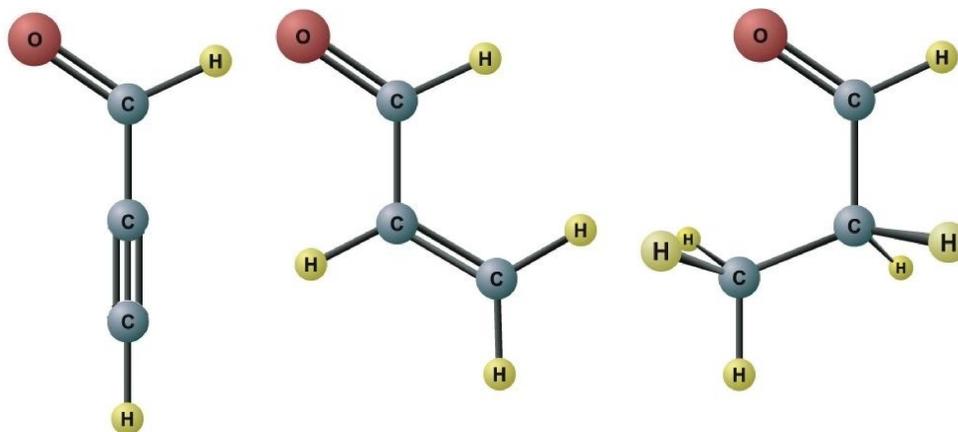


FIGURA A.25: Estructura del propinal, propenal y propanal.

El aldehído más simple es el propinal, que presenta isómeros menos estables como la propadienona (H_2CCCO) y su forma cíclica, la ciclo propenona ($c\text{-C}_3\text{H}_2\text{O}$). Su espectroscopia es relativamente simple (Winnewisser 1973) y se puede utilizar, para su función de partición directamente la aproximación para moléculas asimétricas.

Al hidrogenarse dos veces nos encontramos con el CH_2CHCHO , donde la estructura Trans entre el grupo carbonilo y el resto de la molécula es más estable (Blom & Bauder 1982). También en este caso se ha realizado una aproximación al calcular la función de partición.

El aldehído más complejo de esta familia $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$ tiene tres configuraciones distintas según la posición del grupo carbonilo, una Cis y dos Gauche, pero además en su estructura se ha formado un grupo metilo que puede rotar produciendo el desdoblamiento de las líneas en especies A/E, que ya se ha visto anteriormente. La configuración Cis, más estable, presenta dobletes A/E por el grupo metilo y la Gauche cuadrupletes ya que la especie Gauche está degenerada y a su vez tendrá los subestados A/E por el grupo metilo.

Según la base de datos de JPL, los momentos dipolares del HCCCHO son $\mu_a=2.39\text{ D}$ y $\mu_b=0.60\text{ D}$. Para esta molécula las constantes rotacionales obtenidas son $A=68035.30\text{ MHz}$, $B=4826.30\text{ MHz}$ y $C=4499.50\text{ MHz}$. Los momentos dipolares del CH_2CHCHO son $\mu_a=3.05\text{ D}$ y $\mu_b=0.63\text{ D}$. Las constantes rotacionales son $A=47353.70\text{ MHz}$, $B=4659.50\text{ MHz}$ y $C=4242.70\text{ MHz}$. Y por último los momentos dipolares del $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$ son $\mu_a=2.39\text{ D}$, $\mu_b=0.60\text{ D}$ y $\mu_c=-1.42\text{ D}$. Las constantes rotacionales son $A=15210.06\text{ MHz}$, $B=5542.43\text{ MHz}$ y $C=4595.44\text{ MHz}$.

Óxido de etileno- $c\text{-C}_2\text{H}_4\text{O}$

Es una molécula cíclica relativamente estable, isómero del CH_3CHO pero su nivel fundamental está a 1 eV . Su estructura es la de una molécula semirígida asimétrica de carácter oblate, con los carbonos y el oxígeno unidos de forma cíclica y los hidrógenos pegados a los carbonos (ver Fig. A.26). Su espectro milimétrico y submilimétrico ha sido estudiado por muchos investigadores entre los que destaca el trabajo de Pan et al. (1998), en el que se pueden encontrar el resto de las referencias. El momento dipolar de esta molécula es $\mu_b=1.89\text{ D}$, y

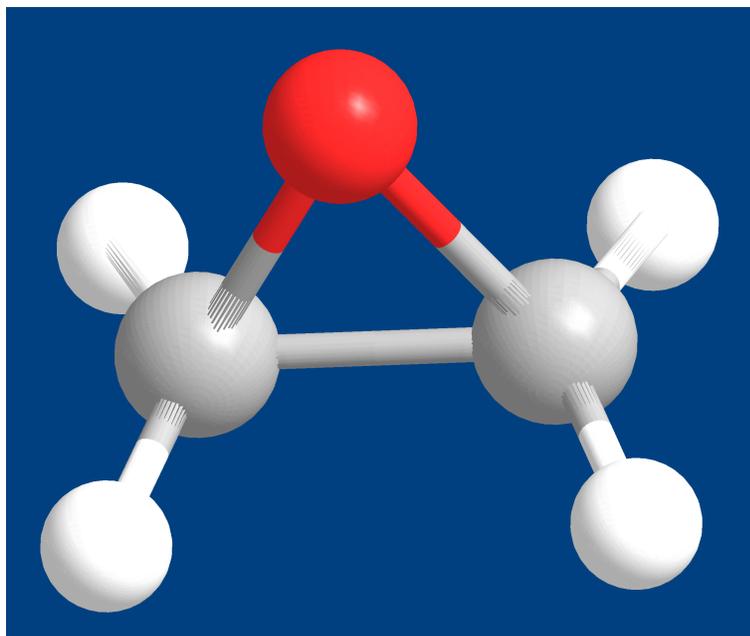


FIGURA A.26: Estructura del óxido de etileno.

sus constantes rotacionales son $A=25483.89$ MHz, $B=22120.85$ MHz y $C=14097.84$ MHz.

Debido a que esta molécula tiene 4 hidrógenos, cada uno con espín $I=1/2$, tendremos diferentes pesos de espín dependiendo de los números cuánticos de las transiciones. Los niveles con K_a y K_c pares o impares al mismo tiempo tendrán un peso de espín de 10, mientras que en los que uno de ellos es par y el otro impar tendrán un peso de espín de 6. Además la molécula posee simetría C_{2v} , lo que influye en su función de partición, la cual aproximar como la de una molécula asimétrica, multiplicada por el peso de espín total (16) y dividida por el número de simetría (2). La aproximación que se puede utilizar entonces es: $Q=15.13T_{\text{rot}}^{3/2}$.

La población fraccional de los niveles rotacionales vendrá dada por $f=g_s(2J+1)\exp(-E/kT)/q$, siendo la g_s 10 o 6 según la paridad de los números cuánticos K_a y K_c

A.3.12 Ácido isociánico-HNCO

Esta molécula nitrogenada está caracterizada por un rotor asimétrico ligeramente prolato. En oxígeno, el carbono y el nitrógeno están alineados, pero en hidrógeno se sale del plano y puede rotar (ver Fig. A.27). El espectro de esta molécula ha sido estudiada por muchos autores, de entre los que destacan los trabajos de Hocking et al. (1974, 1975). La estructura de niveles de esta molécula tiene estructura hiperfina debido al momento cuadrupolar nuclear que le produce el nitrógeno que contiene. De todas maneras, en los datos obtenidos en este trabajo no se ha observado este desdoblamiento debido a la anchura de las líneas procedentes de las nubes del centro Galáctico.

Sus momentos dipolares son $\mu_a=1.60$ D y $\mu_b=1.35$ D y sus constantes rotacionales son $A=912711.44$ MHz, $B=11071.01$ MHz y $C=10910.58$ MHz. Como se ha utilizado directamente la intensidad integrada de todas las componentes hiperfinas se ha utilizado directamente la aproximación de un rotor asimétrico para la función de partición y las fuerzas de línea que proveen Winnewisser et al. (1976) para las transiciones sin tener en cuenta el

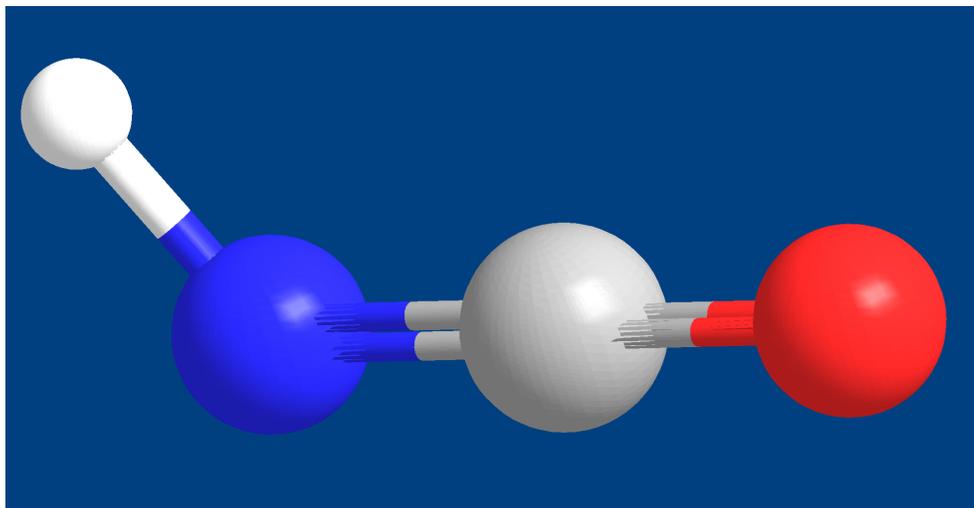


FIGURA A.27: *Estructura del ácido isocianico.*

desdoblamiento hiperfino.

Apéndice B

Función de Partición-Q

Uno de los parámetros más importantes para derivar las densidades de columna de las moléculas requiere del conocimiento del momento dipolar y de la función de partición, que nos permitirá obtener la población de un nivel rotacional a partir de la población total de la molécula, o a la inversa.

El valor de esta función dependerá de cómo se hayan obtenido, si se han tenido en cuenta las degeneraciones de los niveles rotacionales y las simetrías de la molécula o no.

Para las distintas configuraciones moleculares habrá diferentes funciones de partición:

- para moléculas lineales la función de partición será:

$$Q = \sum_{J=0}^{\infty} g(2J+1) e^{-\frac{hBJ(J+1)}{\kappa T}} \quad (\text{B.1})$$

siendo J en número cuántico principal, h la constante de Plank, B la constante rotacional, κ la constante de Boltzmann, T la temperatura de excitación rotacional y g la degeneración que pueda tener el nivel rotacional aparte de la degeneración propia del nivel $(2J+1)$. En el caso de que la temperatura sea mayor que la separación entre los niveles ($hB \ll \kappa T$) se podrá usar la expresión:

$$Q \approx \frac{\kappa T}{hB} \quad (\text{B.2})$$

- para moléculas simétricas:

$$Q = \sum_{J=0}^{\infty} \sum_{K=0}^{K=J} g(2J+1) S(J, K) e^{-h \frac{BJ(J+1) + (C-B)K^2}{\kappa T}} \quad (\text{B.3})$$

Aunque suele utilizar la misma aproximación que en las lineales, si $hB \ll \kappa T$:

$$Q \approx \sqrt{\frac{\pi(\kappa T)^3}{h^3 B^2 C}} \quad (\text{B.4})$$

- para moléculas asimétricas:

$$Q = \sum_{J=0}^{\infty} \sum_{K_a=0}^{K_a=J} \sum_{K_c=0}^{K_c=J} g(2J+1) S(J, K_a, K_c) e^{-\frac{W}{\kappa T}} \quad (\text{B.5})$$

dependiendo el parámetro W de la forma de la molécula, ver Townes & Schawlow (1954). Una aproximación en el caso de que la temperatura sea mayor a la separación entre niveles se puede ver en Rohlfs & Wilson (2004):

$$Q \approx \sqrt{\frac{\pi(\kappa T)^3}{h^3 ABC}} \quad (\text{B.6})$$

Si existe alguna simetría en el sistema, la función de partición se debería dividir por el grado de esa simetría para no tener en cuenta las transiciones repetidas. En el caso de que los niveles estén degenerados, dentro de los sumatorios habrá que pesar los diferentes niveles con su degeneración, en las aproximaciones se deberán multiplicar por la degeneración total.

Apéndice C

Parámetros observacionales del capítulo 3

En la tabla que se incluye a continuación presentamos las intensidades máximas de las líneas (K), las intensidades integradas (K km s^{-1}), las velocidades LSR (km s^{-1}) y las anchuras de las líneas (km s^{-1}) que se han obtenido de los ajustes de gaussianas para cada de las transiciones y de las fuentes en las que hemos trabajado. Los () indican los errores calculados y los [] los rangos de velocidades entre los que se ha integrado la intensidad, cuando ha sido necesario. Este rango de velocidades se ha obtenido de la anchura de la línea de C_2H_5OH cuando ésta es accesible y de la línea de CH_3OH cuando no.

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv
	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)
	C ¹⁸ O (1 → 0)				C ¹⁸ O(2 → 1)				¹³ CO (1 → 0)			
MC G-0.96+0.13	≤0.18	≤0.83	≤0.21	≤0.96	1.36	21 (1)	132 (1)	15 (1)
MC G-0.55-0.05	0.55	8.1 (0.1)	[-115.5 -87.7]	...	4.82	11.4 (0.1)	[-115.5 -87.7]	...	0.67	84.5 (0.1)	[-115.5 -87.7]	...
MC G-0.50-0.03	0.9	13 (6)	-97 (3)	14 (7)	0.6	7.6 (0.8)	-97.6 (0.6)	12.2 (1.8)	5.3	92 (3)	-98.4 (0.2)	16.4 (0.6)
MC G-0.42-0.01	0.38	7.1 (0.3)	-83	17.29	0.42	11.6 (0.8)	[-97.6 -64.3]	...	3.1	76.5 (0.3)	[-97.6 -64.3]	...
MC G-0.32-0.19	0.14	1.3 (0.1)	[-83 -55]	...	0.18	1.0 (0.5)	[-83 -55]	...	0.81	9.1 (0.1)	[-83 -55]	...
MC G-0.32-0.19	0.20	1.2 (0.1)	[-32 -19]	...	0.09	0.6 (0.5)	[-32 -19]	...	1.61	13.9 (0.1)	[-32 -19]	...
MC G-0.32-0.19	≤0.11	≤0.40	0.16	0.5 (0.5)	[15 37]	...	1.11	16.0 (0.1)	[15 37]	...
MC G-0.11-0.08	0.74	13 (8)	19 (5)	16 (11)	1.05	18 (1)	17.7 (0.5)	16.1 (1)	6.23	120 (6)	18.5 (0.5)	18 (1)
MC G-0.08-0.06	0.5	9 (1)	27 (1)	16 (2)	0.69	9.7 (0.8)	27.4 (0.5)	13.2 (1.5)	4.78	104.9 (0.4)	[12.5 44]	...
MC G-0.02-0.07	1.43	22.8 (0.6)	[25 61]	...	2.77	56.3 (0.6)	[25 61]	...	10.9	217.1 (0.6)	[25 61]	...
MC G+0.04+0.03	0.7	3.9 (0.4)	[-21.3 -31.3]	...	0.9	2.7 (0.4)	[-21.3 -31.3]	...	5.4	16.6 (0.4)	[-21.3 -31.3]	...
MC G+0.07-0.07	0.94	15 (1)	51.2 (0.5)	15 (1)	1.50	25.9 (0.7)	51.5 (0.2)	16.2 (0.5)	7.48	155 (5)	52.1 (0.3)	19.5 (0.7)
MC G+0.13+0.02	0.27	3.4 (0.5)	[-44.7 -15.5]	...	0.35	5.1 (0.8)	[-44.7 -15.5]	...	0.60	39.0 (0.5)	[-44.7 -15.5]	...
MC G+0.13+0.02	0.34	2.0 (0.4)	[42.8 62.6]	...	0.16	2.3 (0.8)	[42.8 62.6]	...	2.45	31.1 (0.4)	[42.8 62.6]	...
MC G+0.17+0.01	0.48	9 (1)	58 (1)	18 (2)	0.60	12.8 (0.9)	54.3 (0.7)	20 (2)	4.06	93 (2)	57 (0.2)	21.6 (0.7)
MC G+0.18-0.04	0.45	4.7 (0.8)	20.0 (0.8)	9 (2)	2.63	64 (2)	20.1 (0.3)	23 (1)
MC G+0.18-0.04	0.44	6 (1)	74.9 (0.9)	12 (3)	3.35	82 (2)	72.7 (0.3)	23 (1)
MC G+0.20-0.03	0.48	9.2 (0.7)	25.8 (0.6)	18 (2)	0.47	10.1 (0.9)	27.0 (1)	20 (2)	4.88	104 (2)	26.5 (0.1)	20.0 (0.4)
MC G+0.20-0.03	0.46	5.1 (0.8)	82.0 (0.7)	10.4 (2)	0.26	6 (2)	83 (4)	19 (8)	3.01	50 (4)	86.5 (0.7)	16 (1)
MC G+0.24+0.01	0.77	13 (1)	35.5 (0.8)	16 (2)	1.49	23 (1)	38.2 (0.4)	14 (1)	6.61	134 (9)	35.8 (0.5)	19 (2)
MC G+0.62-0.10	0.58	12.4 (0.8)	[41 84]	...	0.69	15.2 (0.6)	[41 84]	...	4.64	108.4 (0.8)	[41 84]	...
MC G+0.64-0.08	0.56	9.4 (0.3)	[50 81]	...	0.66	13 (1)	63.7 (0.8)	18 (2)	3.95	90.8 (0.3)	[50 81]	...
MC G+0.67-0.06	0.56	15 (1)	53 (1)	23 (2)	0.60	11.5 (0.4)	51.2 (0.4)	18 (1)	4.57	145 (4)	52.5 (0.4)	29 (1)
MC G+0.68-0.10	0.63	17.4 (0.7)	[-2.1 45.1]	...	0.39	21.4 (0.8)	[-2.1 45.1]	...	3.57	131.4 (0.7)	[-2.1 45.1]	...

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.70-0.01	1.16	21 (2)	63 (1)	17 (2)	6.85	162 (9)	62.1 (0.6)	22.2 (0.7)
MC G+0.70-0.09	0.29	14.6 (0.7)	[14.8 72.2]	...	0.22	9.3 (0.7)	[14.8 72.2]	...	2.71	147.5 (0.7)	[14.8 72.2]	...
MC G+0.71-0.13	0.35	15 (1)	[7 70]	...	0.19	7.3 (0.5)	[7 70]	...	3.06	152 (1)	[7 70]	...
MC G+0.76-0.05	0.45	19 (1)	[-4 55]	...	0.87	18.3 (0.5)	[-4 55]	...	3.99	175 (1)	[-4 - 55]	...
MC G+0.694-0.017	1.32	29 (1)	65.8 (0.4)	21 (1)
MC G+0.693-0.027	1.29	30 (2)	68.4 (0.6)	22 (1)
MC G+0.627-0.067	1.06	15 (2)	49.7 (0.5)	13 (2)
MC G+0.630-0.072	0.87	10.9 (0.4)	[35 - 56]
MC G+0.672-0.014	1.82	38.0 (0.6)	[45.7-76.8]
MC G+0.640-0.046	1.01	33(2)	[21.7-84.2]
MC G+0.635-0.069	1.06	15.9 (0.2)	[41.5-64]
MC G+0.659-0.035	5.66	103 (8)	60.4 (0.7)	17 (2)
MC G+0.681-0.028	2.86	74 (4)	71 (0.6)	24 (1)
MC G+0.673-0.025	6.44	113 (7)	70.4 (0.5)	16 (1)
Sgr B2N	4.05	71.6 (0.5)	[55 76]
Sgr B2M	4.46	86 (1)	61.2 (0.1)	18.5 (0.3)	9.42	173 (2)	61.0 (0.1)	17.3 (0.3)	11.51	282.8 (0.4)	[48-78]	...
	CH ₃ OH (3 ₀ → 2 ₀ A+)				¹³ CH ₃ OH (3 ₀ → 2 ₀ A+)				CH ₃ OH (5 ₀ → 4 ₀ E)			
MC G-0.96+0.13	1.14	32 (2)	140 (1)	26 (1)	≤0.24	≤1.07
MC G-0.55-0.05	1.8	47 (1)	-93 (1)	24 (1)	0.15	1.9 (0.6)	-97 (2)	12 (5)
MC G-0.50-0.03	0.76	19.3 (0.8)	-92.3 (0.5)	23 (1)	≤0.18	≤0.58
MC G-0.42-0.01	0.52	14.6 (0.6)	-71.7 (0.6)	25 (1)	≤0.18	≤0.77
MC G-0.32-0.19	0.59	9.2 (2)	-70.4 (1)	14.5 (4)
MC G-0.32-0.19	0.31	2.2 (0.5)	-24.7 (1)	6.6 (2)
MC G-0.32-0.19	0.29	3.5 (1)	26.2 (1)	11.2 (3)
MC G-0.11-0.08	7.35	229 (5)	19.5 (0.1)	17.6 (0.2)	0.54	12.6 (0.6)	26.2 (0.5)	22 (1)	0.91	12.7 (5.2)	18 (2)	13 (6)

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G-0.08-0.06	2.8	81.0 (0.8)	37.4 (0.1)	27.4 (0.3)
MC G-0.02-0.07	9.6 (0.2)	328 (9)	44.7 (0.1)	26.0 (0.3)	0.9	25.9 (0.6)	50.2 (0.3)	26.9 (0.8)	1.87	40 (16)	44 (4)	24 (10)
MC G+0.04+0.03	2	14.7 (0.3)	[-21.3 -31.3]
MC G+0.07-0.07	6.4 (0.8)	140 (8)	55.2 (0.1)	25.9 (0.5)	0.43	11.5 (0.5)	61.8 (0.6)	23 (1)	0.80	23 (1)	55.5 (0.06)	26 (2)
MC G+0.13+0.02	1.2 (0.1)	34.9 (0.6)	-30.9 (0.7)	29.25 (0.7)
MC G+0.13+0.02	0.5 (0.01)	10 (1)	52.7 (0.03)	19.8 (0.6)
MC G+0.17+0.01	3.1 (0.3)	47 (8)	59.1 (0.3)	19 (2)	0.1	2.9 (0.5)	63 (2)	27 (5)
MC G+0.18-0.04	1.13	33.6 (0.4)	27.1 (0.2)	28.0 (0.4)
MC G+0.18-0.04	1.72	47 (4)	85.8 (0.1)	25.7 (0.2)
MC G+0.20-0.03	0.87	12.2 (0.8)	24.9 (0.4)	13 (1)
MC G+0.20-0.03	1.00	18 (1)	87.7 (0.6)	17 (2)
MC G+0.24+0.01	18.2 (0.7)	337 (18)	38.5 (0.1)	18.6 (0.3)	0.73	18.7(0.5)	42.7 (0.3)	24.2 (0.7)	1.18	20 (6)	38 (2)	16(5)
MC G+0.62-0.10	3.4 (0.6)	113 (8)	59.3 (0.2)	31 (0.7)	0.25	7.7(0.7)	64 (1)	29 (3)	0.31	8.1 (0.4)	64.3 (0.5)	24(2)
MC G+0.64-0.08	2.21	44 (2)	64.2 (0.3)	19 (1)	0.09	2.3(0.5)	61 (3)	25 (8)
MC G+0.67-0.06	6.13 (2)	123 (8)	46.3 (0.1)	24.8 (0.5)	0.25	9.2(0.8)	51 (1)	35 (3)	0.33	5 (2)	55 (2)	13(5)
MC G+0.68-0.10	4.01 (1)	100 (4)	18.6 (0.1)	22.6 (0.5)	0.25	8(1)	28 (2)	29 (5)	0.25	3.2 (0.2)	24.6 (0.3)	12(1)
MC G+0.70-0.01	2.83 (1)	130 (11)	58.9 (0.1)	12.3 (0.36)	0.37	13.7(0.6)	60.1 (0.8)	35 (2)
MC G+0.70-0.09	1.79	115.1 (0.7)	58.6 (0.2)	60.5(0.4)	0.09	4.3(0.8)	62 (4)	47 (10)
MC G+0.71-0.13	1.34	81.9 (0.6)	[7 70]	...	0.11	3.0(0.5)	[7 70]
MC G+0.76-0.05	2.72	136.7 (0.4)	[-4 55]	...	0.31	14.3 (0.6)	21 (1)	44 (2)	0.27	8.5 (0.6)	27(1)	30 (2)
MC G+0.694-0.017	2.8 (0.5)	406 (17)	64.7 (0.2)	25.5 (0.3)	0.77	26.5 (0.7)	70.1 (0.4)	32 (1)	0.77	22.5 (0.9)	63.9(0.6)	27 (1)
MC G+0.693-0.027	3.4 (0.2)	404 (17)	71.5 (0.2)	19.7 (0.4)	1.22	34.2 (0.6)	74.5 (0.2)	26.4 (0.5)	1.72	36 (2)	71.6(0.5)	20 (1)
MC G+0.627-0.067	0.50	10.3 (0.4)	54.9 (0.4)	19 (1)	1.20	12 (1)	47.6(0.5)	10 (1)
MC G+0.630-0.072	0.37	8.1 (0.3)	54.2 (0.4)	20 (1)	0.76	7 (3)	46(2)	9 (4)
MC G+0.672-0.014	0.51	12.2 (0.6)	68.2 (0.6)	22 (1)	0.71	15 (1)	63.6(0.8)	19 (2)

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv
	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)
MC G+0.640-0.046	0.67	21.3 (0.6)	69.4(0.4)	30 (1)	0.81	23 (2)	63(1)	26 (2)
MC G+0.635-0.069	0.29	6.7 (0.4)	55.9 (0.6)	22 (1)	0.83	12 (3)	46(1)	14 (5)
MC G+0.659-0.035	1.28	34.3 (0.9)	68.4 (0.4)	25.2 (0.8)	5.74	101 (3)	58.8(0.2)	16.5(0.5)
MC G+0.681-0.028	2.61	85 (1)	75.8 (0.2)	30.5 (0.5)	0.64	18.7 (0.8)	75.2 (0.5)	28 (1)	2.36	47 (2)	62.8(0.4)	18.8 (0.8)
MC G+0.673-0.025	1.11	28 (2)	76.1 (0.8)	24 (2)	3.08	54 (9)	68(2)	16(4)
Sgr B2N	6.04	89 (4)	63.8(0.2)	13.9(0.8)
Sgr B2M	0.18	7 (2)	72 (5)	37 (9)	3.63	64 (2)	59.0(0.3)	16.6(0.7)
	CH ₃ OH (5 ₀ → 4 _{0A} +)				CS (5 → 4)				CS (3 → 2)			
MC G-0.96+0.13	0.33	6 (1)	133 (1)	18 (1)
MC G-0.55-0.05	0.66	8.4(0.5)	-100(1)	11(1)	0.96	13.76 (0.05)	[-115.5 -87.7]	...
MC G-0.50-0.03	0.71	10 (1)	-98 (1)	13 (2)
MC G-0.42-0.01	0.55	11.7 (0.4)	[-97.6 -64.3]	...
MC G-0.32-0.19	0.53	5.6 (0.3)	[-83 -55]	...
MC G-0.32-0.19	0.27	2.3 (0.2)	[-32 -19]	...
MC G-0.32-0.19	0.31	4.6 (0.3)	[15 37]	...
MC G-0.11-0.08	4.9(0.1)	79(1)	18.3(0.04)	15.9(0.1)	3.3	74.4 (0.5)	[4.3 35]	...
MC G-0.08-0.06	1.37	20(1)	30.7(0.3)	14(1)	1.9	32.5 (1.7)	28.2 (0.4)	16 (1)
MC G-0.02-0.07	5.24	194.7(0.1)	44.5(0.1)	27.9(0.2)	4.57	131.8 (0.5)	[25 61]	...	4.88	130.3 (0.6)	[25 61]	...
MC G+0.04+0.03	1.99	16.2 (0.4)	[-21.3 -31.3]	...
MC G+0.07-0.07	2.67(0.03)	81.5(0.3)	54.37(0.04)	26.47 (0.02)	2.56	62.8 (0.7)	[35.8 66.8]	...
MC G+0.13+0.02	1.25	25 (1)	[-44.7 -15.5]	...
MC G+0.13+0.02	0.56	9 (1)	[42.8 62.6]	...
MC G+0.17+0.01	1.18	26 (2)	[41.3 75.3]	...
MC G+0.18-0.04	0.91	27 (2)	20.2 (0.9)	28 (2)
MC G+0.18-0.04	1.10	21 (1)	77.3 (0.6)	18 (2)

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G-0.55-0.05
MC G-0.50-0.03
MC G-0.42-0.01
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.24
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.15
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.23
MC G-0.11-0.08	0.29	5.5 (0.2)	19.6 (0.3)	17.507 (0.8)	0.1	2.2 (0.2)	19 (1)	21 (3)
MC G-0.08-0.06	0.1	1.62 (0.2)	29.6 (0.8)	15.3 (1.8)	≤0.12	≤0.36
MC G-0.02-0.07	0.3	6.83 (0.3)	47.2 (0.4)	21.7 (1)	0.3	7(1)	46(2)	23(5)	0.17	3.8 (0.2)	44.2 (0.1)	21 (1)
MC G+0.04+0.03	0.1	1.01 (0.09)	-26.3 (0)	9.8 (0)	≤0.09	≤0.33
MC G+0.07-0.07	0.17	3.7 (0.3)	52.9 (0.8)	20 (2)	0.11	1.6 (0.2)	52 (1)	14 (2)
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.33	59 (1)	19 (3)	≤0.09	≤0.65
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.23	59 (1)	19 (3)	≤0.09	≤0.44
MC G+0.17+0.01	0.04	0.7 (0.1)	59 (1)	19 (3)	≤0.03	≤0.31
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.17	≤0.09	≤0.64
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.15	≤0.09	≤0.59
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.09	≤0.09	≤0.31
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.11	≤0.09	≤0.39
MC G+0.24+0.01	0.03	6.0 (0.3)	36.4 (0.5)	17 (1)	0.2	2.5 (0.3)	37.1 (0.7)	13 (1)
MC G+0.62-0.10	0.14	2.7 (0.2)	56.6 (0.6)	19 (1)	0.07	0.8 (0.1)	55.5 (0.8)	11 (2)
MC G+0.64-0.08	0.08	1.4 (0.2)	63 (1)	16 (4)	≤0.12	≤0.39
MC G+0.67-0.06	0.10	2.8 (0.2)	51 (1)	25 (2)	0.05	0.7 (0.2)	50 (1)	13 (7)
MC G+0.68-0.10	0.23	5.0 (0.3)	21.9 (0.5)	20 (1)	0.05	0.9 (0.1)	19 (2)	18 (3)
MC G+0.70-0.01	0.15	2.8 (0.2)	61.7 (0.5)	17 (1)	0.07	0.8 (0.1)	60 (1)	11 (2)
MC G+0.70-0.09	0.08	2.3 (0.4)	43 (2)	27 (7)	≤0.15	≤0.6

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.71-0.13	0.05	2.4 (0.4)	[7 70]	≤0.15	≤2.42
MC G+0.76-0.05	0.13	5.5 (0.2)	27.1 (0.8)	41 (2)	≤0.15	≤0.75
MC G+0.694-0.017	0.50	12.1 (0.5)	65.8 (0.5)	23 (1)	0.38	9(1)	67(1)	22 (3)
MC G+0.693-0.027	0.63	13.9 (0.5)	68.5 (0.4)	20.6 (0.9)	0.53	12.5(0.3)	70.6(0.3)	22 (1)
MC G+0.627-0.067	0.34	3.7 (0.3)	48.4 (0.4)	10 (1)	0.24	3.0(0.5)	49(1)	12 (2)
MC G+0.630-0.072	0.29	3.4 (0.3)	46.4 (0.4)	11 (1)	0.18	2.2(0.6)	47(2)	12 (4)
MC G+0.672-0.014	0.25	5.5 (0.4)	59.0 (0.8)	21 (2)	0.17	3.2(0.7)	58(2)	17 (4)
MC G+0.640-0.046	0.21	6 (1)	58 (2)	27 (6)	0.15	4(1)	58(3)	26 (7)
MC G+0.635-0.069	0.17	2.1 (0.3)	48.5 (0.9)	12 (2)	0.19	2.1(0.5)	48(1)	10 (3)
MC G+0.659-0.035	0.54	10.8(0.6)	62.8 (0.5)	19 (1)
MC G+0.681-0.028	0.41	9 (2)	65 (2)	20 (5)
MC G+0.673-0.025	0.40	8.3 (0.3)	68.8 (0.4)	19 (1)
Sgr B2N	0.35	5.6 (0.2)	65.4 (0.2)	14.9 (0.5)	0.83	18.0(0.6)	59.0(0.3)	20.5(0.9)
Sgr B2M	0.15	3.15 (0.08)	63.6 (0.2)	20.2 (0.6)	0.24	4.9(0.3)	61.6(0.4)	19(1)	0.41	7.6 (0.6)	63.0 (0.7)	17 (2)
	HCOOCH ₃ -E+A (8 ₀₈ → 7 ₀₇)				HCOOCH ₃ -E (7 ₂₅ → 6 ₂₄)				HCOOCH ₃ -A (7 ₂₅ → 6 ₂₄)			
MC G-0.96+0.13	≤0.06	≤0.26	≤0.06	≤0.26	≤0.06	≤0.26
MC G-0.55-0.05
MC G-0.50-0.03
MC G-0.42-0.01
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.24	≤0.06	≤0.24	≤0.06	≤0.24
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.15	≤0.06	≤0.15	≤0.06	≤0.15
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23
MC G-0.11-0.08	0.08	2.9 (0.4)	13 (2)	24 (4)	0.03	0.6 (0.3)	20 (5)	17 (8)	≤0.03	≤0.25
MC G-0.08-0.06	≤0.06	≤0.25	≤0.06	≤0.25	≤0.06	≤0.25
MC G-0.02-0.07	0.11	2.9 (0.5)	43 (2)	24 (4)	0.06	1.3 (0.5)	45 (4)	20 (9)	0.06	1.4 (0.4)	46 (2)	21 (4)

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.04+0.03	≤0.03	≤0.16	≤0.03	≤0.16	≤0.03	≤0.16
MC G+0.07-0.07	0.06	4.6 (0.4)	58 (3)	34 (7)	0.05	1.1 (0.2)	55 (3)	22 (5)	0.04	0.9 (0.3)	54 (4)	21 (9)
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.33	≤0.06	≤0.33	≤0.06	≤0.33
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23
MC G+0.17+0.01	0.01	0.4 (0.1)	57 (3)	18 (5)	≤0.03	≤0.12	≤0.03	≤0.12
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.17	≤0.03	≤0.17	≤0.03	≤0.17
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.15	≤0.03	≤0.15	≤0.03	≤0.15
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.09	≤0.03	≤0.09	≤0.03	≤0.09
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.11	≤0.03	≤0.11	≤0.03	≤0.11
MC G+0.24+0.01	0.08	2.2 (0.7)	33 (3)	25 (10)	0.08	1.4 (0.4)	38 (3)	17 (5)	0.05	1.2 (0.7)	34 (5)	20 (13)
MC G+0.62-0.10	0.03	0.7 (0.2)	55 (3)	18 (5)	0.03	0.7 (0.2)	54 (3)	19 (6)	0.03	0.3 (0.2)	50 (3)	10 (5)
MC G+0.64-0.08	0.02	0.6 (0.2)	63 (1)	22 (5)	≤0.06	≤0.25	≤0.06	≤0.25
MC G+0.67-0.06	0.04	0.8 (0.3)	55 (3)	22 (10)	0.03	0.6 (0.2)	60 (4)	20 (8)	0.04	0.8 (0.2)	47 (2)	18 (6)
MC G+0.68-0.10	0.06	1.5 (0.4)	24 (3)	25 (7)	≤0.03	≤0.24	≤0.03	≤0.24
MC G+0.70-0.01	0.04	1.2 (0.3)	59 (3)	28 (7)	0.03	0.5 (0.2)	60 (4)	17 (7)	≤0.03	≤0.32
MC G+0.70-0.09	≤0.09	≤0.72	≤0.09	≤0.72	≤0.09	≤0.72
MC G+0.71-0.13	≤0.09	≤1.25	≤0.09	≤1.25	≤0.09	≤1.25
MC G+0.76-0.05	0.05	2.1 (0.4)	16 (3)	38 (8)	0.03	1.3 (0.9)	25 (7)	43 (10)	0.03	1.1 (0.7)	18 (5)	32 (10)
MC G+0.694-0.017	0.19	3.0 (0.7)	63 (2)	22.9 (1)	≤0.12	≤0.67	≤0.12	≤0.67
MC G+0.693-0.027	0.17	3.4 (0.9)	63 (2)	19 (6)	0.10	2.1 (0.7)	64 (1)	19 (1)	0.10	2.2 (0.7)	71 (3)	19 (1)
MC G+0.627-0.067	≤0.09	≤0.31	≤0.09	≤0.31	≤0.09	≤0.31
MC G+0.630-0.072	≤0.06	≤0.26	≤0.06	≤0.26	≤0.06	≤0.26
MC G+0.672-0.014	0.06	1.4 (0.5)	56 (4)	24 (9)	0.11	1.8 (0.5)	56 (2)	17 (6)	≤0.09	≤0.43
MC G+0.640-0.046	0.09	1.0 (0.4)	62 (2)	11 (5)	≤0.09	≤0.51	≤0.09	≤0.51
MC G+0.635-0.069	0.08	1.4 (0.4)	46 (2)	15 (5)	0.07	0.6 (0.2)	48 (2)	8 (2)	0.08	1.8 (0.4)	46 (3)	21 (6)

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv
	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)
MC G+0.659-0.035	0.24	5.0 (0.8)	58 (2)	20 (4)	0.15	2.9 (0.7)	60 (2)	18 (5)	0.16	2.5 (0.7)	60 (2)	15 (5)
MC G+0.681-0.028	0.43	9 (2)	62 (2)	19 (4)	0.29	4 (1)	66 (2)	12 (5)	0.31	4 (1)	66 (2)	13 (5)
MC G+0.673-0.025	0.41	7 (2)	66 (2)	15 (4)	0.27	3.7 (0.4)	66 (1)	13 (1)	0.25	4.1 (1)	66 (2)	15 (2)
Sgr B2N	0.64	10.8 (0.2)	61.3 (0.1)	15.7 (0.3)	0.45	5.6 (0.6)	64.3 (0.6)	11 (2)	0.42	5.8 (0.6)	64.9 (0.6)	13 (2)
Sgr B2M	0.14	3.8 (0.9)	65 (3)	25 (8)	0.12	3.6 (0.4)	60 (3)	28.5 (0)	0.12	2.8 (0.1)	64.3 (0.2)	23 (1)
	HCOOCH ₃ -E (9 ₄₅ → 8 ₄₄)				HCOOCH ₃ -E (9 ₁₈ → 8 ₁₇)				HCOOCH ₃ -A (9 ₁₈ → 8 ₁₇)			
MC G-0.96+0.13	≤0.09	≤0.42	≤0.09	≤0.42	≤0.09	≤0.42
MC G-0.55-0.05	≤0.12	≤0.32	≤0.12	≤0.32	≤0.12	≤0.32
MC G-0.50-0.03	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23
MC G-0.42-0.01	≤0.06	≤0.31	≤0.06	≤0.31	≤0.06	≤0.31
MC G-0.32-0.19
MC G-0.32-0.19
MC G-0.32-0.19
MC G-0.11-0.08	≤0.06	≤0.28	0.01	0.5 (0.3)	7.4 (6)	34.95 (12)	0.01	0.5 (0.3)	7.4 (6)	34 (12)
MC G-0.08-0.06	≤0.06	≤0.28	≤0.06	≤0.28	≤0.06	≤0.28
MC G-0.02-0.07	≤0.06	≤0.25	0.07	1.0 (0.5)	54 (4)	28 (8)	0.07	1.0 (0.5)	54 (4)	28 (8)
MC G+0.04+0.03	≤0.03	≤0.17	≤0.03	≤0.17	≤0.03	≤0.17
MC G+0.07-0.07	≤0.03	≤0.3	0.03	0.45 (0.1)	55 (2)	13 (4)	0.03	0.51 (0.1)	52 (3)	16 (5)
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.29	≤0.06	≤0.29	≤0.06	≤0.29
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.2	≤0.06	≤0.2	≤0.06	≤0.2
MC G+0.17+0.01	≤0.06	≤0.32	≤0.06	≤0.32	≤0.06	≤0.32
MC G+0.18-0.04	≤0.06	≤0.41	≤0.06	≤0.41	≤0.06	≤0.41
MC G+0.18-0.04	≤0.06	≤0.38	≤0.06	≤0.38	≤0.06	≤0.38
MC G+0.20-0.03	≤0.06	≤0.19	≤0.06	≤0.19	≤0.06	≤0.19
MC G+0.20-0.03	≤0.06	≤0.24	≤0.06	≤0.24	≤0.06	≤0.24

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv
	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)
MC G+0.24+0.01	0.03	0.3 (0.2)	43 (4)	11 (8)	0.06	0.6 (0.2)	36 (2)	9 (4)	0.05	0.6 (0.2)	35 (2)	11 (6)
MC G+0.62-0.10	≤0.03	≤0.19	≤0.03	≤0.19	≤0.03	≤0.19
MC G+0.64-0.08	≤0.03	≤0.28	≤0.03	≤0.28	≤0.03	≤0.28
MC G+0.67-0.06	≤0.03	≤0.3	≤0.03	≤0.3	≤0.03	≤0.3
MC G+0.68-0.10	≤0.03	≤0.25	0.02	0.3 (0.2)	14 (4)	23 (7)	0.02	0.3 (0.2)	14 (4)	23 (7)
MC G+0.70-0.01	≤0.03	≤0.25	0.03	0.9 (0.4)	56 (6)	27 (13)	0.03	0.7 (0.3)	55 (4)	23 (10)
MC G+0.70-0.09	≤0.06	≤0.41	≤0.06	≤0.41	≤0.06	≤0.41
MC G+0.71-0.13	≤0.03	≤0.56	≤0.03	≤0.56	≤0.03	≤0.56
MC G+0.76-0.05	≤0.03	≤0.31	0.02	0.7 (0.2)	35 (4)	51 (8)	0.02	0.7 (0.2)	13 (4)	51 (8)
MC G+0.694-0.017	≤0.06	≤0.39	0.05	1.0 (0.4)	51 (4)	36 (8)	0.05	1.0 (0.4)	73 (4)	36 (8)
MC G+0.693-0.027	0.03	0.7 (0.1)	73 (2)	20 (5)	0.08	1.7 (0.6)	59 (3)	38 (7)	0.08	1.7 (0.6)	80 (3)	38 (7)
MC G+0.627-0.067	≤0.09	≤0.34	≤0.09	≤0.34	≤0.09	≤0.34
MC G+0.630-0.072	≤0.06	≤0.26	0.05	0.2 (0.1)	45 (2)	4 (3)	≤0.06	≤0.26
MC G+0.672-0.014	≤0.09	≤0.47	≤0.09	≤0.47	≤0.09	≤0.47
MC G+0.640-0.046	≤0.09	≤0.39	0.06	1.0 (0.3)	62 (2)	16 (5)	0.06	1.2 (0.3)	57 (2)	18 (6)
MC G+0.635-0.069	≤0.09	≤0.34	≤0.09	≤0.34	≤0.09	≤0.34
MC G+0.659-0.035	0.09	1.3 (0.6)	58 (3)	12 (8)	0.15	3 (1)	58 (4)	20 (9)	0.13	2 (1)	65 (4)	16 (8)
MC G+0.681-0.028	0.17	2.7 (0.9)	65 (3)	15 (6)	0.30	3.4 (0.9)	63 (1)	11 (3)	0.27	3 (1)	65 (1)	11 (5)
MC G+0.673-0.025	0.15	1.8 (0.9)	64.9 (0.5)	11 (2)	0.23	3.1 (0.8)	66 (2)	13 (3)	0.25	5 (1)	65 (2)	15 (6)
Sgr B2N	0.40	4.7 (0.5)	64.7 (0.5)	11 (2)	0.59	6.6 (0.9)	63.3 (0.5)	10 (2)	0.59	5.0 (0.5)	63.7 (0.3)	8 (1)
Sgr B2M	0.08	0.8 (0.2)	64 (1)	9 (2)	0.12	1.7 (0.3)	63 (1)	14 (2)	0.12	1.8 (0.3)	64 (1)	14 (2)
	(CH ₃) ₂ O (7 ₂₆ → 7 ₁₇)				(CH ₃) ₂ O (7 ₀₇ → 6 ₁₆)				H ₂ ¹³ CO (2 ₀₂ → 1 ₀₁)			
MC G-0.96+0.13	≤0.06	≤0.26
MC G-0.55-0.05	≤0.12	≤0.32
MC G-0.50-0.03	≤0.06	≤0.23

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G-0.42-0.01	≤0.06	≤0.31
MC G-0.32-0.19
MC G-0.32-0.19
MC G-0.32-0.19
MC G-0.11-0.08	0.11	2.3 (0.2)	19.3 (0.9)	19 (2)	0.13	1.4(0.1)	17.8(0.5)	11(2)
MC G-0.08-0.06	0.07	1.2 (0.2)	29 (1)	17 (3)	≤0.12	≤0.36
MC G-0.02-0.07	0.05	1.4 (0.3)	40 (3)	26 (6)	0.18	4.5 (0.3)	45.3 (0.7)	23 (2)	0.14	3.0(0.2)	46.5(0.7)	20(2)
MC G+0.04+0.03	0.57	0.4 (0.1)	-33.5 (0)	12 (0)	≤0.09	≤0.33
MC G+0.07-0.07	0.09	2.2 (0.2)	53 (1)	22 (3)	0.11	2.2(0.2)	55.2(0.9)	19(1)
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.29	≤0.09	≤0.65
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.2	≤0.09	≤0.44
MC G+0.17+0.01	≤0.06	≤0.32	≤0.09	≤0.31
MC G+0.18-0.04	≤0.06	≤0.41	≤0.09	≤0.64
MC G+0.18-0.04	≤0.06	≤0.38	≤0.09	≤0.59
MC G+0.20-0.03	≤0.06	≤0.19	≤0.09	≤0.31
MC G+0.20-0.03	≤0.06	≤0.24	≤0.09	≤0.39
MC G+0.24+0.01	0.2	3.3 (0.2)	36.1 (0.4)	16 (1)	0.11	2.5(0.3)	41(1)	21(3)
MC G+0.62-0.10	0.05	0.9 (0.1)	58 (1)	18 (4)	0.07	0.8(0.1)	62.3(0.8)	11(2)
MC G+0.64-0.08	≤0.06	≤0.28	≤0.12	≤0.39
MC G+0.67-0.06	0.05	0.8 (0.1)	55 (1)	15 (4)	0.07	0.5(0.1)	53.2(0.8)	6(1)
MC G+0.68-0.10	0.06	1.1 (0.2)	23 (1)	16 (4)	0.04	0.62(0.1)	17(2)	14(3)
MC G+0.70-0.01	0.07	2.1 (0.2)	68 (1)	27 (4)	0.10	0.97(0.1)	57.2(0.6)	9(1)
MC G+0.70-0.09	≤0.06	≤0.41	≤0.15	≤0.6
MC G+0.71-0.13	≤0.03	≤0.56	≤0.15	≤2.42
MC G+0.76-0.05	0.05	2.0 (0.2)	28 (1)	33 (3)	≤0.15	≤0.75

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.694-0.017	≤0.12	≤0.7	0.16	4.1 (0.3)	63.8 (0.9)	24 (2)
MC G+0.693-0.027	0.09	2.0 (0.4)	60 (2)	22 (5)	0.26	5.7 (0.3)	68.5 (0.6)	20 (2)
MC G+0.627-0.067	0.06	0.6 (0.1)	50 (1)	10 (2)	0.17	2.0 (0.3)	49.1 (0.7)	11 (2)
MC G+0.630-0.072	≤0.09	≤0.34	0.10	0.8 (0.2)	45.6 (0.7)	8 (2)
MC G+0.672-0.014	≤0.09	≤0.5	0.09	2.4 (0.4)	60 (2)	25 (4)
MC G+0.640-0.046	≤0.12	≤0.72	0.08	2.9 (0.4)	63 (2)	34 (6)
MC G+0.635-0.069	≤0.12	≤0.47	0.02	1.3 (0.3)	45 (2)	16.6 (4)
MC G+0.659-0.035	0.39	7.8 (0.5)	61.3 (0.6)	19 (2)
MC G+0.681-0.028	0.46	8.4 (0.9)	67.7 (0.9)	17 (2)
MC G+0.673-0.025	0.44	7.3 (0.2)	67.3 (0.4)	16 (1)
Sgr B2N	0.45	9.2 (0.9)	64.9 (0.8)	19 (2)	0.74	15 (2)	65 (1)	18 (3)
Sgr B2M	≤0.09	≤0.67	0.22	4.5 (0.8)	64 (2)	19 (4)
	HCOOH (4 ₂₂ → 3 ₂₁)				HCOOH (5 ₀₅ → 4 ₀₄)				CH ₃ COOH-A (10 _{*10} → 9 _{*9})			
MC G-0.96+0.13	≤0.06	≤0.26	≤0.09	≤0.42	≤0.09	≤0.42
MC G-0.55-0.05	≤0.12	≤0.32	≤0.12	≤0.32
MC G-0.50-0.03	≤0.06	≤0.23	≤0.06	≤0.23
MC G-0.42-0.01	≤0.06	≤0.31	≤0.06	≤0.31
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.24
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.15
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.23
MC G-0.11-0.08	≤0.03	≤0.25	0.09	1.3 (0.2)	20.5 (0.9)	13 (2)	≤0.06	≤0.28
MC G-0.08-0.06	≤0.06	≤0.25	0.05	0.8 (0.2)	34 (2)	14 (5)	≤0.06	≤0.28
MC G-0.02-0.07	0.05	1.2 (0.4)	49 (3)	23 (5)	0.18	2.3 (0.5)	49 (2)	24 (6)	≤0.06	≤0.25
MC G+0.04+0.03	≤0.03	≤0.16	≤0.03	≤0.17	≤0.03	≤0.17
MC G+0.07-0.07	0.05	0.4 (0.2)	48 (2)	7.5 (4)	0.06	1.1 (0.3)	52 (2)	16 (5)	≤0.06	≤0.27

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.13+0.02	≤0.03	≤0.12	≤0.04	≤0.29	≤0.06	≤0.29
MC G+0.13+0.02	≤0.03	≤0.12	≤0.04	≤0.2	≤0.06	≤0.2
MC G+0.17+0.01	≤0.03	≤0.12	0.04	0.6 (0.1)	50 (2)	14 (4)	≤0.06	≤0.32
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.17	≤0.06	≤0.41	≤0.03	≤0.17
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.15	≤0.06	≤0.38	≤0.06	≤0.38
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.09	≤0.06	≤0.19	≤0.06	≤0.19
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.11	≤0.06	≤0.24	≤0.06	≤0.24
MC G+0.24+0.01	0.05	0.8 (0.5)	38 (5)	14 (8)	0.07	1.6 (0.3)	38 (2)	21 (5)	≤0.06	≤0.22
MC G+0.62-0.10	≤0.03	≤0.21	≤0.03	≤0.19	≤0.03	≤0.21
MC G+0.64-0.08	≤0.06	≤0.25	≤0.03	≤0.28	≤0.03	≤0.28
MC G+0.67-0.06	≤0.06	≤0.3	≤0.03	≤0.3	≤0.03	≤0.3
MC G+0.68-0.10	≤0.03	≤0.24	≤0.03	≤0.25	≤0.03	≤0.25
MC G+0.70-0.01	≤0.03	≤0.32	0.06	0.8 (0.1)	60 (1)	13 (3)	≤0.03	≤0.32
MC G+0.70-0.09	≤0.09	≤0.72	≤0.06	≤0.41	≤0.06	≤0.41
MC G+0.71-0.13	≤0.09	≤1.25	≤0.03	≤0.56	≤0.03	≤0.56
MC G+0.76-0.05	≤0.03	≤0.3	0.02	0.8 (0.2)	33 (8)	45 (19)	≤0.03	≤0.31
MC G+0.694-0.017	≤0.12	≤0.67	0.09	2.7 (0.4)	67 (2)	28 (4)	≤0.06	≤0.39
MC G+0.693-0.027	0.18	3.6 (0.7)	70 (1)	19 (1)	0.14	2.8 (0.4)	69 (1)	19 (3)	≤0.06	≤0.31
MC G+0.627-0.067	≤0.09	≤0.31	0.06	0.9 (0.3)	51 (2)	13 (3)	≤0.09	≤0.34
MC G+0.630-0.072	≤0.06	≤0.26	0.08	0.5 (0.1)	44.1 (0.9)	6 (2)	≤0.06	≤0.26
MC G+0.672-0.014	≤0.09	≤0.43	≤0.09	≤0.47	≤0.09	≤0.47
MC G+0.640-0.046	≤0.09	≤0.51	0.05	1.3 (0.3)	64 (4)	25 (6)	≤0.09	≤0.39
MC G+0.635-0.069	0.09	0.9 (0.3)	48 (2)	10 (4)	≤0.09	≤0.34	≤0.09	≤0.34
MC G+0.659-0.035	0.13	2.0 (0.7)	58 (2)	14 (6)	0.21	4.5 (0.7)	62 (1)	21 (4)	≤0.06	≤0.38
MC G+0.681-0.028	0.17	4.7 (0.4)	63 (0.9)	25 (2)	0.35	8 (1)	75 (2)	22 (4)	≤0.09	≤0.41

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv	T_a^*	$T_a^* dv$	V_{LSR}	Δv
	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(K)	(K km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)	(km s ⁻¹)
MC G+0.673-0.025	0.16	3.5 (0.3)	64 (1)	20.8 (2)	0.34	6 (1)	73 (1)	18 (3)	≤0.03	≤0.22
Sgr B2N	0.25	5.1 (0.3)	60.1 (0.4)	19 (2)	0.58	9 (2)	73 (1)	15 (1)	≤0.18	≤1.01
Sgr B2M	≤0.06	≤0.33	0.07	1.9 (0.6)	65 (3)	27 (3)	≤0.06	≤0.42
	CH ₃ COOH-A (8 _{*8} → 7 _{*7})				C ₂ H ₅ OH (6 ₃₄ → 5 ₂₃)				(CH ₃) ₂ O (5 ₃₃ → 5 ₂₄),(7 ₁₇ → 6 ₀₆),(6 ₃₄ → 6 ₂₅)			
MC G-0.96+0.13	≤0.06	≤0.26	≤0.27	≤1.17	≤0.09	≤0.39
MC G-0.55-0.05	≤0.27	≤0.8	≤0.06	≤0.13
MC G-0.50-0.03	≤0.21	≤0.76	≤0.42	≤1.44
MC G-0.42-0.01	≤0.18	≤0.74	≤0.24	≤1.06
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.24	≤0.24	≤0.90	≤0.24	≤0.90
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.15	≤0.24	≤0.58	≤0.24	≤0.58
MC G-0.32-0.19	≤0.06	≤0.23	≤0.24	≤0.88	≤0.24	≤0.88
MC G-0.11-0.08	≤0.03	≤0.25	≤0.15	≤0.89	≤0.48	≤1.48
MC G-0.08-0.06	≤0.06	≤0.25	≤0.09	≤0.49	≤0.54	≤1.70
MC G-0.02-0.07	≤0.03	≤0.22	≤0.18	≤0.99	≤0.48	≤1.84
MC G+0.04+0.03	≤0.03	≤0.16	≤0.09	≤0.35	≤0.03	≤1.45
MC G+0.07-0.07	≤0.06	≤0.27	≤0.18	≤0.99	≤0.54	≤1.98
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.33	≤0.12	≤0.71	≤0.56	≤3.54
MC G+0.13+0.02	≤0.06	≤0.23	≤0.12	≤0.48	≤0.56	≤3.24
MC G+0.17+0.01	≤0.03	≤0.12	≤0.09	≤0.35	≤0.54	≤1.9
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.17	≤0.12	≤0.70	≤0.66	≤3.05
MC G+0.18-0.04	≤0.03	≤0.15	≤0.12	≤0.64	≤0.66	≤2.79
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.09	≤0.12	≤0.34	≤0.17	≤1.68
MC G+0.20-0.03	≤0.03	≤0.11	≤0.12	≤0.42	≤0.17	≤2.1
MC G+0.24+0.01	≤0.09	≤0.39	≤0.24	≤1.11	≤0.54	≤1.74
MC G+0.62-0.10	≤0.03	≤0.21	≤0.12	≤0.59	≤0.51	≤1.22

TABLA C.1: PARÁMETROS OBSERVADOS

Fuente	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)	T_a^* (K)	$T_a^* dv$ (K km s ⁻¹)	V_{LSR} (km s ⁻¹)	Δv (km s ⁻¹)
MC G+0.64-0.08	≤0.06	≤0.25	≤0.12	≤0.49	≤0.51	≤1.19
MC G+0.67-0.06	≤0.06	≤0.3	≤0.15	≤0.9	≤0.54	≤2.2
MC G+0.68-0.10	≤0.03	≤0.24	≤0.12	≤0.63	≤0.51	≤3.9
MC G+0.70-0.01	≤0.03	≤0.32	≤0.15	≤0.65
MC G+0.70-0.09	≤0.09	≤0.72	≤0.15	≤0.82	≤0.51	≤2.15
MC G+0.71-0.13	≤0.09	≤1.25	≤0.15	≤2.42	≤0.66	≤7.30
MC G+0.76-0.05	≤0.03	≤0.3	≤0.09	≤0.67	≤0.48	≤2.5
MC G+0.694-0.017	≤0.12	≤0.67
MC G+0.693-0.027	≤0.09	≤0.46
MC G+0.627-0.067	≤0.09	≤0.31
MC G+0.630-0.072	≤0.06	≤0.26
MC G+0.672-0.014	≤0.09	≤0.43
MC G+0.640-0.046	≤0.09	≤0.51
MC G+0.635-0.069	≤0.09	≤0.4
MC G+0.659-0.035	≤0.09	≤0.66
MC G+0.681-0.028	≤0.09	≤0.48
MC G+0.673-0.025	≤0.09	≤0.46
Sgr B2N	≤0.06	≤0.27
Sgr B2M	≤0.06	≤0.33	≤0.36	≤1.9

Publicaciones

PUBLICACIONES EN REVISTAS INTERNACIONALES CON SISTEMA DE ARBITRAJE

1. “*Organic molecules in the Galactic center. Hot core chemistry without hot cores*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, A. Rodríguez–Franco, S. Martín, N. J. Rodríguez–Fernández, & P. de Vicente 2006, *A&A*, 455, 971.
2. “*Organic chemistry in the dark clouds L1448 and L183. A Unique grain mantle composition*”;
M. A. Requena–Torres, N. Marcelino, I. Jiménez–Serra, J. Martín–Pintado, S. Martín, & R. Mauersberger 2007, *ApJ*, 655, L37.
3. “*The largest organic molecule repository: the Galactic center*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, S. Martín, & M. R. Morris 2007, enviado al *ApJ*.
4. “*Detection of two new interstellar molecules: ciano ketene and methylene cyclo propenone*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, S. Martín, & M. R. Morris, 2007, en preparación.
5. “*Tracing heating mechanisms with HNCO: the Galactic center*”;
S. Martín, J. Martín–Pintado, **M. A. Requena–Torres**, & R. Mauersberger, 2007, en preparación

PUBLICACIONES EN ACTAS DE CONGRESOS INTERNACIONALES

1. “*Alcohol chemistry in the Galactic center. Hot core chemistry without hot core*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, A. Rodríguez–Franco, S. Martín & Rodríguez–Fernández, N. J. 2005, en *Proceedings of the 231 IAU Symposium: Astrochemistry Throughout the Universe. Recent Successes and Current Challenges*, eds. D. C. Lis, G. A. Blake & E. Herbst. Cambridge University Press.

OTRAS CONTRIBUCIONES EN CONGRESOS INTERNACIONALES

1. “*Alcohol chemistry in the Galactic center. Hot core chemistry without hot core*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, A. Rodríguez–Franco, S. Martín, N. J. Rodríguez–Fernández, & P. de Vicente, en *Complex molecules in space. Present status and prospects with ALMA*, Fuglsocentret, Dinamarca, 08–11 de Mayo de 2006.
2. “*The Galactic center molecular clouds. A peculiar shock chemistry*”;
M. A. Requena–Torres, J. Martín–Pintado, S. Martín, N. Marcelino, I. Jiménez–Serra, R. Mauersberger, A. Rodríguez–Franco, N. J. Rodríguez–Fernández, & P. de Vicente, en *Science with ALMA: A new era for Astrophysics*, Madrid, 13–17 de Noviembre de 2006.

Bibliografía

- Aikawa, Y., Miyama, S. M., Nakano, T., & Umebayashi, T. 1996, *ApJ*, 467, 684
- Al-Halabi, A, Fraser, H. J., Kroes, G. J., & van Dishoeck, E. F. 2004, *A&A*, 422, 777
- Allen, M., & Robinson, G. W. 1977, *ApJ*, 212, 396
- Avila-Reese, V., & Vázquez-Semadeni, E. 2001, *ApJ*, 553, 645
- Bachiller, R., Martín-Pintado, J., Tafalla, M., Cernicharo, J., & Lazareff, B. 1990, *A&A*, 231, 174
- Bachiller, R., & Pérez-Gutiérrez, M. 1997, *ApJ*, 487, L93
- Ball, J. A., Gottlieb, C. A., Lilley, A. E., & Radford, H. E. 1970, *ApJ*, 162, L203
- Bally, J., Stark, A. A., Wilson, R. W., & Henkel, C. 1987, *ApJS*, 65, 13
- Bally, J., Yusef-Zadeh, F., & Hollis, J. M. 1989, IAU Symp. 136: The Center of the Galaxy, 136, 189
- Bauder, A. 1979, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 8, 583
- Becklin, E. E., & Neugebauer, G. 1968, *A&A*, 151,145
- Bennett, C. J., Osamura, Y., Lebar, M. D., & Kaiser, R. I. 2005, *ApJ*, 634, 698
- Bennett, C. J., & Kaiser, R. I. 2007, *ApJ*, 661, 899
- Binney, J., Gerhard, O. E., Stark, A. A., Bally, J., & Uchida, K. I. 1991, *MNRAS*, 252, 210
- Bisschop, S. E., Jorgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & de Wachter, E. B. 2007, *A&A*, 465, 913
- Black, J. H., 1987, *Interstellar Processes*, 731
- Blacke, G. A., Kaughlin, K. B., Cohen, R. C., Busarow, K. L., Saykally, R. J., 1987, *ApJ*, 316, 45
- Blom, C. E., & Gauder, 1982, *Chem. Phys. Lett.* 88, 55
- Blukis, U., Kasai, P. H., & Myers, R. J. , 1963, *J. Chem. Phys.*, 38, 2753
- Bohlin, R. C. 1975, *ApJ*, 200, 402
- Boland, W., de Graauw, Th., Lidholm, S., & Lee, T. J. 1983, *ApJ*, 271, 183

- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., Williams, J. P., Castets, A., Caux, E., Cazaux, S., Maret, S., Parise, B., & Tielens, A. G. G. M. 2004a, *ApJ*, 615, 354
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Neri, R., Williams, J. P., Caux, E., Cazaux, S., Lefloch, B., Maret, S., & Tielens A. G. G. M. 2004b, *ApJ*, 617, L69
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Williams, J. P., & Lefloch, B. 2007, *A&A*, 463, 601
- Boudin, N., Schutte, W. A., & Greenberg, J. M. 1998, *A&A*, 331, 749
- Brown R. D., Crofts, J. G., Gardner, F. F., Godfrey, P. D., Robinson, B. J., & Whiteoak, J. B. 1975, *ApJ*, 197, L29
- Brown P. D., Charnley S.B. and Millar T.J. 1988 *MNRAS*, 231, 409
- Brünken, H. S. P., Müller, H. S. P., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2003, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 5, 1515
- Buch, V., & Zhang, Q. 1991, *ApJ*, 379, 647
- Burkhard, D. G., & Dennison, D. M. 1959, *J. Molec. Spectrosc.*, 3, 299
- Butler, R. A. H., De Lucia, F. C., Petkie, D. T., Mollendal, H., Horn, A., & Herbst, E. 2001, *ApJS*, 134, 319
- Caselli, P., Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993, *ApJ*, 408, 548
- Caselli, P. 2002, *Planetary and Space Science*, 50, 1133
- Charnley, S. B., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1992, *ApJ*, 399, L71
- Charnley, S. B., Kress, M. E., Tielens, A. G. G. M., & Millar, T. J. 1995, *ApJ*, 448, 232
- Charnley, S. B. 1997, *ApJ*, 481, 396
- Charnley, S. B. 2004, *Advances in Space Research*, 33, 23, Hollenbach, D. J., & Thronson, Jr. H. A.
- Charnley, S. B., & Rodgers, S. D. 2005, *IAU 231 Symposium book "Astrochemistry: Recent Successes and Future Challenges"* Ed. Lis, D. C., Blake, G. A., & Herbst, E.
- Christen, D., Coudert, L. H., Suenram, R. D., & Lovas, F. J. 1995, *J. Mol. Spectrosc.*, 172, 57
- Christen, D., & Müller, S. P. 2004, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 5, 3600
- Churchwell, E., & Winnewisser, G. 1975, *A&A*, 45, 229
- Churchwell, E., Nash, A., Rahe, J., Walmsley, C. M., Lochner, O., & Winnewisser, G. 1980, *ApJ*, 241, L169
- Chuss, D. T., Davidson, J. A., Dotson, J. L., Dowell, C. D., Hildebrand, R. H., Novak, G., & Vaillancourt, J. E. 2003, *ApJ*, 599, 1116
- Clark, F. O., Lovas, F. J., & Johnson, D. R. 1979, *ApJ*, 229, 553

- Coil, A. L., & Ho, P. T. P. 1999, *ApJ*, 513, 752
- Combes, F., Gerin, M., Wootten, S., Wlodarczak, G., Clausset, F., & Encrenaz, P. J. 1987, *A&A*, 180, L13
- Combes, F. 1996, IAU Symp. 169: Unsolved Problems of the Milky Way
- Cox, P., & Laureijs, R. 1989, Proc. IAU Symp. 136, The Center of the Galaxy. Kluwer, Dordrecht, p. 121
- Crovisier, J., Bockelée-Morvan, D., Biver, N., Colom, P., Despois, D., & Lis, D. C. 2004a, *A&A*, 418, L35
- Crovisier, J., Bockelée-Morvan, N., Colom, D., Biver, P., Despois, D., Lis, D. C. et al. 2004b, *A&A*, 418, 1141
- Curiel, S., Torrelles, J. M., Rodríguez, L. F., Gómez, J. F., & Anglada, G. 1999, *ApJ*, 527, 310
- Curl, R. F. 1958, *J. Chem. Phys.*, 30, 1529
- Dahmen, G., Hüttemeister, S., Wilson, T. L., Mauersberger, R., et al. 1997, *A&AS* 126, 197
- Dahmen, G., Hüttemeister, S., Wilson, T. L., Mauersberger, R., et al. 1998, *A&A*, 331, 959
- de Vicente, P., Martín-Pintado, J., & Wilson, T. L. 1997, *A&A*, 320, 957
- Dickens, J. E., Irvine, W. M., Ohishi, M., Ikeda, M., Ishikaw, S., Nummelin, A., & Hjalmarson, Å. 1997, *ApJ*, 489, 753
- Dickens, J. E., Irvine, W. M., Snell, R. L., Bergin, E. A., Schloerb, F. P., Pratap, P., & Mirralles, M. P. 2000, *ApJ*, 542, 870
- Doty S. D., van Dishoeck E. F., van der Tak F. F. S., & Boonman A. M. S. 2002, *A&A* 389, 446
- Draine, B. T., & Salpeter, E. E. 1979, *ApJ*, 231,438
- Draine, B. T. 1980, *ApJ*, 241, 1021
- Draine, B. T., & McKee, C. F. 1993, *ARA&A*, 31, 373
- Drda, K., Knapp, G. R., & van Dishoeck, E. F. 1989, *ApJ*, 345, 815
- Ehrenfreund, P., & Charnley, S. B. 2000, *ARA&A*, 38, 427
- Eisenhauer, F., Genzel, R., Alexander, T. et al. 2005, *ApJ*, 628, 246
- Elmegreen, B. G., & Scalo, J. 2004, *ARA&A*, 42, 211
- Englmaier, P., & Gerhard, O. 1999, *MNRAS*, 304, 512

- Figer, D. F., Najarro, F., Morris, M., McLean, I. S., Geballe, T. R., Ghez, A. M., & Langer, N. 1998, *ApJ*, 506, 384
- Figer, D. F., Kim, S. S., Serabyn, E., Rich, R. M., & McLean, I. S. 1999a, *ApJ*, 525, 750
- Figer, D.F., McLean, I.S., & Morris, M. 1999b, *ApJ*, 514, 202
- Figer, D. F., Najarro, F., Gilmore, D., Morris, M. et al. 2002, *ApJ*, 581, 258
- Figer, D. F., Rich, R. M., Kim, S. S., Morris, M., & Serabyn, E. 2004a, *ApJ*, 601, 319
- Figer, D. F. 2004b, ASPC proceedings, vol 322, The Formation and Evolution of Massive Young Star Clusters, astro-ph/0409415 v1
- Friberg, P., Madden, S. C., Hjalmarsen, Å., & Irvine, W. M. 1988, *A&A*, 195, 281
- Fuchs, G. W., Fuchs, U., Giesen, T. F., & Wyrowski, F. 2005, *A&A*, 444, 521
- Fux, R. 1999, *A&A*, 345, 787
- Garrod, R. T., & Herbst, E. 2006, *A&A*, 457, 927
- Garrod, R. T., Park, I.-H., & Herbst, E. 2006, *Roy. soc. of Chem.*, 133, 51
- Gaume, R. A., & Claussen, M. J. 1990, *ApJ*, 351, 538
- Genzel, R., 1991 en *The Galactic Interstellar Medium*, Eds: Pfenniger & Bartholdi, Springer Verlag.
- Genzel, R., Pichon, C., Eckart, A., Gerhard, O. E., & Ott, T. 2000, *MNRAS*, 317, 348
- Geppert, W. D., Hamberg, M., Thomas, R. D., Österdahl, F., Hellberg, F. et al. 2006. *Faraday Discuss.*, 133, 177
- Ghez, A. M., Salim, S., Hornstein, S. D., Tanner, A., Lu, J. R., Morris, M., Becklin, E. E., & Duchêne, G. 2005, *ApJ*, 620, 744
- Gordy, W., & Cook, R. L. 1984, *Microwave Molecular Spectroscopy* (New York: Wiley)
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M. et al. 2006, *A&A*, 456, 565
- Gottlieb, C. A., Ball, J. A., Gottlieb, E. W., & Dickinson, D. F. 1979, *ApJ*, 227, 422
- Grim, R. J. A., Bass, F., Geballe, T. R., Greenberg, J. M., & Schutte, W. 1991, *A&A*, 243, 473
- Groner, P., Albert, S., Herbst, E., & de Lucia, F. C. 1998, *ApJ*, 500, 1059
- Güsten, R., Walmsley, C.M., Pauls T. 1981, *A&A*, 103, 197
- Güsten, R. 1989, *IAU Symp. 136: The Center of the Galaxy*, 136, 89
- Güsten, R., & Philipp, S. 2004, *The Dense Interstellar Medium in Galaxies*, Springer proceedings in physics, Vol. 91, p.253, astro-ph/0402019 v1

- Halfen, D. T., Apponi, A. J., Woolf, N., Polt, R., & Ziurys, L. M. 2006, *ApJ*, 639, 237
- Hasegawa, T. I., Herbst, E., & Leung, C. M. 1992, *ApJS*82, 167
- Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993a, *MNRAS*, 261, 83
- Hasegawa, T. I., & Herbst, E. 1993b, *MNRAS*, 263, 589
- Herbst, E., & Leung, C. M. 1986, *MNRAS*, 222, 689
- Herbst, E., & Leung, C. M. 1989, *ApJ*, 69, 271
- Herbst E. 2001, *Chem. Soc. Rev.*, 30, 168
- Hiraoka, K., Sato, T., Sato, S., Sogoshi, N., Yokoyama, T., Takashima, H., & Kitagawa, S. 2004, *ApJ*, 577, 265
- Hocking, W. H., Gerry, M. C. L., & Winnewisser, G. 1974, *ApJ*, 187, 89
- Hocking, W. H., Gerry, M. C. L., & Winnewisser, G. 1975, *Can. Journal of Phys.*, 53, 1869
- Hollenbach, D. J., & Salpeter, E. E. 1970, *J. Chem. Phys.*, 77,4156
- Hollis, J. M., Lovas, F. J., & Jewell, P. R. 2000, *ApJ*, 540, L107
- Hollis, J. M., Vogel, S. N., Snyder, L. E. Jewell, P. R., & Lovas, F. J. 2001, *ApJ*, 554, L81
- Hollis, J. M., Lovas, F. J., Jewell, P. R., & Coudert, L. H. 2002, *ApJ*, 571, L59
- Hollis, J. M., Jewell, P. R. , Lovas, F. J., & Remijan, A. 2004a, *ApJ*, 613, L45
- Hollis, J. M., Jewell, P. R. , Lovas, F. J., Remijan, A., & Mcellendal, H. 2004b, *ApJ*, 610, L21
- Hollis, J. M., Remijan, A. J., Jewell, P. R. and Lovas, F. J., 2006a, *ApJ*, 642, 93
- Hollis, J. M, Lovas, F. J., Remijan, A. J., Jewell, P. R., Ilyushin, V. V., and Kleiner, I. ,2006b, *ApJ*, 643, L25
- Horn, A., Mcellendal, H., Sekiguchi, O., Uggerud, E., Roberts, H., Herbst, E., Viggiano, A. A., & Fridgen, T. D. 2004, *ApJ*, 611, 605
- Hughes, R. H., Good, W. E., & Coles, D. K. 1951, *Phys. Rev.*, 84, 418
- Hüttemeister, S., Wilson, T. L., Bania, T. M., & Martín-Pintado, J. 1993a, *A&A*, 280, 255
- Hüttemeister 1993b, PhD dissertation, Bonn University
- Hüttemeister, S., Dahmen, G., Mauesberer, R., Henkel, C., Wilson, T. L., & Martín-Pintado, J. 1998, *A&A*, 334, 646
- Iglesias, E. 1977, *ApJ*, 218, 697
- Ikeda, M., Ohishi, M., Nummelin, A., Dickens, J. E., Bergman, P., Hjalmarson, Å., & Irvine, W. M. 2001, *ApJ*, 560, 792

- Ilyushin, V. V., Alekseev, E. A., Dyubko, S. F., Podnos, S. V., Kleiner, I., Margulès, L., Wlodarczak, G., Demaison, J., cosléou, J., Maté, B., Karyakin, E. N., Golubiatnikov, G. Y., Fraser, G. T., Suenram, R. D., & Hougen, J. T. 2001, *J. Molec. Spect.*, 205, 286
- Imanishi, M., Nakanishi, K., & Kohno, K. 2006, *The Astronomical Journal*, 131, 2888
- Irvine, W. M., Goldsmith, P. F., & Hjalmarson, Å. 1987, *Interstellar processes*. Hollenbach, D. J., Tromson, H. A. (eds.) Reidel Dordrecht, p. 561
- Irvine, W. M., Friberg, P., Kaifu, N., Matthews, H. E., Minh, Y. C., Ohishi, M., & Ishikawa, S. 1990, *A&A*, 229, L9
- Jackson, J.M., Armstrong, J.T., Barrett, A.H. 1984, *ApJ*, 280, 608
- Jackson, J. M., Heyer, M. H., Paglione, T. A. D., & Bolatto, A. D., 1996, *ApJ*, 456, L91
- Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., & Marcelino, N. 2004 *ApJ*, 603, L49
- Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., & Martín, S. 2005, *ApJ*, 627, L121
- Johnson, D. R., Lovas, F., & Kirchhoff, W. H. 1971, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1, 1011
- Jones, A. P., & Williams, D. A. 1985, *MNRAS*, 217, 413
- Jørgensen, J. K., Schöier, F. L., & van Dishoeck, E. F. 2005, *A&A*, 437, 501
- Jørgensen, J. K., Bourke, T. L., Myers, P. C., Di Francesco, J., van Dishoeck, E. F., Lee, C.-F., et al. 2007, *ApJ*, 659, 479
- Kaufman, M. J., & Neufeld, D. A. 1996, *ApJ*, 456, 611
- Killen, N. E. B., Lo, K. Y., & Crutcher, R. 1992, *ApJ*, 385, 585
- Kim, S., Martin, C. L., Stark, A. A., & Lane, A. P. 2000, *American Astronomical Society Meeting*, 197, 0404
- Knez, C., Boogert, A.C.A., Pontoppidan, K. M., Kessler-Silacci, J., van Dishoeck, E.F., Evans II, N. J., Augereau, J.-C., Blake, G. A., & Lahuis, F. 2005, *ApJ*, 635, L145
- Krabbe, A., Genzel, R., Eckart, A., & Najarro, F. 1995, *ApJ*, 447, L95
- Krips, M., Neri, R., García-Burillo, S., Combes, F., Martín, S., & Eckart, A. 2007, submitted
- Kuan, Y.-J., & Snyder, L. E. 1996, *ApJ*, 470, 981
- Kuan, Y.-J., Charnley, S. B., Wilson, T. L., Ohishi, M., Huang, H.-C., & Snyder, L. E. 1999, *Bulletin Am. Ast. Soc.*, 31, 942
- Kuan, Y.-J., Huang, H.-C., Charnley, S. B., Hirano, N., Takakuwa, S., Wilner, D. J., Liu, S.-Y., Ohashi, N., Bourke, T. L., Qi, C., & Zhang, Q. 2004, *ApJ*, 616, L27
- Lang, C. C. 2002, *GCNEWS*, 14, 5

- LaRosa, T. N., Kassim, N. E., Lazio, T. J. W., & Hyman, S. D. 2000, *AJ*, 119, 207
- Lees R. M., & Baker, J. G. 1986, *J. Chem. Phys.*, 48, 5299
- Leitch-Devlin, M. A., & Williams, D. A. 1985, *MNRAS*, 213, 295
- Leung, C. M., Herbst, E., & Huebner, W. f. 1984, *ApJS*, 56, 231
- Lindqvist, M., Sandqvist, A., Winnberg, A., Johansson, L.E.B., Nyman, & L.-A. 1995, *A&AS*, 113, 257L
- Lis, D. C., & Goldsmith, P. F. 1990, *ApJ*, 365, 195
- Lis, D. C., & Carlstrom, J. E.. 1994, *ApJ*, 424, 189
- Lis, D. C., & Menten, K. M. 1998, *ApJ*, 507, 794
- Lister, D. G., Macdonald, J. N., & Owen, N. L. 1978, *Internal Rotation and Inversion*, Academic Press
- Liszt, H. S., & Spiker, R. W. 1995, *ApJS*, 98, 259
- Liu, S.-Y., Girart, J. M., Mehringer, D. M., & Snyder, L. E. 2001, *ApJ*, 552, 654
- Liu, S.-Y., Girart, J. M., Remijan, A. J., & Snyder, L. E. 2002, *ApJ*, 576, 255
- Lovas, F. J., Lutz, H., & Dreizler, H. 1979, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 8, 1051
- Lovas, F. J., Hollis, J. M., Remijan, A. J., & Jewell, P. R. 2006, *ApJ*, 645, L137
- Mac Low, M.-M., Dlessen, R. S., Burkert, A., & Smith, M. D. 1998, *Phys. Rev. Lett.*, 80, 2754
- Marcelino et al. 2007, in preparation
- Maret, S., Ceccarelli, C., Tielens, A. G. M., Caux, E., Lefloch, B., Faure, A., Castets, A., & Flower, D. R. 2005, *A&A*, 442, 527
- Martín, S. 2006a, memoria de tesis.
- Martín, S., Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Henkel, C., & García-Burillo, S. 2006b, *ApJS*, 164, 450
- Martín-Pintado, J., de Vicente, P., Wilson, T. L., & Johnston, K. J. 1990, *A&A*, 236, 193
- Martín-Pintado, J., Bachiller, R., & Fuente, A. 1992, *A&A*, 254, 315
- Martín-Pintado, J., de Vicente, P., Fuente, A., & Planesas, P. 1997, *ApJ*, 482, L45
- Martín-Pintado, J., Gaume, R. A., Rodríguez-Fernández, N. J., de Vicente, P., & Wilson, T. L. 1999, *ApJ*, 519, 667
- Martín-Pintado, J, de Vicente, P., Rodríguez-Fernández, N. J., Fuente, A., & Planesas, P. 2000, *A&A*, 356, L5

- Martín-Pintado, J., Rizzo, J. R., de Vicente, P., Rodríguez-Fernández, N. J., & Fuente, A. 2001, *ApJ*, 548, L65
- Masuda, K., Takahashi, J., & Mukai, T. 1998, *A&A*, 330, 773
- Mauersberger, R., Henkel, C., Wilson, T.L., & Harju, J. 1989, *A&A*, 226, L5
- Mauersberger, R., & Henkel, C. 1993, *Rev. Modern Astron.* 6, 69
- Mauersberger, R., Henkel, C., Weiss, A., Peck, A. B., & Hagiwara, Y. 2003, *A&A*, 403, 561
- Mayer-Hasselwander, H. A., Bersch, D. L., & Dingus, B. L. 1998, *A&A*, 335, 161
- McQuinn, K.B.W., Simon, R., Law, C.J. et al. 2002, *ApJ*, 576, 274
- Mehring, D. M., Yusef-Zadeh, F., Palmer, P., & Goss, W. M. 1992, *ApJ*, 401, 168
- Mehring, D. M., Snyder, L. E., & Miao, Y. 1997, *ApJ*, 480, L71
- Meier, D.S. & Turner, J.L. 2005, *ApJ*, 618, 259
- Menten, K. M., Walmsley, C. M., Henkel, C., & Wilson, T. L. 1986, *A&A* 157, 318
- Mezger, P. G., Duschl, W. J., & Zylka, R. 1996, *A&AR*, 7, 289
- Millar T.J., Brown, P. D., Olofsson, H., & Hjalmarsen, A. 1988, *A&A*, 205, 5
- Millar, T. J., Herbst, E., & Charnley, S. B. 1991, *ApJ*, 369, 147
- Minh, Y. C., Irvine, W. M., & Ziurys, L. M. 1988, *ApJ*, 334, 175
- Minh, Y.C., Haikala, L., Hjalmarsen, Å., & Irvine, W. M. 1998, *ApJ*, 498, 261
- Minh, Y. C., Kim, S.-J., Pak, S., Lee, S., Irvine, W. M., & Nyman, L.-A. 2005, *New Astronomy*, 10, 425
- Minh, Y.C., & Irvine, W.M. 2006, *NewA*, 11, 594
- Morris, M., & Serabyn, E. 1996, *ARA&A*, 34, 645
- Morris, M., Uchida, K., & Do, T. 2006, *Nature*, 440, 308
- Morris, M. 2007, Galactic Center Workshop 2006, *Journal of Physics: Conference Series* 54, p 1, astro-ph/0701050
- Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005 *J. Mol. Struct.* 742, 215
- Novozamsky, J.H., Schutte, W.A., & Keane, J.V. 2001, *A&A*, 379, 588
- Nummelin, A., Dickens, J. E., Bergman, P., Hjalmarsen, Å., Irvine, W. M., Ikenda, M., & Ohishi, M. 1998, *A&A*, 337, 275
- Odenwald, S. F., & Fazio, G. G. 1984, *ApJ*, 283, 601
- Oesterling, L. C., Albert, S., De Lucia, F. C., Sastry, K. V. L. N., & Herbst, E. 1999, *ApJ*, 521, 255

- O’Gorman, J. M., Shand, W., & Schomaker, V., 1950, *J. Am. Chem. Soc.*, 72, 4222
- Oka, T., Hasegawa, T., Sato, F., Tsuboi, M., & Miyazaki, A. 1998, *ApJS*, 118, 455
- Ohishi, M., & Kaifu, N. 1998, *Faraday Discussion*, Cambridge, UK:R. Soc. Chem., 109, 205
- Ohishi, M., Ishikawa, S.-I., Amano, T., Oka, H., Irvine, W. M., Dickens, J. E., Ziurys, L. M., & Apponi, A. J. 1996, *ApJ*, 471, L61
- Pagani, L., Pardo, J.-R., Apponi, A. J., Bacmann, A., & Cabrit, S. 2005, *A&A*, 429, 181
- Pan, J., Albert, S., Sastry, K. V. L. N., Herbst, E., & De Lucia, F. C. 1998, *ApJ*, 499, 517
- Pearson, J. C., Sastry, K. V. L. N., Winnewisser, M., Herbst, E., & de Lucia, F. C. 1995, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 24, 1
- Pearson, J. C., Sastry, K. V. L. N., Herbst, E., & de Lucia, F. C. 1997, *ApJ*, 480, 420
- Peeters, Z., Rodgers, S. D., Charnley, S. et al. 2006, *A&A*, 445, 197
- Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., Delitsky, M. L., Pearson, J. C., & Müller, H. S. P. 1998, *J. Quant. Spectrosc. & Rad. Transfer*, 60, 883
- Pineau des Forêts, G., Roueff, E., Schilke, P., & Flower, D. R. 1993, *MNRAS*, 262, 915
- Plummer, G. M., Herbst, E., de Lucia, F.C., & Blake, G. A. 1984, *ApJ*, 55, 633
- Plummer, G. M., Herbst, E., de Lucia, F. C., & Blake, G. A. 1986, *ApJ*, 60, 949
- Pottage, J. T., Flower, D. R., & Davis, S. L. 2004, *MNRAS*, 352, 39
- Reid, M. J. 1993, *ARA&A*, 31, 345
- Remijan, A., Snyder, L. E., Liu, S.-Y., Mehringer, D. M., & Kuan, Y.-J. 2002, *ApJ*, 576, 264
- Remijan, A., Snyder, L. E., Friedel, D. N., Liu, S.-Y., & Shah, R.-Y. 2003, *ApJ*, 590, 314
- Rodgers, S. D., & Charnley, S. B. 2001, *ApJ*, 546, 324
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., Fuente, A., de Vicente, P., Wilson, T. L., & Hüttemeister, S. 2001a, *A&A*, 365, 174
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., & de Vicente, P. 2001b, *A&A*, 377, 631
- Rodríguez-Fernández, N. J., Martín-Pintado, J., Fuente, A., & Wilson, T. L. 2004, *A&A*, 427, 217
- Rodríguez-Fernández, N. J., & Martín-Pintado, J. 2005, *A&A*, 429, 923
- Rodríguez-Fernández, N. J., Combes, F., Martín-Pintado, J. Wilson, T. L., & Apponi, A. 2006, *A&A*, 455, 963
- Rohlfs, K., & Wilson, T. 2004 *Tools of Radio Astronomy*, Springer Verlag

- Sandford, S. A., & Allamandola, L. J. 1993, *ApJ*, 417, 815
- Sato, F., Hasegawa, T., Whiteoak, J. B., & Miyawaki, R. 2000, *ApJ*, 535, 857
- Savage, C., & Ziurys, L. M. 2004, *ApJ*, 616, 966
- Sawade, D. A. 1989, *ApJ*, 345, 828
- Sawada, T., Hasegawa, T., Handa, T., & Cohen, R. J. 2004, *MNRAS*, 349, 1167
- Schwahn et al. (1986)
- Schutte, W. A., Tielens, A. G. G. M., Whittet, D. C. B., Boogert, A., Ehrenfreund, P., de Graauw, Th., Prusti, T., van Dishoeck, E. F., & Wesselius, P. 1996, *A&A*, 315, L333
- Scoville, N. Z., Stolovy, S. R., Rieke, M., Christopher, M., & Yusef-Zadeh, F. 2003, *ApJ*, 594, 294
- Senent, M. L., Moule, D. C., & Smeyers, Y. G. 1995, *Can. J. Phys.* 73, 425
- Senent, M. L. 2004, *J. Phys. Chem.* 108, 6286
- Serabyn, E., & Güsten, R. 1987, *A&A*, 184, 133
- Serabyn, E., & Güsten, R. 1991, *A&A*, 242, 376
- Shull, J. M., & McKee, C. F. 1979, *ApJ*, 227, 131
- Sidoli, L., Mereghetti, S., Treves, A., Parmar, A. N., Turolla, R., Favata, F. 2001, *A&A*, 372, 651
- Smith, M. D., Mac Low, M.-M., & Zuev, J. M. 2000 *A&A*, 356, 287
- Snyder, L. E., Buhl, D., Zuckerman, B., & Palmer, P. 1969, *Phys. Rev. Lett.*, 22, 679
- Snyder, L. E., Buhl, D., Schwartz, P. R., Clark, F. O., Johnson, D. R., Lovas, F. J., & Figuerre, P. T. 1974, *ApJ*, 191, L79
- Sofue, Y. 1990, *PASJ*, 42, 827
- Sorrell, W. H. 2001, *ApJ*, 555, L129
- Sternberg, A., & Dalgarno, A. 1995, *ApJS*, 99, 565
- Stone, J. M., Ostriker, E. O., & Gammie, C. F. 1998, *ApJ*, 508, L99
- Tielens, A. G. G., & Hagen, W. 1982, *A&A*, 114, 245
- Tielens, A. G. G. M. 1992, *Chemistry and Spectroscopy of Interstellar Molecules*, Ed. N. Kaifu (Tokyo Univ. Tokyo Press), 237
- Townes, C. H., & Schawlow, A. L. 1975, *Microwave Spectroscopy*, Ed. Mc.Graw-Hill Publishing Company LTD
- Turner, B. E., Terziava, R., & Herbst, E. 1999, *ApJ*, 518, 699

- Turner, B. E. 2000, *ApJ*, 542, 837
- Turner, B. E., & Apponi, A. J. 2001, *ApJ*, 561, L207
- Viti, S., Natarajan, S., & Williams, D.A. 2002, *MNRAS*, 336, 797
- Wang, Q. D., Gotthelf, E. V., & Lang, C. C. 2002, *Nature*, 415, 148
- Watanabe, N., Shiraki, T., & Kouchi, A. 2003 *ApJ*, 588, L121
- Watanabe, N. 2005,, IAU 231 Symposium book “Astrochemistry: Recent Successes and Future Challenges” Ed. Lis, D. C., Blake, G. A., & Herbst, E., 415
- Weiner, B. J., & Sellwood, J. A. 1999, *ApJ*, 524, 112
- Widicus Weaver, S. L., bButler, R. A. H., Drouin, B. J., et al. 2005, *ApJS*, 158, 188
- Willemot, E., Dangoisse, D., Monnanteuil, N., & Bellet, J. 1980, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 9, 59
- Wilson, T. L., Ruf, K., walmsley, C. M., Martin, R. N., Batrla, W., & Pauls, T. A. 1982, *A&A*, 115, 185
- Winnewisser, G. 1973, *J. Mol. Spect.*, 46, 16
- Winnewisser, G., & Churchwell, E. 1975, *ApJ*, 200, L33
- Winnewisser, G., Hocking, W. H., & Gerry, M. C. L. 1976, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 5, 79
- Wlodarczak, G., & Demaison, J. 1988, *A&A*, 192, 313
- Woodall, J., Agúndez, M., Markwick-Kemper, A. J., & Millar, T. J. 2007, *A&A*, 466, 1197
- Wootten, A, Wlodarczak, G., Mangum, J. G., Combes, F., Encrenaz, P. J., & Gerin, M. 1992, *A&A*, 257, 740
- Xu, L.-H., & Lovas, F. L. 1997, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 26, 17
- Yusef-Zadeh, F., & Morris, M. 1987, *ApJ*, 322, 721
- Yusef-Zadeh, F., Roberts, D. A., Goss, W. M., Frail, D. A., & Green, A. J. 1996, *ApJ*, 466, L25
- Yusef-Zadeh, F., Muno, M., Wardle, M., & Lis, D. C. 2007, *ApJ*, 656, 847
- Zinchenko, I., Henkel, C., & Mao, R. Q. 2000, *A&A*, 361, 1079
- Ziurys, L. M., Friberg, P., & Irvine, W. M. 1989, *ApJ*, 343, 201
- Zuckerman, B., Palmer, P., Snyder, L. E., & Buhl, D. 1969, *ApJS*, 157, L167
- Zuckerman, B., Ball, J. A., & Gottlieb, A. 1971, *ApJ*, 163, L41
- Zuckerman, B., Turner, B. E., Johnson, D. R., Clark, F. O., Lovas, F. J., Fourikis, N., Palmer, P., Morris, M., Lilley, A. E., Ball, J. A., Gottlieb, C. A., Litvak, M. M., & Penfield, H. 1975, *ApJ*, 196, L96

Zylka, R., Mezger, P.G., & Wink, J.E. 1990, A&A, 234, 133

Zylka, R., Güsten, R., Henkel, C., & Batrla, W. 1992, A&AS, 96, 525

Lista de Figuras

1.1	El centro Galáctico	8
1.2	Emisión molecular en el CG	10
1.3	Emisión de Pa α del CG	11
1.4	Cúmulos estelares en el CG	13
1.5	Diagrama posición-velocidad del centro Galáctico.	15
1.6	Órbitas en el centro de la Galaxia.	15
1.7	CG en la línea de mira	16
1.8	CG a gran escala	17
1.9	FNT del CG	19
1.10	Polarización del campo magnético en el CG.	20
1.11	Nébula de doble hélice.	21
1.12	Survey de rayos-X en el CG	21
1.13	Combinación de emisiones Radio, IR y rayos-X en el CG.	22
2.1	Nube oscura	26
2.2	Potenciales superficiales	34
2.3	Energías potenciales del pegado	35
2.4	Modelos químicos	37
2.5	Tipos de choques	40
2.6	Choques tipo-J	41
2.7	Modelos de química de los alcoholes	48
2.8	Moléculas gigantes de carbonos	52
3.1	Posiciones en el CG	58
3.2	Perfiles de líneas I	60
3.3	Perfiles de líneas II	61
3.4	Diagramas de poblaciones.	63
3.5	Diagramas de poblaciones, Martín (2006a)	64
3.6	Razones entre MOCs	72
3.7	Razón H ₂ CO/CH ₃ OH	72
3.8	Opacidad en la razón CS/CH ₃ OH	73
3.9	Razones del CG y de núcleos calientes	76
3.10	Temperaturas de choques tipo-C	81
3.11	Enfriamiento de un choque tipo-C	82
3.12	Efecto de las reacciones con fotones	88
3.13	Efecto de choques en PDRs	88

4.1	Cuentas de estrellas en L183	92
4.2	Distribución del CO en L1448	94
4.3	Espectros de las nubes oscuras	95
4.4	Diagramas de poblaciones en nubes oscuras	98
5.1	Glicolaldehído y etilenglicol en Sgr B2N	106
5.2	Reacción de formación de CH ₂ OHCHO	107
5.3	Posiciones de referencia	108
5.4	Espectro de las MOCs detectadas en el GBT	110
5.5	Perfiles espectrales de otras MOCs	111
5.6	Líneas extra para MC G+0.693	112
5.7	Diagramas de las poblaciones para MC G+0.693	112
5.8	Posibles rutas de formación de MOCs en granos	116
6.1	Mapas de Sgr B2 de Minh et al. (2006)	126
6.2	Perfiles de las líneas más intensas	129
6.3	Diagramas de poblaciones de C ¹⁸ O, C ³⁴ S, y HNCO	131
6.4	Abundancias relativas a H ₂	133
6.5	Razón HNCO/ ¹³ CS respecto a C ¹⁸ O	134
6.6	Diagrama diagnóstico de HNCO	138
6.7	Diagrama diagnóstico de HNCO, galaxias	139
A.1	Sistemas de coordenadas	146
A.2	Puente de hidrógeno	147
A.3	Barreras de potencial triple	148
A.4	Desdoblamiento de niveles	149
A.5	Barreras de potencial	150
A.6	Niveles rotacionales de rotores simétricos	150
A.7	Configuración Cis-Trans y potenciales de rotores asimétricos	151
A.8	Estructura del CH ₃ OH.	152
A.9	Niveles de CH ₃ OH	153
A.10	Estructura de C ₂ H ₅ OH	154
A.11	Confórmeros de C ₂ H ₅ OH	155
A.12	Separación de subestados de C ₂ H ₅ OH	156
A.13	Estructura de (CH ₃) ₂ O	156
A.14	Estudio de (CH ₃) ₂ O	157
A.15	Líneas de (CH ₃) ₂ O	158
A.16	Estructura del HCOOCH ₃	158
A.17	Niveles de HCOOCH ₃	159
A.18	Estructura de HCOOH.	160
A.19	Estructura de niveles HCOOH.	160
A.20	Estructura de H ₂ CO.	161
A.21	Estructura de niveles de H ₂ CO.	162
A.22	Estructura de CH ₃ COOH.	162
A.23	Estructura del CH ₂ OHCHO.	163
A.24	Estructura del HOCH ₂ CH ₂ OH.	164

A.25 Estructura del de los aldehídos de dos carbonos.	165
A.26 Estructura del óxido de etileno.	166
A.27 Estructura del ácido isociánico.	167

Lista de Tablas

1.1	Propiedades globales	9
2.1	Moléculas en el espacio	27
2.2	Coeficientes de pegado máximo para diferentes superficies	35
2.3	Átomos y moléculas en PDRs	45
3.1	Fuentes y posiciones	57
3.2	Parámetros de las líneas moleculares.	59
3.3	Parámetros moleculares	62
3.4	Parámetros derivados	65
3.5	Abundancias de los núcleos calientes seleccionados	75
3.6	Modelos químicos	79
3.7	Escalas de tiempo	85
3.8	Tasas o velocidades de los procesos con fotones	87
4.1	Transiciones observadas	96
4.2	Parámetros observados	97
4.3	Abundancias de las MOCs en nubes oscuras.	99
5.1	Frecuencias observadas	109
5.2	Parámetros de las fuentes	109
5.3	Parámetros observacionales	113
5.4	Abundancias	114
5.5	Razones de abundancia de las MOCs con respecto a CH ₃ OH.	115
5.6	Abundancias relativas entre moléculas relacionadas químicamente	118
6.1	Coordenadas y localización de las fuentes observadas	128
6.2	Intensidad integrada de las transiciones de C ¹⁸ O, C ³⁴ S y ¹³ CS	128
6.3	Intensidad integrada derivada de las transiciones de HNCO	130
6.4	Densidades de columna derivadas para cada posición observada	132
6.5	Razones de abundancias en otras galaxias	139
C.1	Parámetros observados	172