

6

22f



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

# LA MOLECULA DE HIDROGENO EN EL MEDIO INTERESTELAR

T E S I S

Que para obtener el Título de

F I S I C O

p r e s e n t a :

Anabel Arrieta Ostos

México, D.F.

1991



TESIS CON FALLA DE ORIGEN



## **UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso**

### **DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# INDICE

## 1. INTRODUCCION

1.1	La Galaxia	1
1.2	Estructura y morfología	3
1.3	Gas interestelar asociado a formación estelar	5
1.4	Moléculas entre las estrellas	5
1.5	La molécula de hidrógeno interestelar	9
1.6	El polvo interestelar	10

## 2. LA MOLECULA DE HIDROGENO

2.1	La aproximación Born-Oppenheimer	15
2.2	Movimiento electrónico	16
	<i>2.2.1 Método de orbitales moleculares</i>	16
	<i>2.2.2 La molécula <math>H_2^+</math></i>	17
	<i>2.2.3 La molécula <math>H_2</math></i>	23
2.3	Movimientos nucleares	28
	<i>2.3.1 Movimiento rotacional puro</i>	29
	<i>2.3.2 Movimiento vibracional puro</i>	30
	<i>2.3.3 Movimiento acoplado</i>	31

## 3. TRANSICIONES RADIATIVAS

3.1	Notación	34
3.2	Transiciones radiativas	35
3.3	Transiciones rotacionales	37
3.4	Transiciones vibracionales-rotacionales	38
3.5	Transiciones electrónicas-vibracionales-rotacionales	40
3.6	Observaciones de $H_2$ en astrofísica	41

## 4. FORMACION Y DESTRUCCION DEL H<sub>2</sub> EN EL MEDIO INTERESTELAR

### A) Formación de la molécula

4.1	Formación en la fase gaseosa	47
4.2	Formación sobre granos de polvo	48
	4.2.1 <i>Procesos físicos en la superficie de granos</i>	48
	4.2.2 <i>Las superficies de los granos y las energías de adsorción</i>	49
	4.2.3 <i>Coefficiente de Pegamiento</i>	52
	4.2.4 <i>Tasa de formación de H<sub>2</sub> sobre granos de polvo</i>	53

### B) Disociación de la molécula

4.3	Fotodisociación	55
4.4	Disociación por colisiones	56

## 5. ENFRIAMIENTO PRODUCIDO POR EL H<sub>2</sub>

5.1	Abundancia del H <sub>2</sub>	58
5.2	Abundancia del H <sub>2</sub> como función del tiempo	60
5.3	Enfriamiento producido por la formación de H <sub>2</sub>	64
5.4	Enfriamiento producido por la disociación de H <sub>2</sub>	66
5.5	Enfriamiento producido por las excitaciones colisionales en el H <sub>2</sub>	67

CONCLUSIONES	70
--------------	----

APENDICE	72
----------	----

REFERENCIAS	75
-------------	----

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1 La Galaxia

Nuestra Galaxia, también denominada Vía Láctea, es una galaxia de tipo espiral y puede ser representada como un disco con un bulbo esferoidal en el centro. Los valores de algunas de sus propiedades más importantes se resumen en la Tabla 1.1 (Duley & Williams 1984). El Sol se mueve en una órbita casi circular alrededor del centro de la Galaxia con un período de rotación de aproximadamente  $2.3 \times 10^8$  años. Dentro de este movimiento el Sol también efectúa un movimiento de oscilación respecto al plano de la Galaxia con una amplitud de 70 pc ( $1\text{pc} = 3.09 \times 10^{18}$  cm) y un período de alrededor de 70 millones de años.

La Vía Láctea contiene alrededor de  $10^{11}$  estrellas. La mayor parte de todas estas estrellas están concentradas en el disco galáctico que, dependiendo de la distancia galactocéntrica, tiene un grosor que varía aproximadamente entre los 100 y los 400 pc. El diámetro del disco estelar no está muy bien definido, pero la distribución de las estrellas se extiende en un diámetro de aproximadamente 25 kpc. Estas dimensiones nos dan un volumen para el disco de  $\sim 10^{11}$  pc<sup>3</sup> y, entonces, las estrellas están localizadas a una distancia promedio de  $\sim 1$  pc de sus vecinas más cercanas. Las dimensiones de las estrellas son muy pequeñas comparadas con estas distancias interestelares y por lo tanto, el volumen ocupado por todas las estrellas es insignificante comparado con el espacio entre ellas. Este espacio es llamado "medio interestelar" y contiene una mezcla de gas y partículas sólidas, llamadas "granos de polvo interestelar". A esta mezcla de gas y polvo se le llama "material interestelar" (ver Franco 1984).

El gas y el polvo también están concentrados en el disco galáctico y se encuentran, al igual que las estrellas, en equilibrio rotacional girando alrededor del centro galáctico (Franco 1991b). El disco tiene una masa total, medida desde la órbita del Sol, de aproximadamente  $1.4 \times 10^{11} M_{\odot}$  ( $1 M_{\odot} = 2 \times 10^{33}$  gr) y la mayor parte de esta masa está en forma de estrellas. La masa del gas representa, aproximadamente, solo un 2% del total, esto es  $\sim 4 \times 10^9 M_{\odot}$ , y el polvo representa una proporción todavía menor a ésta (alrededor del 1% de la masa del gas). Por lo tanto, la masa total del material interestelar no juega un papel importante en la dinámica de la Galaxia. Sin embargo el material interestelar nos define las propiedades de la formación estelar (Franco 1991b).

TABLA 1.1 Nuestra galaxia (Duley & Williams 1984).

Edad de la Galaxia	$1.2 \times 10^{10}$ años
Diámetro	25kpc
Espesor	250pc
Masa	$1.4 \times 10^{11} M_{\odot}$
Densidad total	$7 \times 10^{-24} \text{ gcm}^{-3}$
Distancia del Sol al Centro Galáctico	9kpc
Distancia del Sol al Plano Galáctico	0
Velocidad circular en la posición del Sol	$250 \text{ kms}^{-1}$
Densidad de masa en la posición del Sol	$1.4 \times 10^{-23} \text{ gcm}^{-3}$

1 parsec (pc) =  $3.086 \times 10^{16}$  cm; 1 Masa Solar ( $M_{\odot}$ ) =  $1.989 \times 10^{33}$  gr.

El elemento químico más abundante en el medio interestelar, así como en el resto de la Galaxia y en todo el Universo, es el hidrógeno. Este elemento representa ~ 90% de las partículas que conforman el medio interestelar, el helio representa aproximadamente el 10% y el resto de todos los demás elementos suman menos del 1%. A su vez, todos estos elementos se pueden encontrar en forma individual o formando compuestos; las diferentes componentes del gas se pueden encontrar en forma iónica, atómica o molecular y la abundancia relativa de cada una de estas formas depende de la cantidad de energía que recibe el gas. Dada la abundancia del hidrógeno, se cree que la molécula de hidrógeno también debe ser la más abundante de las moléculas existentes. Desafortunadamente, dado que no tiene un dipolo permanente, el  $H_2$  es una molécula muy difícil de detectar y sólo ha sido observada en condiciones muy particulares. Su distribución en la Galaxia se ha inferido a partir de la detección de otras moléculas que son menos abundantes, pero cuyas líneas de emisión son más fácilmente observables (por ejemplo, el CO).

A pesar de estas dificultades, las propiedades del  $H_2$  en condiciones interestelares han sido investigadas durante las últimas cuatro décadas y ahora contamos con una gran cantidad de información que nos permite modelar su posible abundancia. De hecho, en los últimos 10 años, se han empezado a inferir las propiedades de regiones moleculares donde se están disociando grandes cantidades de  $H_2$  y ya se están haciendo modelos detallados de su estructura y evolución (Escalante 1991). Sin embargo, se sabe muy poco de los detalles de la transformación de gas atómico difuso en gas molecular. En este trabajo hacemos un estudio simplificado del tiempo de formación de nubes de  $H_2$  en condiciones interestelares de alta opacidad y también obtenemos las tasas de enfriamiento correspondientes.

El resto de esta Introducción contiene un resumen de las principales propiedades del gas y polvo interestelares. En los capítulos 2 y 3 hacemos un resumen de las aproximaciones usadas para calcular la estructura de la molécula y la probabilidad de las transiciones entre diferentes niveles de energía. En el capítulo 4 hacemos un

resumen de los procesos de formación y destrucción de la molécula de hidrógeno en las condiciones típicas del medio interestelar. En el quinto capítulo, que contiene nuestro trabajo, obtenemos la abundancia de  $H_2$  y el enfriamiento que produce esta molécula en un amplio rango de densidades y temperaturas. Finalmente, en el último capítulo damos unas conclusiones.

## 1.2 Estructura y morfología del medio interestelar

El gas interestelar no se encuentra uniformemente distribuido sino que se agrupa en condensaciones mucho más densas y opacas que el medio circundante. Estas condensaciones, dependiendo de sus propiedades, se llaman "nubes" o "nebulosas" (ver Franco & Cantó 1985). Esta terminología incluye a diferentes objetos que dependiendo de las características físicas, químicas o de localización espacial pueden clasificarse en diversos grupos dependiendo del área de interés (ver por ejemplo Duley & Williams 1984; Franco & Cantó 1985; Jura 1987; Myers 1987). Básicamente estos objetos son denominados nubes oscuras, nubes difusas, nebulosas de reflexión y nebulosas de emisión (estas últimas son excitadas radiativamente). Por otra parte, el gas que ocupa el espacio entre las nubes y las nebulosas es denominado, dependiendo de su temperatura, gas internube o gas coronal. El gas internube tiene temperaturas menores a  $10^4$  K mientras que el gas coronal, como en el caso de la corona solar, tiene temperaturas de  $\sim 10^6$  K. La evidencia principal de la existencia de gas muy caliente viene de observaciones de rayos X (Franco 1984).

Los vientos estelares y las explosiones de supernova depositan una gran cantidad de energía en el medio interestelar (Bohigas & Rosado 1984; Palous et al 1990; Franco et al 1991). Esto produce ondas de choque, las cuales ionizan y calientan al gas interestelar a temperaturas de muchos millones de grados formando así al gas coronal. Este gas caliente se expande y llega a alcanzar volúmenes importantes en el disco. Al enfriarse, el gas coronal se condensa en las fases que forman el gas internube y las nubes difusas (Goldsmith 1987).

Tanto el gas internube como las nubes difusas están formadas, principalmente, por gas atómico (ver Dyson & Williams 1980). La fase internube es más caliente ( $\sim 10^3$  K) que las nubes difusas ( $\sim 50$  a  $10^2$  K). Este gas puede ser observado en absorción, sobre el continuo de las estrellas, ó en emisión de las líneas de hidrógeno atómico, HI. Una de las transiciones del hidrógeno es la famosa línea de 21 cm. Definimos como nubes difusas neutras a las regiones de hidrógeno atómico con temperaturas típicas de 70 K. Estas regiones se detectan por absorción y emisión en la línea de hidrógeno de 21 cm. Iones como el  $C^+$  y  $Ca^+$ , producidos por fotoionizaciones de la luz estelar, también se encuentran en estas nubes y son detectadas por sus líneas de absorción. Las observaciones muestran la existencia de un movimiento diferencial "discreto" a lo largo de la línea de visión a la estrella, lo cual indica la presencia de varias nubes a diferentes velocidades. La velocidad típica de una nube es, respecto al resto de las nubes, de aproximadamente  $10 \text{ km s}^{-1}$ . Otro dato obtenido a partir de los anchos de las líneas de 21 cm es que tienen movimientos internos de  $1$  a  $4 \text{ km s}^{-1}$ .

TABLA 1.2

Resumen de algunas propiedades de las nubes y otras regiones encontradas en el medio interestelar

Región HII	$T=10000\text{K}$ . El ión más abundante es el $\text{H}^+$ . También se encuentran presentes el $\text{C}^+$ , $\text{N}^+$ y $\text{O}^+$ ; $n \approx 10^2 - 10^3 \text{ cm}^{-3}$ ; $r \approx 1-10\text{pc}$ . Emisión de radiación en líneas y continuo.
Medio internube	$T=10000\text{K}$ . El elemento más abundante es el H. El ión abundante es el $\text{C}^+$ . Todos los átomos con potenciales de ionización $< 13.6\text{eV}$ se encuentran ionizados; $n \approx 0.1\text{cm}^{-3}$ . No hay moléculas.
Nubes difusas	$T=100\text{K}$ . Conversión parcial de H a $\text{H}_2$ . El ión dominante es el $\text{C}^+$ . Otros átomos se encuentran parcialmente neutros. Entre otras, se observan moléculas de CO y $\text{H}_2\text{CO}$ .
Nubes oscuras	$T=10-20\text{K}$ . La mayor parte del hidrógeno esta en forma molecular. Grandes profundidades ópticas en el visible y el ultravioleta; $n \approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$ . $M = 10^2 - 10^4 M_\odot$ . $r \approx 5\text{pc}$ . Muchas moléculas han sido observadas.
Nubes moleculares	$T=50\text{K}$ . Asociadas a regiones de excitación. Grandes profundidades ópticas. Radiación térmica en infrarrojo; $n < 10^6 \text{ cm}^{-3}$ . $M < 10^6 M_\odot$ . $r < 30\text{pc}$ . Muchas moléculas han sido observadas, con anchos de líneas producidas por movimientos turbulentos.
Gas Coronal	$T = 10^5 - 10^6\text{K}$ ; $n \approx 10^{-2} \text{ cm}^{-3}$ . Átomos altamente ionizados, por ejemplo OVI. Pueden ocupar $\sim 20\%$ del medio interestelar.

$T$ =temperatura cinética;  $n$ =densidad de átomos de H en todas sus formas;  $M$ =masa;  $r$ =radio (Duley & Williams 1984).

Las nebulosas de emisión se caracterizan por ser muy brillantes y por tener un espectro dominado por líneas de emisión (Dyson & Williams 1980). Se encuentran situadas en la vecindad de estrellas muy calientes y luminosas, que ionizan el gas circundante creando un plasma con un alto grado de ionización. La radiación de este plasma es lo que identificamos como la nebulosa de emisión. Por otra parte, las nebulosas de reflexión se caracterizan por tener un espectro similar al de una estrella y son excitadas por estrellas menos calientes y menos energéticas que las de las nebulosas de emisión (ver Franco & Cantó 1985). En este caso la luz estelar solamente ilumina al material

interestelar y no se produce la ionización del gas. Los granos de polvo reflejan parte de la luz estelar hacia nosotros y de aquí viene el nombre.

Las nubes oscuras dan la impresión de ser grandes regiones del cielo donde no hay estrellas. Esta aparente carencia se debe a la presencia de grandes concentraciones de gas y polvo que bloquean la luz de las estrellas situadas detrás de estas nubes. Las nubes oscuras están principalmente formadas por gas molecular. Varias de sus propiedades quedan determinadas por el efecto de campos magnéticos y rayos cósmicos (Franco 1984). Los rayos cósmicos son partículas relativistas que al parecer están confinadas por líneas de campo magnético y mantienen la ionización de las zonas opacas y frías de las nubes moleculares. El campo magnético promedio de la Vía Láctea, tiene una orientación paralela al disco y su densidad de energía es similar a la energía térmica del gas.

### 1.3 Gas interestelar asociado a la formación estelar

El gas interestelar es la materia prima para la formación de estrellas. La transformación de gas en estrellas se produce a través de una serie de cambios sucesivos en el medio interestelar. Esta evolución queda determinada por diferentes parámetros físicos de las nubes, tales como la masa, la densidad, el grado de ionización, la intensidad del campo magnético, el momento angular, la energía de los movimientos turbulentos, etc. (ver Franco 1991b y Shull 1987). Un esquema sencillo para la evolución de las fases del medio interestelar es el siguiente:

$$(\text{Nubes difusas}) \xrightarrow{10^6-10^7 \text{ años}} (\text{Nubes moleculares}) \xrightarrow{\sim 10^7 \text{ años}} (\text{Formación Estelar})$$

Primeramente se forman estructuras de grandes dimensiones que apilan a grandes masas de gas tenue. De ellas, después de tiempos estimados entre  $10^6$  y  $10^7$  años (Franco et al 1988 y Palous et al 1990), se generan nubes opacas (ver Franco & Cox 1986) y muy frías denominadas nubes moleculares. A su vez, estas nubes se fragmentan en una serie de condensaciones que continúan contrayéndose en regiones cada vez más densas, por la acción de la gravedad, hasta que se forman los núcleos de las protoestrellas (Franco 1991b). El tiempo en el cual una nube molecular forma estrellas está estimado entre  $10^7$  y  $3 \times 10^7$  años (Franco et al 1988). Estos tiempos, como veremos al final de la tesis, parecen ser mucho menores al tiempo en el cual las nubes de HI se transforman en nubes de  $H_2$ .

### 1.4 Moléculas entre las estrellas

A mediados de los años 60's se pensaba que las regiones entre las estrellas eran hostiles para la existencia de cantidades apreciables de moléculas. Se pensaba que las pocas moléculas que habían sido observadas ( $CH$ ,  $CH^+$  y  $CN$ ), eran el resultado de la destrucción de moléculas más grandes que habían sido evaporadas de la superficie de partículas de polvo en la vecindad de estrellas calientes (Duley & Williams 1984).

TABLA 1.3  
Moléculas observadas en el medio interestelar (Duley & Williams 1984).

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
Moléculas de dos átomos				
H <sub>2</sub>	0.1	Difusa	E	a
H <sub>2</sub>	1.0	Obscura	V	e
CH <sup>+</sup>	10 <sup>-6</sup>	Difusa	E	a
CH	10 <sup>-6</sup>	Difusa	E	a
CH	10 <sup>-6</sup>	Obscura	A, H	e
OH	10 <sup>-7</sup>	Difusa	E	a
OH	-	Obscura	H	a, e, m
C <sub>2</sub>	10 <sup>-8</sup>	Difusa	V	a
CN	10 <sup>-8</sup>	Difusa	E	a
CN	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R, H	e
CO	10 <sup>-6</sup>	Difusa	E	a
CO	10 <sup>-5</sup>	Obscura	R	e
CO	-	Circunestelar	V	e
[CO <sup>+</sup> ]	10 <sup>-11</sup>	Obscura	R	e
HCl <sup>*</sup>	-	Circunestelares	Sub-mm	-
NO	10 <sup>-8</sup>	Obscura	R, A	e
OS	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
SiO	-	Circunestelar	R	e, m
SO	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
NS	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R, A, H	e
SiS	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
Moléculas de tres átomos				
H <sub>2</sub> O	-	Obscura	R	e, m
C <sub>2</sub> H	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R, H	e
CCH <sup>*</sup>	-	Obscura	R	-
HCN	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R, H	e
HNC	-	Obscura	R	e
HCO <sup>+</sup>	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
HCO	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R, H	e
N <sub>2</sub> H <sup>+</sup>	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R, H	e
H <sub>2</sub> S	10 <sup>-11</sup>	Obscura	R	e
HCS <sup>+</sup>	10 <sup>-11</sup>	Obscura	R	e

TABLA 1.3 (Continuación)

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
HNO	$10^{-10}$	Obscura	R	e
OCS	$10^{-9}$	Obscura	R	e
SO <sub>2</sub>	$10^{-9}$	Obscura	R	e
SiC <sub>2</sub>	-	Obscura	R	e
[NaOH]	-	Obscura	R	e, a
Moléculas de cuatro átomos				
NH <sub>3</sub>	$10^{-8}$	Obscura	I	e
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	-	Circunestelar	R	e
H <sub>2</sub> CO	$10^{-8}$	Obscura	R	a
HNCO	$10^{-10}$	Obscura	R	e
H <sub>2</sub> CS	$10^{-11}$	Obscura	R	e
C <sub>3</sub> N	$10^{-10}$	Obscura	R	e
HNCS	$10^{-11}$	Obscura	R	e
HCCH *	-	Obscura	I	-
C <sub>3</sub> H *	-	Obscura	R	-
C <sub>3</sub> O *	-	Obscura	R	-
HOCO *	-	Obscura	R	-
Moléculas de cinco átomos				
CH <sub>4</sub>	-	Obscura	R	e
[CH <sub>2</sub> NH]	$10^{-10}$	Obscura	R	e
CH <sub>2</sub> CO	$10^{-10}$	Obscura	R	e
NH <sub>2</sub> CN	$10^{-10}$	Obscura	R	e
NHOOH	$10^{-10}$	Obscura	R	e
C <sub>4</sub> H	-	Circunestelar	R	e
HC <sub>3</sub> N	$10^{-9}$	Obscura	R	e
Moléculas de seis átomos				
CH <sub>3</sub> OH	$10^{-9}$	Obscura	R	e
CH <sub>3</sub> CN	$10^{-10}$	Obscura	R	e
CH <sub>2</sub> CHO	$10^{-9}$	Obscura	R, H	e
CH <sub>3</sub> SH	$10^{-10}$	Obscura	R	e
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> *	-	Obscura	R	-
C <sub>5</sub> H *	-	Obscura	R	-

TABLA 1.3 (Continuación)

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
Moléculas de siete átomos				
CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
CH <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
CH <sub>3</sub> CHO	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
CH <sub>2</sub> CHCN	10 <sup>-11</sup>	Obscura	R,H	e, m
HC <sub>5</sub> N	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
Moléculas de ocho átomos				
[HCOOCH <sub>3</sub> ]	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
HC <sub>3</sub> C <sub>3</sub> N *	-	Obscura	R	-
Moléculas de nueve átomos				
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> O	10 <sup>-9</sup>	Obscura	R	e
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CN	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
HC <sub>7</sub> N	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
Moléculas de once átomos				
HC <sub>9</sub> N	10 <sup>-10</sup>	Obscura	R	e
Moléculas de trece átomos				
HC <sub>11</sub> N	10 <sup>-10</sup>	Circunestelar	R	e

(1) Especie molecular, el paréntesis cuadrado indica una detección tentativa (\* fueron tomadas de Turner & Ziurys 1974). (2) Abundancia relativa a la molécula de hidrógeno para una nube típica señalada en la siguiente columna. (3) Tipo de nube. (4) Origen de la línea espectral por la cual ha sido observada; V=transición vibracional (infrarrojo); R=transición rotacional (radio); A= desdoblamiento A; H=separación de niveles hiperfinos; I=transiciones invertidas. (5) Tipo de línea observada; e=emisión, a=absorción, m=máser.

Más tarde (1968-9), con la observación de moléculas "frágiles" tales como NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>CO y H<sub>2</sub>O, se comenzó a dudar de la suposición de que en las condiciones interestelares las moléculas pudieran ser destruidas inmediatamente después de su formación. Entonces se extendieron las observaciones a otros tipos de moléculas y se encontró que en ciertas regiones del medio interestelar los átomos del gas se encontraban en forma molecular. La Tabla 1.3 muestra una lista de las moléculas que habían sido observadas en el medio interestelar hasta 1982 (Duley & Williams 1984).

Las diferentes líneas de emisión y absorción provenientes de diferentes moléculas (ver el Capítulo 3) dan mucha información sobre las condiciones físicas las nubes moleculares y del medio interestelar general. La interpretación de esta información ha permitido hacer modelos detallados de los procesos que definen la estructura de estas nubes, de sus fuentes de energía y de las interacciones con el medio que las rodea.

## 1.5 La molécula de hidrógeno interestelar

Las moléculas de hidrógeno, así como todas las moléculas diatómicas homonucleares, no tienen un momento dipolar permanente debido a que están constituidas de dos núcleos idénticos cuyo centro de masa coincide con el centro de distribución de carga. Esto hace que las transiciones entre los niveles de energía rotacionales y vibracionales involucren multipolos de orden superior, y por lo tanto, que las probabilidades de transición sean bajas. A pesar de que el  $H_2$  es la molécula más abundante en el medio interestelar, su detección directa se hace sólo bajo condiciones físicas muy especiales. Tal es el caso de las transiciones producidas por excitación térmica en choques que dan lugar a las líneas de  $\lambda = 2.122\mu\text{m}$  y  $\lambda = 2.247\mu\text{m}$  que han sido recientemente estudiadas en regiones de formación estelar (Lane 1989).

Las detecciones de otras moléculas han permitido calcular las abundancias del  $H_2$  y hacer mapas de su distribución a lo largo de la Galaxia. Una gran cantidad de observaciones de la emisión del monóxido de carbono (CO) han mostrado que el  $H_2$ , después del HI, es la componente más abundante en el medio interestelar. En particular, la línea de 2.6 mm producida por la transición rotacional  $J=1\rightarrow 0$  en el CO se ha usado como "trazadora" de las concentraciones de  $H_2$  en el disco de nuestra Galaxia. La intensidad de esta línea,  $I_{CO}$ , ha sido relacionada con la densidad columnar de la molécula de hidrógeno  $N_{H_2}$ ,

$$\frac{N_{H_2}}{I_{CO}} = \text{constante},$$

donde la constante depende de la probabilidad de transición de la línea, de la sección recta de excitación colisional, de la velocidad de choque entre las partículas y de la opacidad en la región de observación. Su valor varía entre  $1.8 \times 10^{20}$  y  $4.8 \times 10^{20} \text{ cm}^{-2} (\text{K km s}^{-1})^{-1}$ . La Figura 1.1 muestra una comparación de las abundancias de HI, HII y  $H_2$  a diferentes radios galactocéntricos.

La abundancia de la molécula de hidrógeno en una región dada, queda determinada por diferentes procesos de formación y destrucción que ocurren en condiciones interestelares. Para que la molécula llegue a formarse es necesario que pueda deshacerse de su energía de amarre. Esto se puede lograr transfiriendo la energía a un tercer cuerpo (en reacciones de tres cuerpos) o radiandola inmediatamente después de que los dos átomos de hidrógeno se juntan. Debido a la falta de momento dipolar permanente, la producción de fotones es muy poco probable y la reacción ocurre preferencialmente bajo la acción de una tercera partícula. Para que se den colisiones con tres cuerpos en la fase gaseosa, son necesarias densidades muy altas (superiores a las densidades de las nubes difusas) por lo cual se piensa que la reacción ocurre sobre la superficie de granos de polvo. En el Capítulo 4 haremos una revisión más detallada de este proceso.

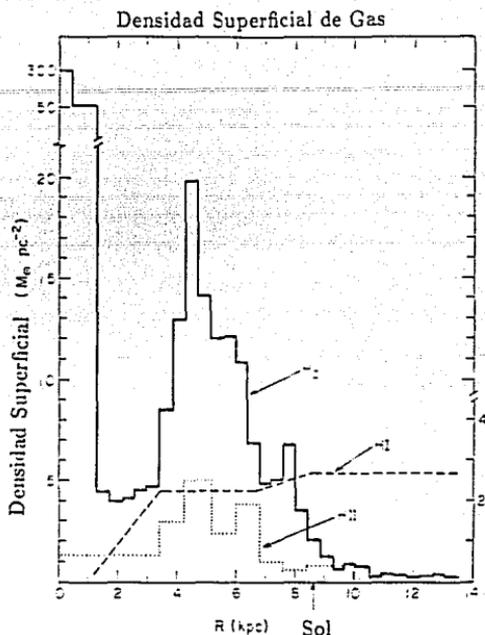


Figura 1.1 Comparación de densidades superficiales en el disco de la Vía Láctea (Scoville & Sanders 1987).

## 1.6 El polvo interestelar

La propiedades del polvo interestelar se han deducido de estudios de “extinción” selectiva, de la polarización de la luz estelar y de la emisión infrarroja de una variedad de diferentes objetos (Martin 1978). La extinción es la disminución que sufre un haz luminoso debido a la absorción y dispersión causadas por las partículas de polvo. El coeficiente de extinción,  $\alpha$ , se define a través de la expresión

$$I = I_0 \exp\left(-\int_0^l \alpha dl\right), \quad (1.1)$$

donde  $I_0$  es la intensidad original de una fuente luminosa,  $I$  es la intensidad luminosa reducida por la extinción y  $l$  es la distancia que atraviesa la luz en el medio interestelar. La Figura 1.2 muestra la curva de extinción interestelar.

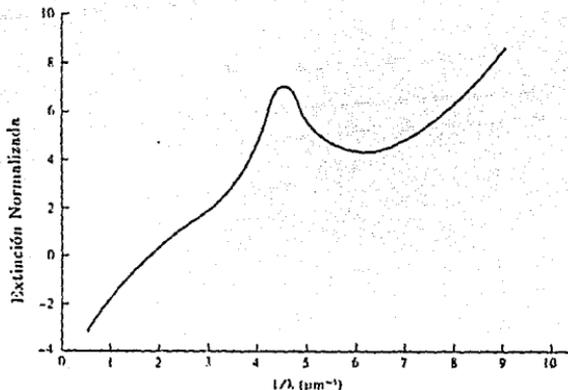


Figura 1.2 La curva de extinción interestelar normalizada (Dyson & Williams 1980).

Esta figura representa a la curva de extinción "promedio" del medio interestelar y fué obtenida al promediar la extinción en diferentes direcciones de nuestra Galaxia. Usando una mezcla de polvo con diferentes composiciones químicas y tamaños, se pueden reproducir las propiedades de dicha curva (Savage & Mathis 1979). El polvo resultante tiene diámetros comparables a las longitudes de onda de la luz en el visible.

Otra de las evidencias de la presencia de granos de polvo en el medio interestelar, que nos brinda información sobre granos elongados, es la polarización de la luz visible de las estrellas (Dyson & Williams 1980). La polarización es producida por reflexión en granos de polvo y el grado de polarización observado es proporcional a la cantidad de extinción que existe en dirección de las estrellas. Para reproducir las observaciones necesitamos que los granos sean elongados y que exista algún mecanismo de alineamiento que oriente la dirección del eje mayor de estos granos elongados. La radiación polarizada con vectores eléctricos paralelos a los ejes más largos de los granos sufre más extinción que la radiación con polarización paralela a los ejes pequeños, lo cual da lugar a una polarización neta cuando la luz se propaga en un medio con granos alineados. El mecanismo de alineación pareciera estar asociado a campos magnéticos, que restringen los movimientos de las partículas y pueden orientar a los granos de polvo.

Por su parte, gracias a los resultados del "Infrared Astronomical Satellite"

(IRAS), la emisión "difusa" en el infrarrojo lejano nos ha permitido saber que la presencia del polvo se encuentra bien correlacionada con el gas neutro y que su temperatura varía entre  $\approx 10$  y  $100$  K (Tielens & Allamandola 1987).

Podemos dividir a los granos de polvo interestelar en dos tipos, dependiendo de la historia de su formación. El primero es polvo directamente formado en atmósferas estelares. Por ejemplo, en vientos ricos en oxígeno y carbono producidos en estrellas gigantes de tipo tardío, en nebulosas planetarias y posiblemente en novae y en supernovas (Tielens & Allamandola 1987). El grafito, los silicatos y el carbón amorfo son ejemplos de este tipo de polvo. El segundo tipo también tiene el mismo origen pero ya ha sido procesado en el medio interestelar. Este polvo tiene dos componentes, está formado por un núcleo (generalmente de silicatos) y tiene mantos formados por hielos de diferentes compuestos (por ejemplo  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $CH_3OH$  y  $CO$ ), o bien por moléculas orgánicas muy complejas. Estos mantos se forman dentro de las nubes densas y en el medio interestelar difuso. Los cometas representan ejemplos, de muy grandes dimensiones, de este tipo de polvo. La Tabla 1.4 resume algunas de las características principales de los diferentes tipos de polvo interestelar.

El polvo interestelar es una componente muy importante del medio interestelar, que domina el calentamiento y enfriamiento de las nubes (Black 1987) y es una fuente dominante de opacidad. El polvo, debido a su gran opacidad, puede ser un elemento importante en el colapso de nubes que forman estrellas (Franco 1991b). Por otra parte, el efecto de oscurecimiento que el polvo produce, introduce grandes incertidumbres en la interpretación de las distribuciones de energía de diferentes fuentes astronómicas. Por otro lado, puede producir flujos de gas generados por presión de radiación (Franco et al 1991; Ferrara et al 1991). Como se puede ver, ya existen muchos estudios que permiten conocer la naturaleza del polvo interestelar. En el capítulo 4 nos enfocaremos a discutir las propiedades físicas y químicas que hacen del polvo la "herramienta" principal en la formación de  $H_2$ . Una literatura más detallada sobre polvo interestelar se puede encontrar en los trabajos de Aannestad & Purcell (1973), Greenberg (1978), Martin (1978), Spitzer (1978), Savage & Mathis (1979), Tielens & Allamandola (1987) y Mathis (1990).

**TABLA 1.4**  
**Composición del polvo en el medio interestelar (Tielens & Allamandola 1987).**

Tipo de Polvo	Abundancia	Masa	Volumen
Silicatos	100% de Si	9.0	3.5
Carbón Amorfo	5-10% de C	0.6	0.3
PAHs	1% de C	0.08	0.04
Orgánico	24% de C		
	6% de O	3.0	3.0
Grafito	25% de C	2.0	0.9

masa ( $10^{-27}$ g/H); volumen ( $10^{-27}$ cm<sup>3</sup>/H); H=átomo de hidrógeno.

## Capítulo 2

# La Molécula de Hidrógeno

Las moléculas están compuestas por dos o más átomos, y por lo tanto representan un problema mecánico-cuántico de varios cuerpos. Este tipo de problemas no pueden resolverse de manera exacta, pero existe un buen número de métodos para obtener soluciones aproximadas. En este capítulo, describimos algunos de los métodos usados para obtener los niveles de energía de la molécula  $H_2$ . También hacemos una breve descripción de la estructura molecular, separando el problema en las partes electrónica y nuclear. A su vez, el movimiento nuclear puede ser separado en vibracional y rotacional, lo cual nos permite obtener los niveles de energía electrónicos, vibracionales y rotacionales del  $H_2$ .

Para ilustrar cómo se liga una molécula veamos primero, como un ejemplo, la formación de la molécula más sencilla; la molécula de hidrógeno ionizado  $H_2^+$  (de la Peña 1979). Supongamos que un átomo de hidrógeno neutro y un protón se acercan desde grandes distancias. Como se muestra en la Figura 2.1a. En esta figura el orbital electrónico del átomo neutro está definido por el potencial electrostático, que produce una fuerza central. A medida que se acercan las partículas este orbital se va deformando debido a la atracción que el electrón ejerce sobre el átomo neutro (figura 2.1b). Para una separación determinada, el electrón actúa como ligadura química entre los dos protones, es decir, la atracción que ejerce el electrón sobre los protones es capaz de compensar la repulsión entre ellos. En este momento el electrón describe una órbita similar a la mostrada en la figura 2.1c. Por otra parte, si la distancia entre núcleos se hace más pequeña, como se muestra en la figura 2.1d, el electrón ya no puede interponerse entre los núcleos y la fuerza de repulsión se vuelve dominante, provocando que los núcleos se separen y tiendan a la configuración mostrada en la figura 2.1c.

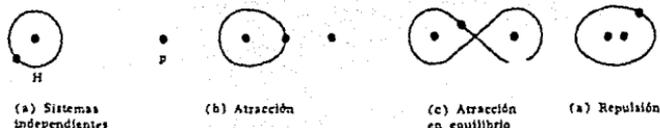


Figura 2.1 Efectos que produce un protón sobre un átomo de hidrógeno neutro a diferentes distancias de separación (ver de la Peña 1979).

## 2.1 La Aproximación Born-Oppenheimer

La ecuación que nos describe el estado de un sistema mecánico cuántico es la ecuación de Schrödinger,

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2.1)$$

donde  $H$  es el operador hamiltoniano,  $\Psi$  son las funciones propias (o eigenfunciones) del sistema y  $E$  son los valores propios (o eigenvalores) asociados a un estado estacionario del sistema. En el resto de este trabajo usaremos letras mayúsculas en "negritas" para referirnos a los operadores, de manera que no se debe confundir al operador hamiltoniano  $H$  con el símbolo del hidrógeno,  $H$ .

Para sistemas compuestos por 2 o más núcleos atómicos, el operador hamiltoniano incluye términos que representan los movimientos rotacionales y vibracionales de los núcleos. En estos casos podemos escribir el operador hamiltoniano como (ver King 1964):

$$H = -\frac{\hbar}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_a \frac{\hbar^2}{2M_a} \nabla_a^2 + \sum_{a,i} \frac{Z_a e^2}{r_{ai}} + \sum_{a>b} \frac{Z_a Z_b e^2}{r_{ab}} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (2.2)$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón,  $M_a$  es la masa de los núcleos,  $Z_a$  y  $Z_b$  son las cargas de los núcleos  $a$  y  $b$  respectivamente,  $r$  se refiere a las distancias entre partículas y  $\hbar = h/2\pi$  ( $h$  es la constante de Planck). La ecuación (2.2) puede escribirse esquemáticamente, manteniendo el mismo orden de los términos, como:

$$H = T_e + T_n + V_{en} + V_{nn} + V_{ee}, \quad (2.3)$$

donde  $T_e$  representa el operador de energía cinética debida a los electrones,  $T_n$  el operador de energía cinética de todos los núcleos con masas  $M_a, M_b, \dots$ , el operador

correspondiente a las atracciones electrostáticas entre núcleos y electrones es  $V_{en}$ ,  $V_{nn}$  es el operador de repulsión electrostática debida a interacciones entre todos los núcleos con cargas  $Z_a e, Z_b e, \dots$ , y por último  $V_{ee}$  es el debido a repulsiones entre pares de electrones  $i$  y  $j$ .

El núcleo, debido a su masa relativamente más grande, se mueve mucho más despacio que los electrones. Esto tiene dos implicaciones: 1) la contribución más importante a la energía cinética es esencialmente la de los electrones y 2) la función de onda electrónica es, en cada instante, muy similar al caso en que los núcleos se encuentren inmóviles. Esto es, el rápido movimiento de los electrones les permite ajustar continuamente su estado a las diferentes posiciones instantáneas de los núcleos, adquiriendo un equilibrio casi instantáneo. Estas consideraciones permiten descomponer el problema en dos partes; una electrónica y otra nuclear. De manera que para la parte electrónica consideraremos que los núcleos se encuentran fijos. Esta aproximación se conoce con el nombre de "Aproximación de Born-Oppenheimer" (King 1964).

Tomando  $T_n = 0$  y  $V_{nn} = \text{cte}$ , la ecuación de Schrödinger se reduce a:

$$\mathbf{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e, \quad (2.4)$$

donde

$$\mathbf{H}_e = \mathbf{T}_e + \mathbf{V}_{en} + \mathbf{V}_{ee}, \quad (2.5)$$

$\Psi_e$  son las eigenfunciones electrónicas y  $E_e$  son los niveles de energía correspondientes.

La ecuación correspondiente para el movimiento nuclear está constituida por la energía cinética de los núcleos,  $T_n$  y su potencial electrostático,  $V_{nn}$ . Además, los eigenvalores  $E_e$ , proveen la parte del campo electrónico en el cual se mueven los núcleos,

$$(\mathbf{T}_n + \mathbf{V}_{nn} + \mathbf{E}_e) \Psi_n = E \Psi_n, \quad (2.6)$$

donde  $\Psi_n$  es una función de las coordenadas de los núcleos únicamente y los eigenvalores  $E$  obtenidos por esta ecuación son los eigenvalores finales de  $\mathbf{H}$  en la ecuación (2.1). Esto es, son las energías de la molécula. Como las coordenadas de  $\psi_e$  y  $\psi_n$  son independientes entre sí, la función de onda total está dada por

$$\Psi = \Psi_e \Psi_n, \quad (2.7)$$

la cual representa una buena aproximación a las eigenfunciones de  $\mathbf{H}$  (King 1964; Herzberg 1966).

## 2.2 Movimiento electrónico

### 2.2.1 Método de Orbitales Moleculares

La función de onda de la ecuación (2.4) se puede determinar para moléculas diatómicas que contienen un sólo electrón utilizando las soluciones de los átomos correspondientes (de la Peña 1979). Esto se hace considerando que el electrón tiene una probabilidad de encontrarse en el estado  $\psi_a(r)$  alrededor del núcleo  $a$  igual a la probabilidad de estar en un estado similar pero alrededor del núcleo  $b$ , designado como  $\psi_b$ . Por lo tanto podemos hacer una descripción estadística aproximada de la molécula mediante una combinación lineal de los orbitales atómicos  $\psi_a(r)$  y  $\psi_b(r)$ , con lo cual la función de onda electrónica se aproxima por

$$\Psi(r) = N[\psi_a(r) + \psi_b(r)], \quad (2.8)$$

donde  $N$  es un factor de normalización, que determinaremos más adelante.

A este tipo de funciones de onda como la anterior se les llama "orbitales moleculares", y se construyen por combinaciones lineales de orbitales atómicos. El método es usualmente llamando LCAO (del inglés, *lineal combination of atomic orbitals*).

Para determinar la función de onda de moléculas que contienen más de un electrón, se suele suponer que a cada electrón se le puede asignar una función de onda  $\Psi_i(r_i)$ , de tal forma que la función de onda total sea proporcional al producto de las  $\Psi_i(r_i)$  correspondientes a cada electrón, es decir

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) = \Psi_1(r_1) \cdot \Psi_2(r_2) \cdot \dots \cdot \Psi_N(r_N). \quad (2.9)$$

En el caso de una molécula de hidrógeno neutro,  $H_2$ , que está compuesta por dos núcleos (protones) y dos electrones, la función de onda adquiere la forma

$$\Psi(r_1, r_2) = \Psi_1(r_1) \cdot \Psi_2(r_2), \quad (2.10)$$

donde  $\Psi_1(r_1)$  y  $\Psi_2(r_2)$  son combinaciones lineales de orbitales atómicos dados por (2.8). Por lo tanto, la función de onda electrónica del  $H_2$ , en la aproximación de orbitales moleculares nos queda

$$\begin{aligned} \Psi(r_1, r_2) &= N^2[\Psi_a(r_1) + \Psi_b(r_1)] \cdot [\Psi_a(r_2) + \Psi_b(r_2)] \\ &= N^2[\psi_a(r_1)\psi_a(r_2) + \psi_b(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Esta función de onda, como fué discutido antes, considera que cada electrón tiene una probabilidad de estar lo suficientemente cerca de uno de los núcleos como para considerar que forma un átomo con él. En esta aproximación el movimiento de los electrones es considerado esencialmente independiente.

### 2.2.2 La Molécula $H_2^+$

El hamiltoniano para este sistema, compuesto por dos protones fijos y un electrón, está dado por la ecuación (2.2) de la siguiente forma:

$$H = -\frac{\hbar}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b}, \quad (2.12)$$

donde el primer término de la ecuación corresponde a la energía cinética del electrón y los otros dos a la energía potencial debida a la interacción del electrón con cada uno de los dos protones  $a$  y  $b$ .

Por el momento hemos despreciado la energía cinética y la energía potencial de los núcleos (Aproximación Born-Oppenheimer), con el fin de simplificar los cálculos. Los tomaremos en cuenta más adelante en esta misma sección. Ahora resolveremos la ecuación de Schrödinger (2.4) con este hamiltoniano mediante el método variacional con un solo parámetro libre. Como función de prueba tomaremos la dada por la ecuación (2.8) con (de la Peña 1979; Rybicki & Lightman 1979)

$$\psi_a(r) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-r_a), \quad \psi_b(r) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-r_b). \quad (2.13)$$

Como el potencial es simétrico en el punto medio de la molécula,  $r_{ab}/2$ , entonces podemos clasificar los estados por su paridad, con lo cual podemos escribir a la función de prueba como

$$\Psi_{g,u} = N_{g,u} [\psi_a(r) \pm \psi_b(r)]. \quad (2.14)$$

A  $\Psi_g$  se le denomina "función de onda par" y a  $\Psi_u$  "función de onda impar". Estas denominaciones corresponden simplemente a la paridad de los estados que ellas describen. La función  $\psi_g$  es simétrica respecto al intercambio de los dos protones,  $a$  y  $b$ , mientras que  $\psi_u$  es antisimétrica.

El cálculo se inicia encontrando el factor de normalización, integrando  $|\Psi_{g,u}(r)|^2$  sobre todo el espacio:

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi_{g,u}(r)|^2 d^3r = |N_{g,u}|^2 \int |\psi_a(r) \pm \psi_b(r)|^2 d^3r \\ &= |N_{g,u}|^2 [S_{aa} + S_{bb} \pm S_{ab} \pm S_{ba}], \end{aligned} \quad (2.15)$$

donde,  $S_{aa} = \int |\psi_a(r)|^2 d^3r = 1$ ,  $S_{bb} = \int |\psi_b(r)|^2 d^3r$ , etc (Rybicki & Lightman 1979). Por definición  $S_{aa} = S_{bb} = 1$  y además es fácil de demostrar que  $S_{ab} = S_{ba}$  (a esta última la designaremos como  $S$ ). Con lo anterior, la ecuación (2.15) toma la forma simple

$$|N_{g,u}|^2 = [2 \pm 2S]^{-1}, \quad (2.16)$$

donde  $S$  depende de la distancia internuclear  $r_{ab}$ , que desempeña el parámetro variacional en el sistema y que nos permite encontrar el valor de  $r_{ab}$  para el cual la energía

es mínima. La forma explícita de  $S$  está dada por la siguiente expresión (ver King 1964):

$$S = \frac{1}{\pi} \int r^2 \exp[-r_a - r_b] dr \, d\cos\theta \, d\phi, \quad (2.17)$$

donde  $r_a$  y  $r_b$  están representados en la figura 2 y tienen los valores  $|r - R_a|$  y  $|r - R_b|$  respectivamente.

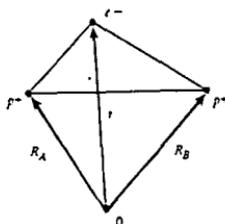


Figura 2.2. Ilustración de la localización de las partículas en la molécula  $H_2^+$  (Rybicki & Lightman 1979).

Haciendo el cambio de variable  $r_{ab} \equiv R_a - R_b$  obtenemos (ver Rybicki & Lightman 1979, problema 11.2):

$$S = (1 + r_{ab} + \frac{1}{3}r_{ab}^2)\epsilon^{-r_{ab}}, \quad (2.18)$$

y la ecuación (2.14) se convierte en

$$\Psi_g = \frac{\psi_a + \psi_b}{\sqrt{2 + 2S}} \quad \text{y} \quad \Psi_u = \frac{\psi_a - \psi_b}{\sqrt{2 - 2S}}. \quad (2.19)$$

Por lo tanto el valor esperado del hamiltoniano (2.12) es de la forma

$$E_{g,u} = \int \Psi_{g,u}^* H \Psi_{g,u} d^3r. \quad (2.20)$$

Si designamos con  $E_a = 13.6\text{eV}$  la energía del estado base del átomo de hidrógeno, es decir

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_a}\right)\psi_a = E_a\psi_a, \quad (2.21)$$

entonces

$$\begin{aligned}
 H_{aa} &= \int \psi_a^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} \right] \psi_a d^3r \\
 &= E_a - \int \psi_a^* \left[ \frac{e^2}{r_b} \right] \psi_a d^3r \equiv E_a + L,
 \end{aligned}
 \tag{2.22}$$

donde el valor de la segunda integral es

$$L = -\frac{e^2}{a_0} \left[ \frac{1}{\rho} - e^{-2\rho} \left( \frac{1}{\rho} + 1 \right) \right],
 \tag{2.23}$$

donde  $a_0$  es el radio de Bohr y  $\rho = r_{ab}/a_0$  (ver King 1964; Rybicki & Lightman 1979). Como la cantidad en paréntesis cuadrados es siempre positiva, entonces  $L$  es una cantidad negativa, y representa la energía debida a la atracción electrostática del electrón con el núcleo B. Las integrales  $H_{aa}$  y  $H_{bb}$  son equivalentes, así como  $H_{ab}$  y  $H_{ba}$ . Estas últimas tienen el valor

$$\begin{aligned}
 H_{ab} = H_{ba} &= \int \psi_b^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} \right] \psi_a d^3r = \int \psi_b^* \left[ E_a - \frac{e^2}{r_b} \right] \psi_a d^3r \\
 &= E_a S - \int \psi_b^* \left[ \frac{e^2}{r_b} \right] \psi_a d^3r \equiv E_a + K
 \end{aligned}
 \tag{2.24}$$

donde  $K$  tiene la forma explícita

$$K = -\frac{e^2}{a_0} [e^{-\rho}(1 + \rho)].
 \tag{2.25}$$

En esta ecuación, al igual que en la ecuación (2.23)  $\rho$  es la distancia internuclear en unidades de  $a_0$  y el valor de  $K$  (al igual que el de  $L$ ) también es siempre negativo (King 1964). Con lo cual, la ecuación (2.20) la podemos reescribir como

$$E_+ = \frac{H_{aa} + H_{ab}}{1 + S} \quad \text{y} \quad E_- = \frac{H_{aa} - H_{ab}}{1 + S}.
 \tag{2.26}$$

Al sustituir  $H_{aa}$  y  $H_{ab}$  en estas ecuaciones, obtenemos

$$E_+ = E_a + \frac{L + K}{1 + S}, \quad E_- = E_a + \frac{L - K}{1 - S}.
 \tag{2.27}$$

Quando la distancia internuclear crece, los términos  $L$  y  $K$  tienden a cero y por lo tanto, como era de esperarse,  $E_+$  y  $E_-$  se reducen a la energía de un átomo de hidrógeno.

Pero veamos su comportamiento más detalladamente. En la figura 2.3 se muestran los valores de las integrales  $S$ ,  $L$  y  $K$  como función de  $\rho$ . Los valores de  $L$  y

$K$  están en unidades de  $e^2/a_0 = 27.210$  eV y  $S$  es adimensional. La figura también muestra el término  $1/r_{ab}$  (en unidades de  $\rho$ ), que es proporcional a la energía potencial de repulsión de los dos núcleos. Este último término es de gran importancia en el sistema, ya que proporciona la fuerza de repulsión al momento de la unión de los átomos (King 1964). La suma de la energía electrónica y la de repulsión debida a los núcleos,  $(E_+ + 1/r_{ab})$  y  $(E_- + 1/r_{ab})$ , nos da las curvas de energía potencial del sistema que se muestran en la figura 2.4. Las dos curvas,  $\psi_g$  y  $\psi_u$ , tienden a infinito cuando  $\rho \rightarrow 0$ .

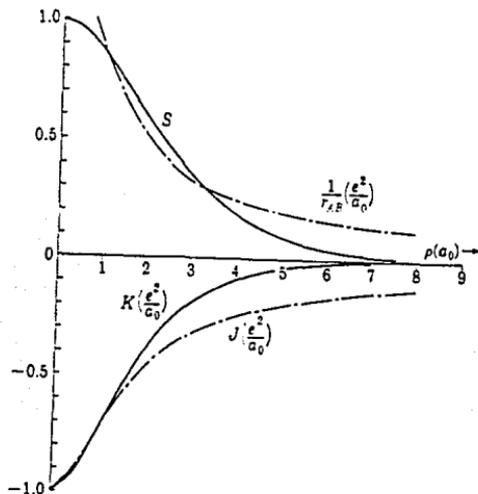


Figura 2.3. Variación de  $S$  (adimensional)  $K$ ,  $L$  y  $1/r_{ab}$  (en unidades de  $e^2/a_0$ ) en función de la separación internuclear  $\rho$  para la molécula  $H_2^+$  (King 1964).

Para distancias internucleares muy grandes,  $\rho \rightarrow \infty$ ,  $S$  y  $K$  son muy pequeñas (Figura 2.3) y  $-L$  tiende al valor  $1/r_{ab}$  (ec. 2.23). De manera que los términos  $1/r_{ab}$  y  $L$  se cancelan y las curvas de la Figura 2.4 tienden al valor límite  $E_a = \frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{a_0} \right) = -13.605$  eV, la energía de el estado  $1S$  del átomo de hidrógeno.

La diferencia de energía entre los estados  $\Psi_g$  y  $\Psi_u$  depende de la separación de los protones. Supongamos que se comienza con un átomo de hidrógeno y un protón  $H^+$  muy lejos uno del otro. A medida que disminuye la distancia entre ellos, existen dos energías diferentes para cada distancia: una correspondiente a  $(E_g + 1/r_{ab})$  con función de onda par,  $\Psi_g$ , y otra al estado  $(E_u + 1/r_{ab})$  con función de onda impar,  $\Psi_u$  (King 1964; Herzberg 1966). Como la energía potencial negativa de atracción es mayor que la energía potencial positiva de repulsión de los protones en el estado con  $\Psi_g$ , la energía total disminuye al disminuir  $\rho$ . Lo contrario ocurre para  $\Psi_u$  y la energía aumenta al disminuir  $\rho$ . Sin embargo, para distancias menores que un cierto valor  $r_e$ , los protones están tan cerca que su energía potencial de repulsión comienza a dominar sobre la

energía potencial del electrón, aún en el estado con  $\Psi_g$ . De forma que para distancias menores que  $r_e$ , la energía correspondiente a  $\Psi_u$  también aumenta al disminuir el valor de  $r$ .

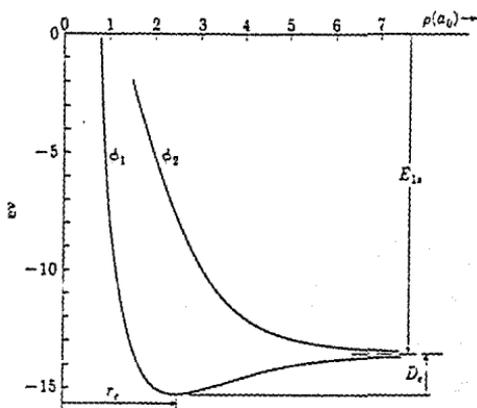


Figura 2.4. Curvas de energía potencial para el estado más bajo de la molécula  $H_2^+$  (King 1964).

La curva de energía para  $\Psi_g$  tiene un mínimo en  $r_e$  que corresponde a la separación de equilibrio de los dos protones y hace posible una configuración estable para el  $H_2^+$ . Este mínimo indica que el sistema puede existir con una energía menor que la de un átomo de hidrógeno. La diferencia de potencial medida respecto a la del átomo de hidrógeno es designada por  $D_e$  en la figura 2.4. Por su parte, la curva para  $\Psi_u$  no tiene un mínimo y no da lugar a una configuración estable (ó molécula).

Los estados de la molécula  $H_2^+$  que hemos discutido corresponden al caso en que el átomo de hidrógeno estaba inicialmente en su estado fundamental. Hay, sin embargo, otras curvas similares a las de la Figura 2.4 que corresponden a los estados electrónicos excitados de la molécula y que están asociadas con un átomo de hidrógeno inicialmente en un estado excitado. La Figura 2.5 muestra algunas de las configuraciones posibles.



iónicos  $H^-H^+$  y  $H^+H^-$  en los cuales ambos electrones se encuentran en un mismo núcleo. Los productos  $\psi_a(r_1)\psi_a(r_2)$  y  $\psi_b(r_1)\psi_b(r_2)$  serán llamados "términos iónicos". Por su lado, los términos  $\psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$  y  $\psi_b(r_1)\psi_a(r_2)$  que sí aparecen en la función de onda (2.29), son los llamados "términos covalentes". Estos últimos describen a la molécula como una estructura formada por átomos que comparten electrones y no por iones.

Las funciones de onda descritas en las ecuaciones (2.28) y (2.29) toman en cuenta el hecho de que cada electrón tiene igual probabilidad de permanecer más cercano al núcleo  $a$  que al  $b$ , pero los métodos usados no son equivalentes debido a la forma diferente en que introducen el intercambio de electrones. Sin embargo, como veremos mas adelante, predicen resultados similares.

Ahora veremos otra función de onda en la cual nuevamente aparecen los términos iónicos y los covalentes de la siguiente forma:

$$\Psi = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) + \psi_b(r_1)\psi_a(r_2) + \lambda[\psi_a(r_1)\psi_a(r_2) + \psi_b(r_1)\psi_b(r_2)]. \quad (2.30)$$

Los dos primeros términos del miembro derecho son precisamente las funciones de onda del método Heitler-London y representan el acoplamiento (puramente) covalente entre los dos átomos neutros de H (King 1964). Por su lado, el término entre paréntesis representa el enlace iónico. Esta función de onda describe una situación enteramente diferente, obtenida a partir de dos casos complementarios: a) los dos electrones se encuentran ligados al núcleo  $a$  y el núcleo  $b$  está solo; b) los dos electrones están ligados a  $b$  y el núcleo  $a$  está solo. En ambos casos, se tiene un ion negativo (protón con dos electrones orbitales) y uno positivo (protón solo). Para el caso particular de la molécula de  $H_2$ , la ligadura iónica tiene menos peso que la covalente y el parámetro  $\lambda$  tiene un valor menor a 1 ( $\lambda = 0.256$ ; King 1964).

En lo que resta de esta sección encontraremos los eigenvalores correspondientes a cada una de las eigenfunciones dadas por las ecuaciones (2.28), (2.29) y (2.30). También a manera de ilustración, en la Figura 2.6 presentamos las tres curvas de energía potencial obtenidas con cada una de las funciones de onda.

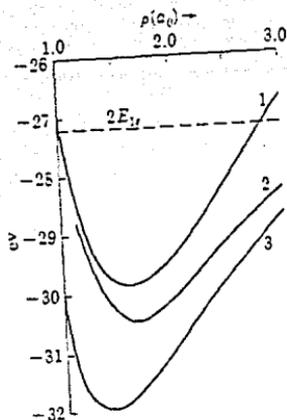


Figura 2.6. Curvas de energía potencial de la molécula de hidrógeno neutro obtenidas con diferentes funciones de onda. (1) Función de onda dada por el método de orbitales moleculares. (2) Usando la función de onda de Heitler & London. (3) Función de onda 2.30 (King 1964).

La línea punteada de la Figura 2.6 representa la energía de dos átomos de hidrógeno en su estado base. La diferencia de energía entre este estado base y el estado de mínima energía para cada una de las curvas la designaremos (como se hizo en la molécula  $H_2^+$ ), por el símbolo  $D_e$ . Este valor es muy cercano al de la energía de disociación del  $H_2$ . La Tabla 2.1 muestra los valores de  $D_e$  para cada una de las curvas de la figura 2.6. También muestra los valores de las distancias para los cuales el potencial es mínimo.

TABLA 2.1  
Valores calculados y experimentales para la molécula de hidrógeno en su estado base (King 1964).

Función de Onda	Curva	$r_e(\text{Å})$	$D_e(\text{eV})$
Eq. 1.28	1	0.85	2.68
Eq. 1.29	2	0.86	3.14
Eq. 1.30	3	0.75	4.02
Experimental	-	0.74	4.747

A continuación aproximaremos la ecuación de Schrödinger (King 1964) para la molécula de hidrógeno neutro usando la función de onda dada por la ecuación (2.28). El hamiltoniano de esta molécula (ver ecuación 2.2) es:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (2.31)$$

Para simplificar los cálculos pondremos este hamiltoniano en términos del hamiltoniano de la molécula de  $\text{H}_2^+$  ec. (2.12), entonces:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (2.32)$$

donde el operador  $\mathbf{H}_1$  representa la interacción del electrón 1 con cada uno de los núcleos,  $a$  y  $b$ .  $\mathbf{H}_2$  representa la del otro electrón con estos mismos núcleos. El término  $e^2/r_{12}$  representa la repulsión electrostática de los dos electrones y, tal como lo hicimos para el caso de  $\text{H}_2^+$ , no hemos incluido por este momento el término de repulsión entre núcleos. El valor esperado de las energías es:

$$E = \int \Psi^* \mathbf{H} \Psi d^3 r = \int \Psi^* \mathbf{H}_1 \Psi d^3 r + \int \Psi^* \mathbf{H}_2 \Psi d^3 r + \int \Psi^* \frac{e^2}{r_{12}} \Psi d^3 r. \quad (2.33)$$

Tomaremos la  $\Psi$  dada por la ecuación (2.28). Al sustituirla en la ecuación (2.33), cada una de las integrales de ésta se convierten a su vez en dieciséis integrales. Estas dieciséis integrales pueden escribirse de cuatro formas diferentes tomando en cuenta que: 1) los núcleos son indistinguibles, 2) haciendo la separación de las coordenadas de los dos electrones en la forma  $d^3 r = d^3 r_1 d^3 r_2$  y 3) tomando en cuenta que tanto  $\mathbf{H}_1$  como  $\mathbf{H}_2$  son, respectivamente, sólo funciones de las coordenadas de los electrones 1 y 2. Entonces los cuatro tipos diferentes de estas integrales son:

$$\begin{aligned} \int \psi_a^*(r_1) \psi_b^*(r_2) H_1 \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d^3 r &= \int \psi_b^*(r_2) \psi_b(r_2) d^3 r_2 \int \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_a(r_1) d^3 r_1 \\ &= 1 \times H_{aa}, \end{aligned} \quad (2.34a)$$

$$\begin{aligned} \int \psi_a^*(r_1) \psi_a^*(r_2) H_1 \psi_a(r_1) \psi_b(r_2) d^3 r &= \int \psi_a^*(r_2) \psi_b(r_2) d^3 r_2 \int \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_a(r_1) d^3 r_1 \\ &= S \times H_{aa}, \end{aligned} \quad (2.34b)$$

$$\begin{aligned} \int \psi_a^*(r_1) \psi_a^*(r_2) H_1 \psi_b(r_1) \psi_a(r_2) d^3 r &= \int \psi_a^*(r_2) \psi_a(r_2) d^3 r_2 \int \psi_a^*(r_1) H_1 \psi_b(r_1) d^3 r_1 \\ &= 1 \times H_{ab}, \end{aligned} \quad (2.34c)$$

$$\int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2)H_1\psi_b(r_1)\psi_a(r_2)d^3r = \int \psi_b^*(r_2)\psi_a(r_2)d^3r_2 \int \psi_a^*(r_1)H_1\psi_b(r_1)d^3r_1$$

$$= S \times H_{ab}. \quad (2.34d)$$

Una simplificación similar puede hacerse para las integrales sobre  $H_2$ .  $H_{aa} = H_{bb}$  está dada por la ecuación (2.22), y  $H_{ab} = H_{ba}$  por la ecuación (2.24); entonces la ecuación (2.33) toma la forma

$$E = 2(E_a + \frac{L+K}{1+S}) + \int \Psi^* \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \Psi d^3r, \quad (2.35)$$

donde  $E_a$  es la energía del átomo de hidrógeno en su estado base. El primer término de la derecha de la ecuación (2.35) es la energía del estado base de la molécula  $H_2^+$  y el segundo es el de la repulsión producida entre los electrones. Este término no existía en el hamiltoniano de la molécula de hidrógeno ionizado ya que teníamos un solo electrón. La integral  $\int \Psi^* \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \Psi d^3r$  consta de dieciséis términos, como con  $H_1$  y  $H_2$ , pero estos dieciséis términos son de cuatro tipos diferentes (King 1964),

$$C = \int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)d^3r, \quad (2.36a)$$

$$A = \int \psi_a^*(r_1)\psi_b^*(r_2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)d^3r, \quad (2.36b)$$

$$L = \int \psi_a^*(r_1)\psi_a^*(r_2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)d^3r, \quad (2.36c)$$

$$C_1 = \int \psi_a^*(r_1)\psi_a^*(r_2) \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \psi_a(r_1)\psi_a(r_2)d^3r, \quad (2.36d)$$

con lo cual,

$$\int \Psi^* \left| \frac{e^2}{r_{12}} \right| \Psi d^3r = \frac{A + 2L + C/2 + C_1/2}{(1+S)^2}. \quad (2.37)$$

Por lo tanto la energía total del estado base de la molécula de  $H_2$  es:

$$E = 2E_a + \frac{2(L+K)}{1+S} + \frac{A + 2L + C/2 + C_1/2}{(1+S)^2}. \quad (2.38)$$

La curva de potencial para la molécula de hidrógeno puede ser obtenida mediante la suma  $E + 1/r_{ab}$  como función de  $\rho$ . Este resultado se muestra en la curva 1 de la Figura 2.6.

La curva 1 en la Figura 2.6 tiene algunas diferencias con respecto a los valores experimentales (King 1964). Por ejemplo, predice una separación de equilibrio  $r_e = 0.85 \text{ \AA}$  mientras que el valor experimental es  $0.74 \text{ \AA}$ . También hay una gran diferencia entre el valor experimental y el predicho para  $D_e$ . La curva 1 de la Figura 2.6 tiene  $D_e = 2.68 \text{ eV}$ , mientras que el valor experimental es  $D_e = 4.747 \text{ eV}$ . Finalmente, para separaciones internucleares mayores a  $\rho \sim 3a_0$  la curva 1 predice energías mayores que la correspondiente a dos átomos de hidrógeno separados una gran distancia.

Para el caso de la función de onda de Heitler-London (ecuación 2.29), el método de solución es muy similar al utilizado para la función de onda (2.28).

Si sustituimos el valor de  $N_1$  en la ecuación (2.29) y tomamos el hamiltoniano para la molécula de hidrógeno neutro, con ayuda de la ecuación (2.33), encontramos que la energía del sistema es:

$$E = 2E_a + \frac{2(L + SK)}{1 + S^2} + \frac{C + A}{(1 + S)^2}. \quad (2.39)$$

Sumando el potencial de interacción entre los núcleos al valor de  $E$  en la ecuación anterior y graficando contra la separación internuclear obtenemos la curva (2) de la figura 2.6. Los resultados obtenidos para  $r_e$  y  $D_e$  a partir de la función de onda de Heitler y London, se muestran en la tabla 2.1.

Usando la función de onda (2.30), la solución a la ecuación de Schrödinger puede obtenerse de la misma forma que para las dos funciones de onda anteriores. Se sustituye la función de onda (2.30) en la ecuación (2.33) y al valor esperado de la energía le sumamos el término correspondiente a la repulsión entre protones,  $1/r_{ab}$ , en unidades de  $e^2/a_0$ . Esto se muestra en la curva (3) de la Figura 2.6 y los valores de  $r_e$  y  $D_e$  están dados en la Tabla 2.1.

De las curvas de la Figura 2.6, la curva (3) es la que más se aproxima a los valores experimentales y predice el valor de la energía molecular experimental cuando  $\rho$  tiende a infinito (King 1964). Las curvas (1) y (2) predicen energías moleculares mayores a la energía de amarre.

### 2.3 Movimientos nucleares

El paso siguiente en nuestro análisis de la estructura molecular es estudiar el movimiento nuclear. Para esto recordemos que la ecuación de onda correspondiente al movimiento nuclear (ec. 2.6) contiene a los eigenvalores electrónicos  $E_e$ . Es decir, durante el movimiento nuclear la molécula continúa en un estado electrónico  $\psi_e$  con energía electrónica  $E_e$ . Esta energía, al igual que la energía potencial nuclear  $V_{nn}$ , es una energía electrostática que depende de la separación internuclear  $r$ . Para simplificar los cálculos definimos (King 1964) una función potencial con la forma:

$$V(r) = E_e + V_{nn}, \quad (2.40)$$

entonces la ecuación (2.6) se convierte en

$$[T_n + V(r)]\psi_n = E\psi_n, \quad (2.41)$$

donde  $\psi_n$  es una función de las coordenadas del núcleo y  $T_n$  es el operador de la energía cinética.

Para una molécula diatómica existen dos formas de movimiento: rotaciones alrededor del eje que pasa por el centro de masa a lo largo de una línea perpendicular al eje internuclear y vibraciones a lo largo del eje internuclear. Para simplificar el tratamiento de estos movimientos, consideramos que la molécula gira como un rotor rígido y que vibra como un oscilador armónico (Rybicki & Lightman 1979; King 1964).

Primero analizaremos cada movimiento por separado, como si fueran dos movimientos independientes, y después los veremos acoplados.

### 2.3.1 Movimiento rotacional puro

En el caso del movimiento rotacional rígido podemos despreciar cualquier otro movimiento a lo largo del eje internuclear, esto es que  $V(r) = 0$ . Nuevamente designaremos a los núcleos de la molécula diatómica por las letras  $a$  y  $b$  y sus masas son  $M_a$  y  $M_b$ , respectivamente. La ecuación (2.41) nos queda de la siguiente forma (King 1964):

$$\frac{1}{M_a} \nabla_a^2 \psi + \frac{1}{M_b} \nabla_b^2 \psi + \frac{2}{\hbar^2} E \psi = 0, \quad (2.42)$$

esto es equivalente al movimiento de una partícula simple (sin estructura) con una masa reducida  $\mu$ ,

$$\mu = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b}. \quad (2.43)$$

El problema de describir el movimiento nuclear, entonces, se reduce al del movimiento de una sola partícula con masa  $\mu$ . La ecuación (2.42) se convierte en:

$$\nabla^2 \psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} E \psi = 0, \quad (2.44)$$

donde  $\nabla^2$  es el operador laplaciano referido a las coordenadas del sistema del centro de masa. La solución de la ecuación (2.44) es (Leighton 1959; Herzberg 1950):

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} J(J+1). \quad (2.45)$$

donde  $J$  es el número cuántico rotacional y toma los valores  $0, 1, 2, \dots$

Es común que se defina una constante rotacional, como  $B^* = \hbar^2/2\mu r^2 = \hbar^2/2I$  (King 1964), donde  $I$  es el momento de inercia de la molécula. De acuerdo con la ecuación (2.45) la separación entre niveles adyacentes de energía del rotor rígido aumenta linealmente con  $J$ , tal como lo muestra la Figura 2.7.



Figura 2.7. Niveles de energía para el rotor rígido (King 1964)

### 2.3.2 Movimiento vibracional puro

Hasta este momento hemos pensado en la molécula diatómica como un sistema de dos masas puntuales. Es decir, hemos despreciado la extensión finita de los átomos bajo la suposición de que la masa del átomo está prácticamente concentrada en el núcleo, en un radio de solo  $10^{-12}$  cm, mientras la distancia internuclear es del orden de  $10^{-8}$  cm (Herzberg 1950).

La configuración estable de la molécula está definida por la distancia internuclear  $r = r_c$ . A medida que  $r$  aumenta, la atracción entre los átomos se hace mas débil y si se separan demasiado la molécula se disocia. Esto significa que la molécula puede tener vibraciones de baja amplitud, que no deben exceder ciertos límites.

Resolviendo el problema para una partícula de masa reducida  $\mu$  (ver Herzberg 1955) la ecuación (2.44) se convierte en:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dr^2} = E\psi(r). \quad (2.46)$$

Cuya solución es (para  $E = k(r - r_c)^2/2$ ):

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu_c, \quad (2.47)$$

donde  $\nu_c$ , es la frecuencia de vibración clásica  $\nu_c = (2\pi)^{-1} \sqrt{k/\mu}$  y  $v$  es el número cuántico vibracional y toma valores  $v = 0, 1, 2, \dots$

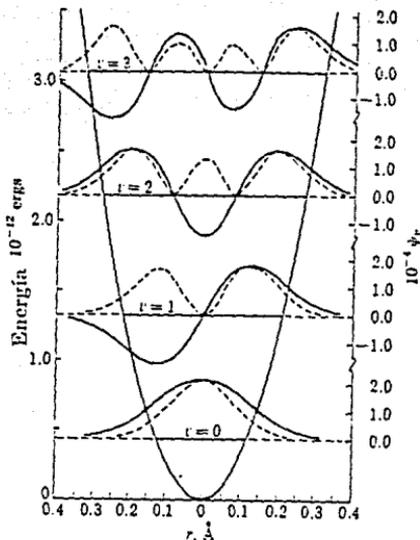


Figura 2.8. Niveles de energía vibracional (líneas horizontales), eigenfunciones del oscilador armónico (curvas continuas), distribución de probabilidad (curvas discontinuas), para la molécula de hidrógeno (King 1964).

En la Figura 2.8, la función potencial  $v(r)$  está representada por la parábola y las líneas verticales muestran los eigenvalores vibracionales  $E_v$ . La función de onda vibracional de cada nivel de energía se muestra superpuesta al nivel de energía correspondiente. El número de nodos de las funciones es igual al número cuántico  $v$ . La densidad de probabilidad, la cual se obtiene mediante el cuadrado de la función de onda, se muestra con líneas punteadas. Esta probabilidad tiende a cero cuando  $r$  tiende al valor definido por la curva  $V(r)$ , la cual define clásicamente el máximo desplazamiento de las partículas oscilantes. En mecánica cuántica este desplazamiento tiene una probabilidad diferente de cero en cada uno de estos estados cuantizados fuera del potencial  $V(r)$ , tal como lo muestran las líneas punteadas de la Figura 2.8.

### 2.3.3 Movimiento acoplado

Clásicamente, los periodos de vibración y rotación de una molécula son del orden de  $10^{-14}$  y  $10^{-12}$  s, respectivamente. Esto indica que una molécula puede vibrar del orden de cien veces durante una rotación (Rybicki & Lightman 1979; King 1964). La energía molecular debida a la rotación y a la vibración, se puede expresar (King 1964; Alonso & Finn 1971) simplemente sumando las ecuaciones (2.45) y (2.47). Entonces

$$E = E_v + E_r = \left(v + \frac{1}{2}\right)h\nu_c + \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1). \quad (2.48)$$

que representa la energía de un rotor vibrante. Para  $v$  pequeñas (en la molécula de hidrógeno) la cantidad  $\hbar/2I$  es mucho menor ( $\sim 10^{-4}$  eV), que  $h\nu_c$  ( $\sim 10^{-1}$  eV), y podemos decir que a cada nivel vibracional corresponden varios niveles rotacionales. Cada eigenestado de la molécula definido por el número cuántico  $v$  tiene entonces asociado un conjunto de niveles de energía rotacionales. Esto se muestra en la Figura 2.9.

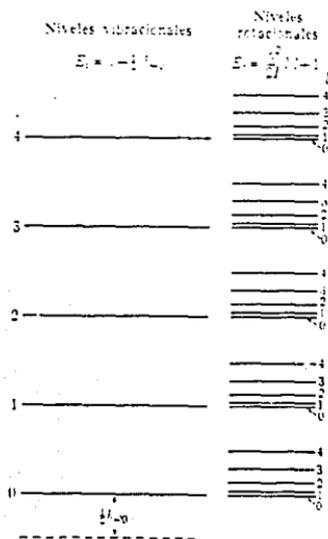


Figura 2.9. Niveles de energía rotacionales y vibracionales de una molécula diatómica (Alonso & Finn 1971).

Hay que hacer notar que en la discusión de la sección 2.3 encontramos solamente el valor mínimo de la energía electrónica para la molécula de hidrógeno (es decir, la energía del estado base). Sin embargo, una molécula puede tener varias configuraciones electrónicas o estados estacionarios. Y por lo tanto, a cada estado electrónico de los átomos, le corresponden muchos estados vibracionales y a cada estado vibracional le corresponden varios estados rotacionales (Figura 2.10). De manera que la energía de cada estado está dada por la suma de las energías (Herzberg 1950)

$$E = E_e + E_v + E_r = E_e + (v + \frac{1}{2})h\nu_c + \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad (2.49)$$

donde  $E_e$  se refiere a la energía electrónica en el mínimo de la energía potencial.



**Figura 2.10.** Niveles vibracionales y rotacionales de dos estados electrónicos a y b de una molécula. Sólo los primeros niveles rotacionales y vibracionales son dibujados en cada caso (Herzberg 1950).

# Capítulo 3

## Transiciones Radiativas

En el capítulo anterior presentamos las formulaciones aproximadas que se han desarrollado para estudiar a la molécula de hidrógeno y discutimos con detalle la construcción del estado base. Ahora veremos algunos de los niveles de energía asociados a diferentes estados de la molécula y la naturaleza de las transiciones entre estos estados. En particular, discutimos las reglas de selección para las transiciones radiativas y damos una tabla con las líneas observadas en objetos de interés astronómico. Para esto usamos la teoría semi-clásica de la radiación (Rybicki & Lightman 1979), en donde al sistema de partículas (átomos o moléculas) se le da un tratamiento mecánico-cuántico, mientras que el campo de radiación es tratado clásicamente.

### 3.1 Notación

La notación usada para los estados electrónicos de una molécula es, con algunos ajustes, muy análoga a la usada para átomos (Herzberg 1944). En este trabajo utilizaremos la notación establecida por Jenkins (1953). La notación para el momento angular, considera diferentes operadores y su proyección en la dirección del eje internuclear, dada por el vector unitario  $\hat{k}$ . El momento angular orbital electrónico total,  $\vec{L}$ , está fuertemente acoplado al eje internuclear, y los estados son especificados por los valores de la proyección

$$\Lambda = |\vec{L} \cdot \hat{k}|. \quad (3.1)$$

$\vec{N}$  es el momento angular total, sin incluir a los espines y  $\vec{R}$  es la rotación del núcleo. Los diferentes estados del momento angular denotan  $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$  para  $\Lambda = 1, 2, 3, \dots$

Con excepción de los estados  $\Sigma$ , los diferentes estados de momento angular tienen degeneración de segundo orden a causa del signo doble de  $\bar{L}$ . En el caso de moléculas homonucleares, tales como  $\text{H}_2^+$  y  $\text{H}_2$ , hay que considerar la simetría nuclear. La densidad de probabilidad de un electrón debe ser la misma en puntos situados simétricamente respecto al centro, de manera que la función de onda del electrón debe ser la misma en puntos simétricos y debe tener el mismo valor pero con signo opuesto. A las funciones de onda que tienen el mismo signo se les denomina funciones de onda par,  $\psi_g$ , mientras que a funciones de onda que cambian de signo se les denomina funciones de onda impar,  $\psi_u$ . Para moléculas homonucleares, los estados suelen ser designados como,  $\Sigma_g^+$ ,  $\Sigma_u^-$ ,  $\Pi_g$ ,  $\Pi_u$ , etc. Para estados  $\Sigma$ , los supraíndices del lado derecho (que se designan por los signos + ó -) están relacionados con las propiedades de simetría de la función de onda electrónica y los supraíndices,  $g$  y  $u$  se refieren a los orbitales moleculares par e impar (ver ecuación 2.14)

En el acoplamiento Russell-Sanders (King 1964; de la Peña 1979), el número cuántico del espín total para dos electrones puede tomar los valores  $S = 0$  ó  $S = 1$ . El valor  $2S + 1$ , la multiplicidad, suele escribirse como el supraíndice izquierdo de  $\Lambda$ . Por ejemplo, el estado con  $\Lambda = 0$  y  $S = 0$  se designa  $^1\Sigma_g^+$ , mientras que el que tiene  $\Lambda = 0$  y  $S = 1$  se escribe  $^3\Sigma_u^+$ , etc. Los estados electrónicos  $\Sigma$  tienen degeneración de  $(2S + 1)$ , el cual es igual a la multiplicidad del spin. Los estados con  $\Lambda > 0$  tienen una degeneración de  $2(2S + 1)$ .

Los diferentes estados electrónicos son nombrados alfabéticamente. Se usan letras mayúsculas para los singuletes y letras minúsculas para los triplete. Por ejemplo el estado triplete de mas baja energía es el  $b^3\Sigma_u^+$ . El estado base del  $\text{H}_2$  es el singulete  $X^1\Sigma_g^+$  (Field, Somerville & Dressler 1966; Shull & Bechwit 1982).

Como vimos en el capítulo anterior, cada estado electrónico tiene un conjunto de niveles vibracionales y rotacionales y las probabilidades de transición de un nivel a otro dependen de sus funciones de onda.

### 3.2 Transiciones radiativas

Una molécula es un sistema complejo con muchos grados de libertad, así es que los cálculos de las transiciones entre diferentes niveles de energía es un problema complicado. Para simplificar los cálculos se suele usar la aproximación adiabática (Davidov 1965) en la cual se supone que la energía de la molécula puede ser escrita como la suma de la energías debidas al movimiento electrónico,  $E_e$ , a vibraciones nucleares,  $E_v$ , y a la energía rotacional,  $E_r$ , de la forma

$$E = E_e + E_v + E_r. \quad (3.2)$$

La función de onda de la molécula puede ser escrita como el producto de funciones de onda correspondientes a cada uno de estos movimientos, es decir,

$$\Psi = \psi_e \cdot \psi_v \cdot \psi_r. \quad (3.3)$$

La frecuencia de radiación producida (o absorbida) en estas transiciones está dada por  $(E_n - E_m)/\hbar$ , donde  $E_m$  es el estado original del sistema y  $E_n$  es el estado final. Si  $E_n > E_m$ , la transición se hace absorbiendo un fotón, pero se emite un fotón si  $E_n < E_m$ . La probabilidad de que ocurran las transiciones son determinadas por las eigenfunciones de los estados que intervienen en la transición. Esta probabilidad nos da las reglas de selección y puede predecir las intensidades de las líneas espectrales.

Una forma de representar el hamiltoniano de un campo de radiación a primer orden es mediante la energía de interacción  $\vec{d} \cdot \vec{E}$ , donde  $\vec{E}$  es el vector de campo eléctrico de la radiación incidente y  $\vec{d}$  es el momento dipolar eléctrico de la molécula, cuyas componentes en coordenadas esféricas son

$$d_x = d_0 \sin \nu \cos \varphi, \quad d_y = d_0 \sin \nu \sin \varphi, \quad d_z = d_0 \cos \nu, \quad (3.4)$$

donde  $\varphi$  es el ángulo azimutal de la línea que conecta la masa puntual con el origen con respecto al eje  $z$ ,  $\nu$  es el ángulo entre ésta y el eje  $z$ , y  $d_0$  es el momento dipolar eléctrico del sistema (ver por ejemplo Davydov 1965 ó Herzberg 1950). La probabilidad de que ocurra una transición entre los estados  $n$  y  $m$ , debida a la interacción  $\vec{d} \cdot \vec{E}$ , es proporcional a

$$|\bar{R}_{nm}|^2 = |\bar{R}_{mn}|^2 = |R_x|^2 + |R_y|^2 + |R_z|^2, \quad (3.5)$$

donde  $\bar{R}_{nm}$ , son los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico, cuyas componentes son

$$R_x = \int \psi_m^* \bar{d}_x \psi_n dx, \quad \text{etc.} \quad (3.6)$$

Generalmente,  $|\bar{R}_{nm}|^2$  tiene un valor diferente de cero para transiciones (entre ciertos estados de un sistema), llamadas transiciones de dipolo eléctrico. De hecho,  $|\bar{R}_{nm}|^2$  nos proporciona las *reglas de selección* para transiciones de dipolo eléctrico, las cuales regulan la producción de las líneas espectrales llamadas *transiciones permitidas*.

En el caso de moléculas con momento dipolar eléctrico igual a cero,  $|\bar{R}_{nm}| = 0$  y no existen las transiciones dipolares eléctricas. Sin embargo, las transiciones pueden llevarse a cabo a través de multipolos de orden mayor. Por ejemplo, si tienen un *momento cuadrupolar eléctrico*,  $\hat{Q}$ , diferente de cero, donde

$$\hat{Q} = \sum_i q_i x_i^2, \quad (3.7)$$

existen *transiciones cuadrupolares*. Estas, sin embargo, son menos probables que las de dipolo eléctrico. Así mismo, un sistema de cargas eléctricas en movimiento pueden tener un momento dipolar magnético y éste da lugar a transiciones de dipolo magnético cuyas reglas de selección son diferentes a las transiciones dipolares eléctricas. Al igual que las cuadrupolares, las transiciones de dipolo magnético son menos probables que las de

dipolo eléctrico. Este tipo de transiciones son denominadas "prohibidas", y producen líneas espectrales de gran interés astrofísico cuando estos últimos son permitidos.

Por otro lado, en moléculas diatómicas que tienen momento dipolar igual a cero en el estado base, las transiciones dipolares eléctricas pueden ocurrir debido a distorsiones producidas por perturbaciones con otras moléculas dentro de un gas a "altas" presiones (del orden de varios Tor [1 Tor  $\approx 10^{-3}$  atms]) ó por interacciones con un campo electromagnético externo (Herzberg 1950).

Las diferencias de energía entre niveles rotacionales adyacentes son de cien a mil veces más pequeñas que las energías entre niveles vibracionales, los cuales a su vez son del orden de diez a cien veces más pequeñas que las correspondientes a niveles electrónicos. Entonces, podemos dividir el espectro molecular en tres tipos: (1) *espectro rotacional*, que ocurre cuando solamente el movimiento rotacional de la molécula cambia; (2) *espectro vibracional-rotacional*, éste ocurre cuando ambos estados, vibracional y rotacional, están cambiando; (3) *espectro electrónico-vibracional-rotacional*, o simplemente, *espectro electrónico*, que se produce cuando el estado electrónico de la molécula cambia al mismo tiempo que sus estados vibracionales y rotacionales.

### 3.3 Transiciones Rotacionales

En una transición rotacional pura no hay cambio en los estados electrónicos o vibracionales. Por lo tanto  $\psi_e$  y  $\psi_v$  no cambian y la ecuación de onda para el movimiento rotacional es  $\Psi = \psi_r$ .

La determinación de las funciones de onda de los diferentes niveles es un problema complicado, que no discutiremos aquí, pero el lector interesado puede consultar Herzberg (1950). Para nuestros propósitos basta partir de la forma funcional

$$\psi_r = N_r P_J^{iM}(\cos \nu_i) e^{iM\varphi}, \quad (3.8)$$

donde

$$M = J, (J - 1), (J - 2), \dots, -J,$$

es el número cuántico que representa, en unidades de  $h/2\pi$ , la componente del momento angular  $J$  en la dirección del eje  $z$ ;  $P_J^{iM}(\cos \nu)$  es la función asociada de Legendre; y  $N_r$  es una constante de normalización.

Sustituyendo la función de onda y las componentes del momento angular en la ecuación (3.6) se puede escribir

$$\begin{aligned} R_x^{J'M'J''M''} &= d_0 \int \psi_r^{J'M'} \sin \nu \cos \varphi \psi_r^{J''M''} d\sigma, \\ R_y^{J'M'J''M''} &= d_0 \int \psi_r^{J'M'} \sin \nu \sin \varphi \psi_r^{J''M''} d\sigma, \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$R_z^{J'M'J''M''} = d_0 \int \psi_r^{J'M'} \cos \nu \psi_r^{J''M''} d\sigma,$$

Aquí se ve explícitamente que estos elementos de matriz serán diferentes de cero, es decir que habrá una transición radiativa, sólo cuando el momento dipolar  $d_0$  y la integral sean diferentes de cero. En un manejo más detallado (Herzberg 1950), usando los teoremas de armónicos esféricos, se encuentra que la integral es diferente de cero sólo para valores  $\Delta J = J' - J'' = \pm 1$ . Por lo tanto las reglas de selección para transiciones rotacionales dipolares las podemos escribir como

$$1. d \neq 0 \quad (3.10)$$

$$2. \Delta J = \pm 1. \quad (3.11)$$

Entonces un sistema que está rotando podrá radiar clásicamente sólo si cambia el momento angular y el valor de la energía de la radiación es equidistante para transiciones rotacionales puras. De la ecuación (2.45)

$$\omega_J = \frac{E_{J-1} - E_J}{h}, \quad (3.12)$$

y el espectro se muestra en la Figura 3.1

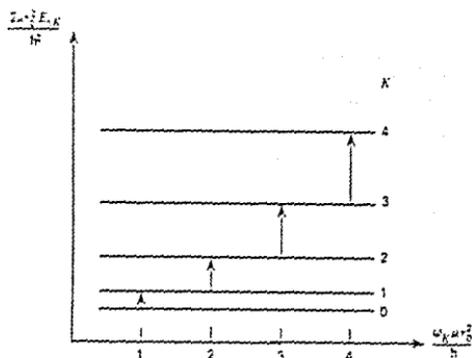


Figura 3.1. Diagrama para niveles de energía en transiciones rotacionales puras.

### 3.4 Transiciones vibracionales-rotacionales

Como las energías necesarias para excitar los modos vibracionales son mucho más grandes que los necesarios para excitar los rotacionales, es muy improbable tener un espectro vibracional puro porque los modos rotacionales son fácilmente excitados. Entonces, tendremos un espectro en donde los estados vibracionales y rotacionales cambian al mismo tiempo (Herzberg 1950).

Las reglas de selección en este caso son (Rybicki & Lightman 1979; Herzberg 1950; Field, Somerville & Dressler 1966):

$$1. d \neq 0, \quad (3.13)$$

$$2. \frac{d(d_e)}{dr} \neq 0, \quad (3.14)$$

$$3. \Delta v = \pm 1, \quad (3.15)$$

$$4. \begin{aligned} \Delta J &= \pm 1 \text{ para } \Lambda = 0 \\ \Delta J &= \pm 1, 0 \text{ para } \Lambda \neq 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

La primera de estas reglas es igual a la primera de las rotacionales puras. La segunda regla dice que es necesario que el momento dipolar cambie durante la transición vibracional.

El conjunto de transiciones entre dos niveles vibracionales con  $\Delta J = -2, -1, 0, +1, +2$  son llamados *ramas O, P, Q, R y S* respectivamente (Rybicki & Lightman 1979; Herzberg 1950). Por lo tanto, se habla de la línea  $O(J)$  para una transición  $\Delta J = -2$ , donde  $J$  se refiere al estado rotacional más bajo. También se habla de la banda  $v' \leftrightarrow v''$ , para una transición vibracional donde  $v'$  es el estado superior y el sentido de la flecha indica si hubo emisión o absorción durante la transición. La Figura 3.2 muestra las ramas  $P$  y  $R$  de la banda  $v' \leftrightarrow v''$ .

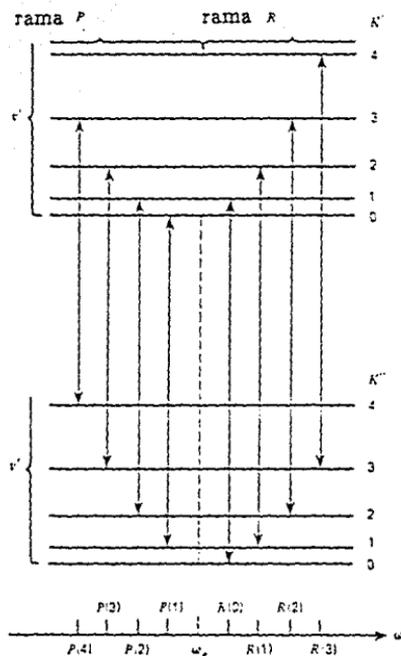


Figura 3.2 Esquema de las ramas P y R en transiciones vibracionales-rotacionales (Rybicki & Lightman 1979).

### 3.4 Transiciones electrónicas-vibracionales-rotacionales

Las reglas de selección que gobiernan las transiciones dipolares eléctricas en la molécula de hidrógeno, usando el esquema de acoplamiento b son (Rybicki & Lightman 1979; Herzberg 1950; Field, Somerville & Dressler 1966):

1.  $\Delta \Lambda = 0, \pm 1$ , (3.17)
2.  $\Delta J = 0, \pm 1$   $0 \nrightarrow 0$ , (3.18)
3.  $\Delta v = \text{cualquier entero positivo o negativo}$ , (3.19)
4.  $\Delta S = 0$ , (3.20)
5.  $\Delta N = 0, \pm 1$ ;  $\Delta N \neq 0$  para  $\Sigma \leftrightarrow \Sigma$ , (3.21)
6.  $g \leftrightarrow u$ ,  $g \nrightarrow g$ ,  $u \nrightarrow u$ , (3.22)
7.  $\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^+$ ,  $\Sigma^- \leftrightarrow \Sigma^-$ ,  $\Sigma^+ \nrightarrow \Sigma^-$ , (3.23)

$$8. s \leftrightarrow s, a \leftrightarrow a, s \nleftrightarrow a. \quad (3.24)$$

Las reglas que gobiernan las transiciones entre estados electrónicos están dadas por las ecuaciones (3.17), (3.20), (3.22) y (3.23). Las restantes nos dan información de cómo cambia la simetría de las funciones de onda durante una transición electrónica. Las transiciones electrónicas prohibidas por las reglas (1) y (6) pueden ser permitidas por dipolos magnéticos o cuadrupolos eléctricos, pero con probabilidades mucho más pequeñas. Las primeras transiciones permitidas, partiendo del estado base, son  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow B^1\Sigma_u^+$  (llamadas Bandas de Lyman) y  $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow C^1\Pi_u$  (llamadas Bandas de Werner). La diferencia de energía es del orden de 11.2 eV para las bandas de Lyman y de 12.3 eV para para las bandas de Werner. Morton & Dinerstein (1976) enlistaron las longitudes de onda y las intensidades para 420 líneas de estas bandas. Shull (1952), Ehrenson & Phillipson (1961) y Peek & Lassetre (1963), calcularon las integrales de otras transiciones electrónicas.

Como se puede observar de la ecuación (3.19), en una transición electrónica no hay reglas de selección para los números cuánticos vibracionales. Las probabilidades de transición vibracionales se determinan por sus funciones de onda, de acuerdo con el principio de Franck-Condon (Davydov 1965). Estas probabilidades han sido calculadas por Patch (1964) y Nicholls (1965).

Las reglas de selección rotacionales dependen de los esquemas de acoplamiento del momento angular. La reglas (2), (5) y (8) son resultado del acoplamiento b.

Para el caso del estado base del  $H_2$ , todas las transiciones rotacionales-vibracionales son "prohibidas" por el dipolo eléctrico, esto es debido a varias causas. Una de estas causas es que viola la regla (6). Otra es que las transiciones dipolares son prohibidas por las reglas de selección vibracional-rotacional (sección 3.3). Por otra parte el momento dipolar magnético también es cero para este estado, pero pueden efectuarse transiciones cuadrupolares eléctricas, ya que la molécula de hidrógeno tiene un momento cuadrupolar permanente. Entonces  $g \nleftrightarrow g$  es permitido y las reglas de selección para cuadrupolos eléctricos son,

$$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2,$$

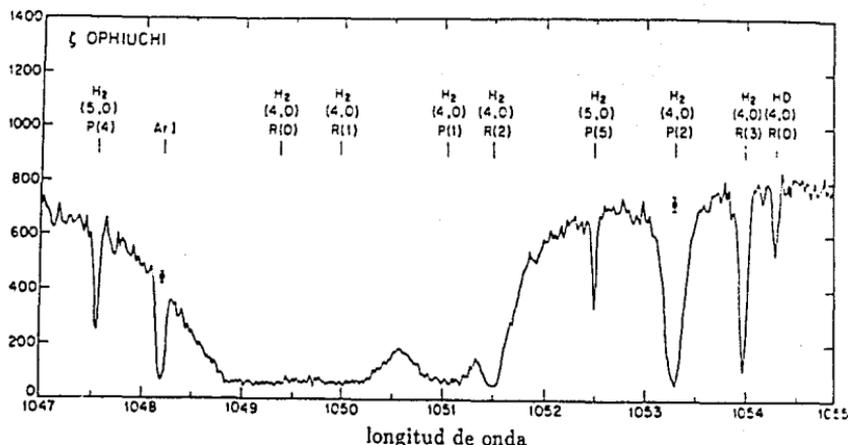
$$0 \nleftrightarrow 0, \frac{1}{2} \nleftrightarrow \frac{1}{2}, 1 \nleftrightarrow 0 \text{ para } S$$

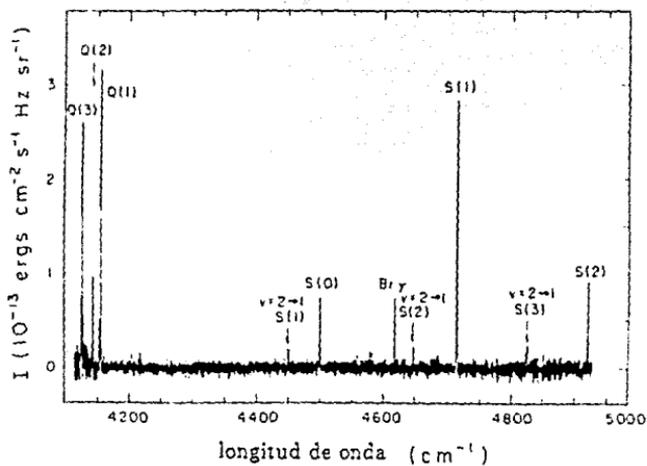
Así como se hizo en la sección anterior, ahora llamaremos ramas  $O, P, Q, R$  y  $S$  al conjunto de transiciones entre dos niveles vibracionales con  $\Delta J = -2, -1, 0, 1, 2$  respectivamente.

Las probabilidades de transiciones vibracionales cuadrupolares fueron calculadas por James & Coolidge (1938) y revisadas por Rank et al. (1964). Spitzer (1949) calculó las probabilidades de transiciones cuadrupolares rotacionales para niveles de energías vibracionales bajas. Turner et al (1977) calcularon para el estado electrónico base, las probabilidades de transiciones vibracionales y rotacionales.

### 3.5 Observaciones de $H_2$ en astrofísica

Como ya dijimos, la detección de la molécula de hidrógeno es difícil debido a que no tiene un momento dipolar permanente. Herzberg (1938) fué el primero en pensar en la posibilidad de detectar el espectro vibro-rotacional de la molécula de hidrógeno en regiones de alta densidad. Él pensó en detectar las líneas cuadrupolares,  $Q(1)$ ,  $S(0)$ ,  $S(1)$  y  $S(2)$  de la banda 3-0, en las atmósferas de los planetas. En 1960, Kiess, Corliss & Kiess fueron los primeros en observar estas líneas en el espectro de Júpiter. A la fecha, muchas otras líneas ya han sido detectadas. Las Figuras 3.3 y 3.4 muestran los espectros de algunas nubes interestelares en las que se han observado líneas en absorción y emisión del  $H_2$ .





**Figura 3.3** líneas de emisión infrarroja del  $H_2$  en la nube molecular de Orión producidas por las bandas de transición  $v = 2 \rightarrow 1$  y  $v = 1 \rightarrow 0$  (Scoville, Hall, Kleinmann & Ridgway 1982).

Finalmente, en la Tabla 3.1 presentamos una recopilación algunas de las líneas del  $H_2$  que han sido detectas en objetos de interés astronómico.

TABLA 3.1  
Transiciones Observadas del H<sub>2</sub>

$\lambda$	Banda	Línea	Objeto	Referencia
12.28 $\mu\text{m}$	0-0	S(2)	Nube molecular de Orión	1
-	1-0	S(0)	Objetos HH	2
2.122 $\mu\text{m}$	1-0	S(1)	HH-1,2,24,40,46,48,53,54,54B	2
			Nebulosas Planetarias	3, 4, 5
			Nubes Moleculares	5, 6, 7, 8
			Reg. Form. Estelar	9
			Vientos Estelares	6, 11
			Remanente de Supernova IC443	12
			Galaxia Seyfert NGC1068	13
			T Tauri	2
-	1-0	S(2)	Objetos HH	2
-	2-0	S(2)	$\alpha$ Ori	2
-	2-0	S(2)	$\alpha$ Ori, OCet, RAql	2
2.247 $\mu$	2-1	S(1)	Reg. Form. Estelar	2, 10
-	2-1	S(2)	Atmósfera estelar $\alpha$ Ori	14
-	2-1	S(3)	$\alpha$ Ori, OCet, RAql	14
8272.7 Å	3-0	S(0)	Júpiter	15, 16
8270 Å	3-0	S(0)	Urano y Neptuno	17
8150.7 Å	3-0	S(1)	Júpiter	15, 16
8046.4 Å	3-0	S(2)	Júpiter	15
8497.5 Å	3-0	Q(1)	Júpiter	15
6435.0 Å	4-0	S(0)	Júpiter, Urano	18
			Saturno	19, 20
6367.8 Å	4-0	S(1)	Júpiter, Urano	18
			Saturno	19, 20
6567.7 Å	4-0	Q(1)	20	

1. Beck 1979; 2. Elias 1980; 3. Beckwith 1960; 4. Beckwith 1982b; 5. Thronson 1981; 6. Bally et al 1982; 7. Beck et al 1982; 8. Beckwith et al 1982; 9. Fischer et al 1980; 10. Lane 1989; 11. Persson et al 1981; 12. Treffers 1979; 13. Thompson et al 1978; 14. Sinrad 1964; 15. Kiess et al. 1980; 16. Zabiskie 1962; 17. Kuiper 1949; 18. Spinrad et al. 1963; 19. Münch et al. 1963; 20. Spinrad 1964.

TABLA 3.1 (Continuación)  
 Transiciones Observadas del H<sub>2</sub>  
 Transiciones  $b^3\Sigma_u^+ - z^1\Sigma_g^+$

$\lambda$	Banda	Línea
1293.31	0-3	P5
1305.32	0-3	R8
1333.46	0-4	R0
1333.80	0-4	R1
1338.56	0-4	P2
1342.24	0-4	P3
1363.53	0-4	R8
1393.47	0-4	P10
1396.22	0-5	P1
1398.94	0-5	P2
1422.54	0-5	R8
1426.54	0-5	P7
1453.02	0-5	P10
1454.79	0-6	R0
1455.00	0-6	R1
1457.43	0-6	P1
1460.17	0-6	P2
1463.83	0-6	P3
1512.57	0-6	P10
1516.21	0-7	R0
1521.59	0-7	P2
1202.46	1-2	R3
1257.80	1-3	R3
1265.65	1-3	R5
1271.93	1-3	P5
1285.69	1-3	P7
1293.69	1-3	P8
1314.62	1-4	R3
1322.29	1-4	P5
1342.88	1-4	P7
1372.49	1-5	R3
1387.35	1-5	P5

$\lambda$	Banda	Línea
1431.01	1-6	R3
1434.03	1-6	R4
1438.03	1-6	R5
1442.67	1-6	R6
1446.13	1-6	P5
1459.34	1-6	P7
1467.10	1-6	P8
1467.68	1-7	R2
1469.07	1-7	P1
1469.57	1-7	R3
1492.36	1-7	R4
1496.02	1-7	R5
1499.58	1-7	P4
1500.45	1-7	R6
1504.79	1-7	P5
1517.34	1-7	P7
1524.67	1-7	P8
1547.35	1-8	R3
1562.41	1-8	P5
1556.84	1-8	R6
1603.24	1-9	R3
1617.93	1-9	P5
1367.59	2-5	R7
1532.07	2-8	R7
1577.38	2-9	P3
1583.28	2-9	R7
1299.80	3-4	P7
1434.03	3-7	R2
1439.08	3-7	R4
1442.74	3-7	R5
1367.59	2-5	R7

Observaciones en manchas solares;  
 Jordan 1978.

TABLA 3.1 (Continuación)  
 Transiciones Observadas del H<sub>2</sub>  
 Transiciones  $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$

$\lambda$	Banda	Línea	Objeto	Referencia
Transiciones $B^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$				
1063.37	0-3	R1	PHL 957	1
			PHL 957	2
1050.0	0-4	R1	OQ 172	3
			PHL 957	1, 2
1037.2	0-5	R1	OQ 172	3
			PHL 957	1, 2
1025.0	0-6	R1	OQ 172	3
			PHL 957	2
1013.4	0-7	R1	OQ 172	3
			PHL 957	2
1002.5	0-8	R1	OQ 172	3
982.0	0-10	R1	OQ 172	3
972.6	0-11	R1	OQ 172	3
Transiciones $C^1\Pi_u^+ - X^1\Sigma_g^+$				
-	0-0	Q1	4C05.34	4
956.1	0-1	Q1	OQ 172	3
			PHL 957	2
966.0	0-2	R1	OQ 172	3
946.8	0-3	R1	OQ 172	3
			PHL 957	2

1. Lowrance et al 1972; 2. Bahcall et al 1973; 3. Levshakov 1979; 4. Lynds 1971.

## Capítulo 4

# Formación y destrucción del hidrógeno molecular en el medio interestelar

En este capítulo discutimos los principales procesos en la formación y la destrucción del  $H_2$ , en condiciones interestelares.

### A) Formación de moléculas

#### 4.1 Formación en la fase gaseosa

El proceso más simple de formación de moléculas es el de recombinación radiativa directa en la fase gaseosa. Este proceso consiste en la interacción, por colisiones, de los átomos que constituyen la molécula en cuestión. Para la formación de hidrógeno molecular este tipo de reacción es de la forma



El primer producto de esta reacción, el  $H_2^*$ , es una "cuasi-molécula" de hidrógeno fuertemente excitada y tiene una energía de excitación equivalente a la energía de amarre del  $H_2$  ( $D_e = 4.48$  eV). Su tiempo de vida media es muy corto y está definido por el tiempo que dura la colisión de los átomos ( $\sim 10^{-13}$  seg). Para que se efectúe la segunda parte de la reacción, el sistema  $H_2^*$  tiene que liberar la energía de amarre en un tiempo menor al que dura la colisión. Para moléculas diatómicas homonucleares, como el  $H_2$ , las transiciones radiativas dipolares (que son las más rápidas) son muy improbables debido a que estas moléculas no tienen momento dipolar permanente. Esto impide la emisión de radiación y hace que la recombinación radiativa sea un proceso poco eficiente (Duley & Williams 1984). Para hacer eficiente este proceso es necesario que alguno de los átomos esté ionizado, o bien que la reacción sea de 3 cuerpos (el tercero se lleva la energía de amarre).

En la Tabla 4.1 se presenta una recopilación de las reacciones más eficientes en la formación de hidrógeno molecular en la fase gaseosa (Palla, Salpeter & Stahler 1983).

Las tasas de formación de la Tabla 4.1 no explican las abundancias del H<sub>2</sub> observadas en el medio interestelar (Field, Somerville & Dressler 1966) por lo cual se ha propuesto otro mecanismo de formación para esta molécula; el de la formación del H<sub>2</sub> en superficies de granos de polvo. Los granos simplemente actúan como agentes catalíticos que permiten la reacción, pero no participan en ella.

TABLA 4.1  
Reacciones mas importantes en la formación del H<sub>2</sub> en la fase gaseosa  
(Palla, Salpeter & Stahler 1983).

Reacción	Tasa
$H^+ + e^- \xrightarrow{k_1} H + h\nu$	$k_1 = 1.88 \times 10^{-10} T^{-0.644} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H + e^- \xrightarrow{k_2} H^- + h\nu$	$k_2 = 1.83 \times 10^{-18} T \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H + H^- \xrightarrow{k_3} H_2 + e^-$	$k_3 = 1.35 \times 10^{-9} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H + H + H \xrightarrow{k_4} H_2 + H$	$k_4 = 5.5 \times 10^{-29} T^{-1} \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$
$H + H + H \xrightarrow{k_5} H_2 + H$	$k_5 = 6.5 \times 10^{-7} T^{-1/2} \exp(-52000/T) \times [1 - \exp(-6000/T)] \text{cm}^6 \text{s}^{-1}$
$H + H + H_2 \xrightarrow{k_6} H_2 + H_2$	$k_6 = 1/8 k_4$
$H + H + H_2 \xleftarrow{k_7} H_2 + H_2$	$k_7 = 1/8 k_5$
$H + e^- \xrightarrow{k_8} H^+ + e^- + e^-$	$k_8 = 5.8 \times 10^{-11} T^{1/2} \exp(-158000/T) \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$
$H + H \xrightarrow{k_9} H^+ + e^- + H$	$k_9 = 1.7 \times 10^{-4} k_8$

## 4.2 Formación sobre granos de polvo

### 4.2.1 Procesos físicos en la superficie de granos

La Figura 4.1 muestra un esquema sencillo de los procesos físicos que ocurren en la superficie de granos y dan lugar a la formación de moléculas (Tielens & Allamandola 1987). Los átomos y las moléculas de la fase gaseosa se condensan en la superficie de los granos. La partículas del gas absorbido pueden moverse y reaccionar con otros compuestos químicos sobre la misma superficie del grano. El producto de la reacción puede permanecer sobre la superficie dando lugar al manto del grano o bien puede ser eyectado nuevamente a la fase gaseosa. Una discusión detallada, de donde se ha obtenido la mayor parte de la información de esta sección, puede verse en Hollenbach & Salpeter (1970), Watson (1976a) y Tielens & Allamandola (1987).

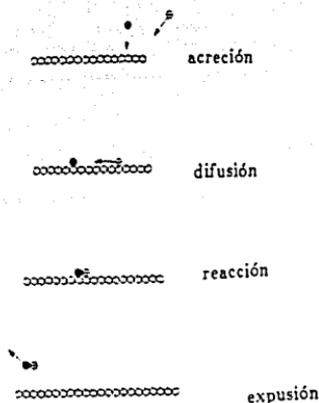


Figura 4.1 Procesos sobre la superficie de granos. Acreción, difusión y reacción sobre una superficie de grano. Posiblemente, el producto de la reacción es eyectado nuevamente al gas (Tielens & Allamandola 1957).

El límite superior para la tasa de reacciones sobre la superficie del grano lo da la frecuencia con la cual las partículas del gas golpean a un grano de polvo. Un átomo o molécula golpea a un grano en un tiempo promedio que está definido por el camino libre medio dividido entre la velocidad media de las partículas. Dada la sección recta del grano,  $\sigma_g$ , y la abundancia de granos de polvo, definimos la sección recta por átomo de hidrógeno como (Watson 1976a),  $\langle \sigma \rangle = \langle n_g \sigma_g \rangle / \langle n_H \rangle$ . Si consideramos una distribución maxwelliana de velocidades, encontramos que un átomo o molécula de peso atómico  $A$ , en un gas a temperatura  $T$  y con densidad  $n$ , golpea un grano en un tiempo  $t_g$ , donde:

$$t_g = \frac{1}{\langle \sigma \rangle \langle v \rangle n} \sim \frac{10^9}{n \sqrt{(T/100.4)}} \text{ años.} \quad (4.2)$$

La ecuación (4.2) está calculada suponiendo que el polvo y las partículas de gas son neutras (aproximación de esferas rígidas).

Para que ocurran reacciones en la superficie del polvo es necesario que los átomos del gas se adhieran al grano cuando lo golpean. Para que el átomo absorbido no sea eyectado antes de que se adhiera otro, la temperatura del grano tiene que ser menor a aquella en la que se produce la evaporación térmica. Otro factor importante es la movilidad que los átomos adsorbidos tengan sobre la superficie del grano. Después de producida la molécula, si la reacción es exotérmica, el grano se calienta y la nueva molécula es lanzada nuevamente al medio interestelar.

#### 4.2.2 Las superficies de los granos y las energías de adsorción

El grano puede considerarse como una malla cristalina y los átomos o moléculas que se adhieren a ella podemos verlos como defectos o impurezas del cristal. Un ejemplo de esto, ilustrado en la Figura 4.2, puede ser la presencia del  $H_2O$  sobre un grano de silicato.

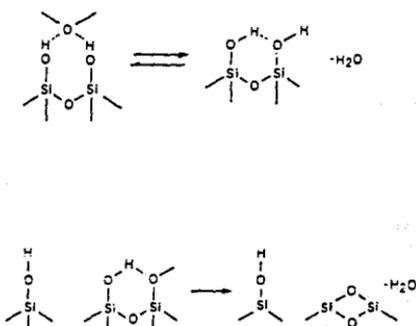


Figura 4.2 Algunas de las posibles estructuras de las superficies de silicatos. Grupos de silanol (Si-OH) y siloxano (Si-O-Si) forman ligaduras con el  $H_2O$  (Tielens y Allamandola 1987).

Dada la composición de la superficie de granos es posible estimar el tipo de energía de ligadura que permitirá al átomo o la molécula ligarse a la superficie del grano. Las ligaduras se clasifican en dos tipos: químicas y físicas (Tielens & Allamandola 1987; Watson 1976a). En la adsorción química, la interacción puede crear ligaduras con energías en el rango  $\sim 0.5 - 5$  eV. En esta interacción puede haber un intercambio de carga entre la superficie y el átomo adsorbido, formándose una ligadura iónica. También se puede formar una ligadura covalente; en ésta los electrones responsables de la ligadura se mueven en orbitales entre la superficie y el átomo adsorbido (ver por ejemplo Einstein et al 1980). En la adsorción física la interacción es debida a fuerzas de Van der Waals - London ó dipolares eléctricas, y la energía de interacción es relativamente baja ( $< 0.5$  eV). Aquí no hay intercambio de carga entre la superficie y la partícula adsorbida. La fuerza atractiva es debida solamente a la interacción del dipolo (instantáneo) de la partícula adsorbida y las moléculas superficiales del grano (Kittel 1976).

La Figura 4.3 muestra un diagrama simplificado de las energías de adsorción químicas y físicas. La fuerza de adsorción física tiene un rango mayor que la fuerza química, entonces las partículas adheridas al grano son primero adsorbidas por el potencial físico. Sin embargo, dada la mayor energía de las ligaduras químicas, los átomos que migran sobre la superficie son fácilmente atrapados en los sitios de ligaduras químicas.

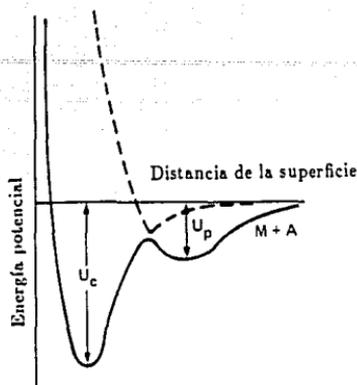


Figura 4.3 Diagrama de energías potenciales para la adsorción de un átomo sobre una superficie. Se muestran dos pozos de adsorción, el poro de adsorción física con energía de ligadura,  $U_p$  y el de adsorción química con energía de ligadura,  $U_c$  (Tierens & Allamandola 1987).

La energía de ligadura química en silicatos,  $U_c$ , tiene un valor aproximado de 2 eV, que corresponde a una temperatura de  $\sim 2.3 \times 10^4$  K y la energía de ligadura física,  $U_p$  es de 0.09 eV ( $\sim 1000$  K) (Gelb & Kim 1971, Wood & Wise 1962). El número de sitios activos con ligaduras químicas o físicas sobre una superficie de silicatos es de aproximadamente de  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Un átomo que llega a la superficie del grano ocupará preferencialmente el sitio activo de mayor energía (un sitio químico), por lo tanto, un átomo de hidrógeno queda ligado físicamente a la superficie sólo cuando el sitio activo químico está ocupado.

Para el caso de superficies de grafito, al igual que en el caso de los silicatos, la energía de ligadura química es de aproximadamente 2 eV ( $\sim 2.3 \times 10^4$  K) y también tiene aproximadamente  $10^{15} \text{ cm}^{-2}$  sitios activos de adsorción química (Tielens & Allamandola 1987). Para el caso de granos con mantos de hielo, la energía de adsorción física para el átomo de hidrógeno es de aprox. 0.03 K (350 K).

Todos estos ejemplos muestran las energías involucradas en granos de interés astronómico e indican que estas energías son menores a la energía de amarre del  $\text{H}_2$ . El tiempo de residencia sobre la superficie de un grano de polvo se puede estimar como

$$\tau = \tau_0 \exp(E_b/kT), \quad (4.3)$$

donde  $E_b$  es el valor de la energía de ligadura,  $\tau_0$  es el tiempo de oscilación perpendicular a la superficie de la partícula adsorbida y  $T$  es la temperatura del sistema (Frenkel 1924).

La partícula adsorbida pierde un grado de libertad traslacional por un grado de libertad vibracional en la dirección perpendicular a la superficie. Para un gas monoatómico el cual se mueve sobre la superficie,

$$\tau_0 = (h/kT) f_r, \quad (4.4)$$

donde  $f_r$  es la función de partición vibracional de la molécula adsorbida (de Boer 1968). A altas temperaturas se excita la vibración perpendicular a la superficie y  $f_r = kT/h\nu_z$ , donde  $\nu_z$  es la frecuencia de vibración perpendicular a la superficie, entonces  $\tau_o = \nu_z^{-1}$ .

Supongamos que la frecuencia de vibración perpendicular a la superficie del grano es igual a la paralela, la cual para un potencial armónico simétrico está dada por (Watson 1976a; Tielens & Allamandola 1987)

$$\nu_z = [(2N_s E_b)/\pi^2 m]^{1/2}, \quad (4.5)$$

donde  $N_s$  es el número de sitios activos a los cuales puede ser ligado un átomo por unidad de área y  $m$  es la masa del átomo. Entonces el tiempo de oscilación perpendicular de un átomo de hidrógeno sobre la superficie de un grano de polvo, suponiendo adsorción química de 2 eV ( $2.3 \times 10^4$  K) y  $N_s \approx (1/7) \text{Å}^{-2}$ , es aproximadamente de  $\tau_o = 5 \times 10^{-14}$  seg.

A bajas temperaturas, el modo de vibración perpendicular a la superficie no se excita y por lo tanto la función de partición vibracional en  $f_z = 1$ . Entonces  $\tau_o = h/kT \approx 5 \times 10^{-12}$  seg a una temperatura de 10 K. Cuando la partícula adsorbida no se mueve sobre la superficie o ha perdido un grado de libertad rotacional, entonces la ecuación (4.4) se multiplica por las funciones de partición de los grados de libertad de movimiento que ha perdido la molécula. Para el caso en el que la partícula ha perdido todos sus grados de libertad traslacionales, la expresión para  $\tau_o$  será (de Boer 1968)

$$\tau_o = (h/kT) f_x f_y f_z (N_s h^2 / 2\pi m k T), \quad (4.6)$$

donde  $f_x$ ,  $f_y$  son las funciones de partición a lo largo de la superficie. El último factor en esta expresión toma en cuenta el número de formas posibles de distribución de las partículas adsorbidas sobre los sitios activos de la superficie.

### 4.2.3 Coeficiente de Pegamiento

Una partícula que se aproxima a un grano experimenta una fuerza atractiva debido a la polarización de las moléculas del grano. La probabilidad de que se pegue, o no, depende de dos factores: (1) la magnitud de la energía cinética y (2) la eficiencia con la cual el exceso de energía cinética se puede transferir a los átomos de la superficie del grano cercanos a la partícula adsorbida. Hollenbach & Salpeter (1970), hicieron un estudio clásico sobre el pegamiento de átomos de hidrógeno en superficies de hielo. Para realizar sus cálculos suponen la interacción del átomo de hidrógeno de masa  $m$  y un átomo de masa  $M$  sobre una superficie. El átomo de masa  $M$  se encuentra pegado a la superficie y oscila sobre ésta a la frecuencia de Debye  $\omega_D$ . Definiendo el inverso de la escala de tiempo para la colisión de la forma

$$\omega = \frac{v}{2b} = \left[ \frac{(E_t + E_b)}{2mb^2} \right]^{1/2} \quad (4.7)$$

donde  $v$  es la velocidad de la colisión,  $b$  es la longitud en donde ocurre de la interacción repulsiva ( $\sim 0.3 - 0.4 \text{ \AA}$ ),  $E_t$  es la energía cinética y  $E_b$  es la energía de ligadura discutida en las sección anterior. A bajas temperaturas,  $\omega$  es del orden de  $3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$  para adsorción química y  $\sim 6 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$  para adsorción física (Tielens & Allamandola 1987). Entonces la energía transferida durante la colisión es (Hollenbach & Salpeter 1970).

$$\Delta E = 4(m/M)(E_t + E_b); \text{ para } \omega \gg \omega_D, \quad (4.8)$$

$$\Delta E = (m/M)(E_t + E_b); \text{ para } \omega = \omega_D, \quad (4.9)$$

$$\Delta E = 4\left(\frac{m\omega^3}{M\omega_D^3}\right)(E_t + E_b); \text{ para } \omega \ll \omega_D. \quad (4.10)$$

La eficiencia de recombinación  $\Gamma$  se define como

$$\Gamma \equiv \frac{E_c}{kT}, \quad (4.11)$$

donde  $T$  es la temperatura del gas y  $E_c$  es la energía característica total que fué transferida a la superficie y puede ser escrita como (Hollenbach & Salpeter 1970)

$$E_c = E_b \Delta E. \quad (4.12)$$

Entonces el coeficiente de pegamiento para una partícula con una distribución maxwelliana a temperatura  $T$ , es aproximado por (Hollenbach & Salpeter 1970)

$$S = \frac{(\Gamma^2 + 0.8\Gamma^3)}{(1 + 2.4\Gamma + \Gamma^2 + 0.8\Gamma^3)}. \quad (4.13)$$

De lo anterior tenemos que el coeficiente pegamiento es relativamente alto cuando la energía cinética del átomo acretado es mucho menor que la energía de adsorción o cuando el átomo acretado es mucho más pesado que el átomo de la superficie del grano. Por otra parte para superficies de grano "duras" ( $\omega_D \gg \omega$ ), el coeficiente de pegamiento es mayor que para superficies de granos blandas.

#### 4.2.4 Tasa de formación de $H_2$ sobre granos de polvo

A temperaturas del grano mayores que una temperatura crítica ( $T_{cr} \approx 20\text{K}$ ) la producción de moléculas es muy baja como consecuencia de que los átomos adheridos pueden evaporarse antes de combinarse para formar moléculas. Otro factor importante que produce la evaporación prematura de estos átomos es la existencia de impurezas en la superficie del grano. Estas impurezas pueden formar ligaduras químicas con los

átomos de la superficie dando lugar a ligaduras físicas (más débiles) entre los átomos adsorbidos y los del grano (Hollenbach & Salpeter 1971).

La tasa de evaporación por átomo adsorbido es del orden de  $\nu_o \exp(-D_e/kT_{gr})$ , donde  $\nu_o$  es la frecuencia de vibración del átomo adsorbido y  $T_{gr}$  es la temperatura del grano. Por otra parte, la partícula adsorbida encuentra impurezas, con una frecuencia del orden de  $\nu_o(N_i/N_t)$  (Hollenbach & McKee 1979). De lo anterior se tiene que la fracción de átomos que no se evaporan antes de combinarse en una molécula es del orden de

$$f_a = \frac{1}{1 + (N_i/N_t)} \exp(-D_e/kT_{gr}). \quad (4.14)$$

Entonces la tasa a la cual los átomos de hidrógeno se recombinan sobre la superficie de granos interestelares para formar moléculas  $H_2$  puede escribirse como (Hollenbach & McKee 1979)

$$R_f = \alpha' n_H n_{gr} = \alpha n_H n_t \quad (4.15)$$

donde  $n_H$  es la densidad de átomos de hidrógeno en la fase gaseosa,  $n_{gr}$  es la densidad de granos de polvo,  $n_t$  es la densidad total de átomos en la fase gaseosa y  $\alpha$  es el coeficiente de la tasa de formación. Este coeficiente está dado por

$$\alpha = \frac{n_{gr} \sigma_{gr}}{n_t} < S v > f_a = \frac{n_{gr}}{n_t} \alpha', \quad (4.16)$$

$$< S v > \approx \frac{v_t}{1 + 0.4(T_2 + T_{gr2})^{0.5} + 0.2T_2 + 0.08T_2^2}, \quad (4.17)$$

donde  $\sigma_{gr}$  es la sección recta del grano,  $T_2$  y  $T_{gr2}$  son las temperaturas del gas y del grano normalizadas a 100 K y  $v_t$  es la velocidad térmica de las partículas del gas. Por lo tanto (Jura 1975a)

$$\alpha = 3 \times 10^{-17} \frac{T_2^{1/2} f_a}{1 + 0.4(T_2 + T_{gr2})^{1/2} + 0.2T_2 + 0.08T_2^2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (4.18)$$

## B) Disociación de Moléculas

La destrucción de moléculas puede ocurrir mediante colisiones o por la absorción de fotones. Al primer caso se le denomina "disociación colisional" y al segundo "fotodisociación".

### 4.3 Fotodisociación

Existen diferentes procesos de fotodisociación, las Figuras 4.4(a) y 4.4(b) muestran dos de estos mecanismos con un diagrama de las curvas de energía potencial (Kirby 1990).

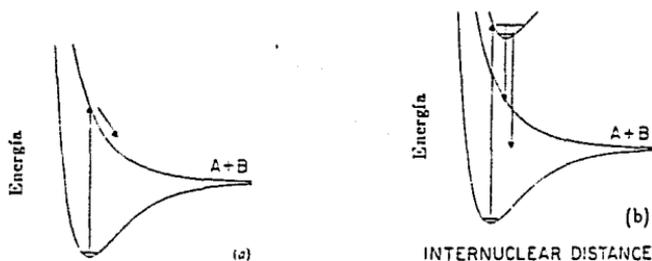


Figura 4.4 Las curvas de potencial para la molécula AB muestran dos procesos de fotodisociación (a) Fotodisociación directa; (b) Fotodisociación indirecta (Kirby 1990).

El proceso más simple es el de fotodisociación directa (Figura 4.4a). Este proceso se da mediante la absorción de un fotón con energía igual a la energía de algún "estado repulsivo" y el rango de energías de los fotones disociantes está restringido a energías de las líneas de transición correspondientes. Esta es la forma predominante de fotodisociación de algunas moléculas tales como  $\text{CH}^+$ ,  $\text{OH}^+$  y  $\text{NH}$  (Kirby & van Dishoeck 1978), pero no es muy efectivo para el caso del  $\text{H}_2$  porque las transiciones directas a niveles disociantes son muy poco probables en esta molécula.

El mecanismo de fotodisociación indirecta tiene dos pasos. Primero se absorben fotones que llevan a la molécula a alguno de los niveles vibracionales de algún estado electrónico excitado. Después, la disociación de la molécula puede producirse mediante diferentes mecanismos dependiendo de la forma de las curvas de energía potencial, por ejemplo, mediante alguna cascada que lleve a un nivel repulsivo (Kirby & van Dishoeck 1978). En la molécula de hidrógeno, la desexcitación puede producirse con la transición espontánea del nivel excitado a algún estado inestable de la molécula (Watson 1976) produciendo así la disociación (ver figura 4.4b).

La probabilidad de que la molécula se disocie mediante la fotodisociación in-

directa depende de una serie de eventos complicados. Básicamente, esta probabilidad debe calcularse a partir de la probabilidad de transición del estado base a un estado electrónico excitado y de la probabilidad de que una vez excitada la molécula decaiga a un estado no ligado mediante la emisión espontánea de fotones. De manera que la tasa de fotodisociación de moléculas que se encuentran inicialmente en el nivel  $J$  del estado vibracional mas bajo del estado electrónico base es (ver Spitzer 1978)

$$R_{Jf} = \sum_m k_m \beta_{J,m}, \quad (4.19)$$

donde  $k_m$  es la probabilidad de que una molécula en el estado (electrónico-vibracional-rotacional) excitado  $m$  decaiga por cascada a un nivel no ligado y  $\beta_{J,m}$  es la probabilidad por segundo de la transición del estado  $J$ , inicial, al estado  $m$ , final. Esta probabilidad depende de la intensidad del campo radiativo en las longitudes de onda que producen las transiciones. Por lo cual, para calcularlo, se debe especificar el campo radiativo.

Stecher & Williams (1967), obtuvieron que el modo de disociación dominante es el debido a excitaciones al estado  $^2\Sigma_g^-$  (banda de Lyman) seguidas de un decaimiento radiativo a un estado nuclear libre de el estado base  $^1\Sigma_g$ . Cálculos detallados muestran que el 29.9% de las excitaciones a niveles  $^1\Sigma_u^-$  producen disociación y que de las excitaciones a niveles  $^1\Sigma_u$  sólo una fracción de  $8 \times 10^{-7}$  disocia a la molécula (Dalgarno & Stephens 1970). Por otra parte Jura (1974) obtiene que la tasa de fotodisociación producida por el campo de radiación interestelar, sin opacidad, en todas las bandas Lyman, es de  $2 \times 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ . La tasa disminuye cuando consideramos la opacidad de las nubes y para calcular las tasas efectivas en el interior de regiones interestelares se tiene que resolver la transferencia de fotones.

#### 4.4 Disociación por colisiones

El proceso de la disociación colisional es similar al descrito anteriormente, con la diferencia de que las excitaciones y desexcitaciones de los niveles de energía son producidas por colisiones con átomos o moléculas de alta velocidad. Con este proceso, a diferencia de la fotodisociación pueden producirse disociaciones directas (ver figura 4.4b) ya que para excitaciones colisionales no existe ningún tipo de restricciones en las transiciones entre niveles. La disociación por colisiones es un mecanismo de enfriamiento en vientos y flujos asociados a la formación estelar (Shull & Beckwith 1982).

La tasa de disociación colisional está dada por

$$\begin{aligned} R_d &= \langle \sigma_1 v \rangle n_H n_{H_2} + \langle \sigma_2 v \rangle n_{H_2}^2 \\ &\equiv k_1 n_H n_{H_2} + k_2 n_{H_2}^2, \end{aligned} \quad (4.20)$$

donde  $\sigma_1$  y  $\sigma_2$  son las secciones rectas para las colisiones átomo-molécula y molécula-

molécula, respectivamente, y  $v$  es la velocidad de las partículas durante la colisión. Los coeficientes de disociación  $k_1$  y  $k_2$  están dados por (ver por ejemplo Lang 1980)

$$k_1 = \langle \sigma_i v \rangle = \int_{D_c}^{\infty} \sigma v f(v) dv, \quad (4.21)$$

y pueden ser aproximados con ajustes logarítmicos como (Lepp & Shull 1983),

$$\log k_i(n, T) = \log k_{i,h} - \frac{\log(k_{i,h}/k_{i,l})}{1 + n_l/n_{i,cr}} \quad (4.22)$$

donde  $D_c$  es el potencial de disociación,  $f(v)$  es la distribución maxwelliana de velocidades,  $i = 1$  denota las colisiones H-H<sub>2</sub>,  $i = 2$  denota las colisiones H<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>, los subíndices  $h$  y  $l$  se refieren a los valores límites a altas y bajas densidades de poblaciones de los niveles vibracionales ( $v=0-14$ ) de H<sub>2</sub>, respectivamente, y  $n_{cr}$  es la densidad de referencia que separa a estos dos límites.

Para las colisiones H-H<sub>2</sub>, los valores de  $n_{1,cr}$ ,  $k_{1,h}$  y  $k_{1,l}$  están dados por (véase Lepp & Shull 1983 y las referencias que ahí se incluyen)

$$k_{1,h} = 3.52 \times 10^{-9} \exp(-4.39 \times 10^4/T) \quad (4.23)$$

$$k_{1,l} = 6.11 \times 10^{-14} \exp(-2.93 \times 10^4/T); \quad T > 7390\text{K} \\ = 2.67 \times 10^{-15} \exp[-(6750/T)^2]; \quad T < 7390\text{K}, \quad (4.24)$$

$$\log n_{1,cr} = 4.00 - 0.416y - 0.327y^2, \quad (4.25)$$

con  $y = \log(T/10^4 \text{ K})$ . Mientras que para las colisiones H<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> se tienen los siguientes valores,

$$k_{2,n} = 5.48 \times 10^{-9} \exp(-5.30 \times 10^4/T) \quad (4.26)$$

$$k_{2,l} = 5.22 \times 10^{-14} \exp(-3.22 \times 10^4/T); \quad T > 7291\text{K} \\ = 3.17 \times 10^{-15} \exp[-(4060/T) - (7500/T)^2]; \quad T < 7291\text{K}, \quad (4.27)$$

$$\log n_{2,cr} = 4.13 - 0.968y - 0.119y^2. \quad (4.28)$$

En el capítulo siguiente se usa la tasa de disociación dada por la ecuación (4.20) para hacer los cálculos de abundancia del H<sub>2</sub> y del enfriamiento producido cuando esta molécula se disocia.

# Capítulo 5

## Enfriamiento producido por el hidrógeno molecular

En este capítulo se hace una breve revisión del enfriamiento producido por la molécula de hidrógeno, el cual depende de la abundancia del  $H_2$  y de la temperatura del gas. Como se verá, el proceso más importante es el enfriamiento radiativo debido a la excitación colisional del  $H_2$ . También incluimos, por completez, el enfriamiento asociado a la formación y disociación colisional del  $H_2$ .

### 5.1 Abundancia del $H_2$

En este capítulo, consideraremos solamente nubes constituidas por puro hidrógeno. Esto es, no se incluyen los efectos debidos a otros elementos químicos, aunque sí consideramos la existencia de granos de polvo. Nuestro interés está en encontrar la abundancia molecular en la nube y el enfriamiento que esta produce.

Para encontrar la abundancia del  $H_2$ , debido a que la tasa de formación en la fase gaseosa es despreciable se considera que todas las moléculas son formadas en los granos de polvo. Por otra parte, no se toman en cuenta los efectos de la radiación electromagnética, por lo que no se considera la fotodisociación ni el transporte de la radiación producida por las mismas moléculas de  $H_2$ . Es decir, se supone que las moléculas se disocian mediante colisiones. La ecuación que gobierna el comportamiento de la abundancia del  $H_2$  como función del tiempo es de la forma

$$\frac{dn_{H_2}}{dt} = R_f - R_d. \quad (5.1)$$

donde  $R_f$  y  $R_d$  son las tasas de formación y disociación de la molécula. La tasa de formación sobre granos de polvo (en unidades cgs) está dada por (ver capítulo 4)

$$R_f \approx 3 \times 10^{-17} \frac{T_2^{1/2}}{1 + 0.4T_2^{1/2} + 0.2T_2 + 0.08T_2^2} n_H n_t, \quad (5.2)$$

donde  $T_2$  es la temperatura normalizada a  $10^2$  K,  $n_H$  es la densidad de átomos de

hidrógeno y  $n_t$  es la densidad total del gas. La densidad total es la suma de átomos de hidrógeno que se encuentran tanto en forma atómica como molecular

$$n_t = n_H + 2n_{H_2}. \quad (5.3)$$

Por otra parte la tasa de disociación colisional esta dada por (ver capítulo 4),

$$R_d = k_1 n_H n_{H_2} + k_2 n_{H_2}^2, \quad (5.4)$$

Definiendo  $x$  como la densidad de moléculas de hidrógeno normalizada a la densidad total de átomos,

$$x = \frac{n_{H_2}}{n_t}, \quad (5.5)$$

y tomando el coeficiente de formación

$$\alpha = 3 \times 10^{-17} \frac{T_2^{1/2}}{(1 + 0.4T_2^{1/2} + 0.2T_2 + 0.08T_2^2)}, \quad (5.6)$$

tenemos que, sustituyendo (5.5) y (5.6) en (5.2) y (5.4), podemos escribir las tasas "normalizadas" de formación y disociación colisional como

$$\frac{R_f}{n_t^2} = \alpha(1 - 2x), \quad (5.7)$$

$$\frac{R_d}{n_t^2} = k_1(1 - 2x)x + k_2x^2, \quad (5.8)$$

En condiciones de equilibrio, la tasa de formación de moléculas se compensa con la tasa de destrucción  $R_f = R_d$ . Por lo tanto la abundancia en equilibrio de  $H_2$  queda definida por una ecuación cuadrática y se tiene que

$$x = \frac{-(k_1 + 2\alpha) \pm [(k_1 + 2\alpha)^2 + 4(k_2 - 2k_1)\alpha]^{1/2}}{2(k_2 - 2k_1)} \quad (5.9)$$

donde queda explícito que los valores de equilibrio son función de la densidad y la temperatura,  $x = x(n, T)$ . La ecuación (5.9), así como las relacionadas con el enfriamiento, se resolvieron usando el paquete comercial *Mathematica* (Wolfram 1988; Maeder 1990). En el Apéndice se da un ejemplo de los programas escritos para *Mathematica*, que fueron usados para obtener las soluciones. El signo menos de la ecuación (5.9) arroja resultados negativos para los valores de  $x$  por lo tanto para los cálculos posteriores se tomó en cuenta únicamente el signo positivo de esta ecuación. En la Figura 5.1 se muestra la dependencia de  $x$  en  $n_T$  y  $T$ . Como puede apreciarse, la dependencia con la densidad total de la nube es muy pequeña.

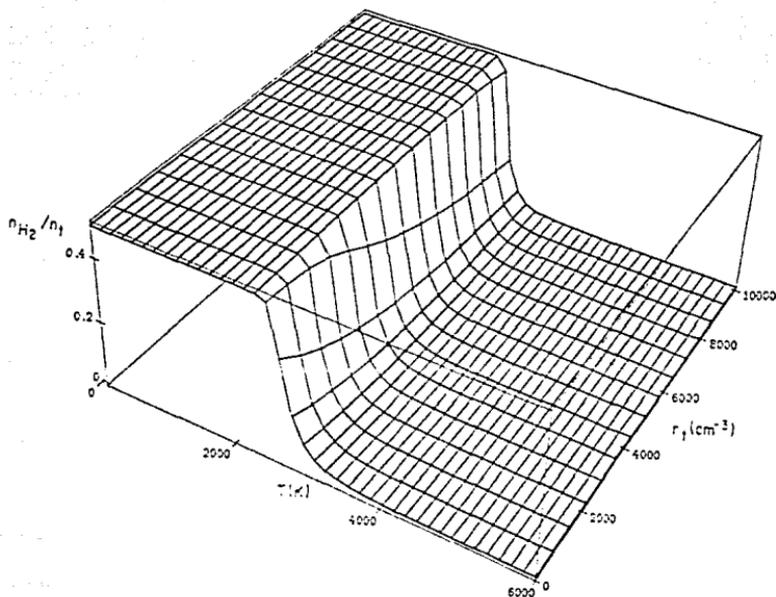


Figura 5.1 Abundancia relativa de la molécula de hidrógeno, en equilibrio, como función de  $T$  y  $n_T$ , en una nube opaca, sin radiación disociante.

De la figura se aprecia que a  $T = 2000$  K, todo el gas se convierte en molecular,  $x = 0.5$ . Esto es debido a que a dichas temperaturas la disociación no es importante porque  $k_1$  y  $k_2$  son casi cero.

## 5.2 Abundancia del $H_2$ en función del tiempo

Si quitamos la suposición de equilibrio, podemos estimar la evolución de la abundancia de  $H_2$  como función del tiempo. Normalizando a la ecuación diferencial que rige la abundancia de  $H_2$  como función del tiempo, tenemos

$$\frac{dx}{dt} = \frac{R_f}{n_t} - \frac{R_d}{n_t} \quad (5.10)$$

La que puede integrarse como

$$\int \frac{dx}{\alpha + \beta x + \gamma x^2} = \int n_t dt, \quad (5.11)$$

cuya solución es,

$$x(t) = \frac{(\beta^2 - z^2)(w - 1)}{2\gamma [\beta(1 - w) + z(w + 1)]}, \quad (5.12)$$

donde,

$$\beta = -(2\alpha + k_1), \quad (5.13)$$

$$\gamma = 2k_1 - k_2, \quad (5.14)$$

$$z = (\beta^2 - 4\alpha\gamma)^{1/2}, \quad (5.15)$$

y

$$w = \exp(n_t z t). \quad (5.16)$$

Para temperaturas abajo de 2000 K, cuando  $R_d \rightarrow 0$ , la ecuación integral se simplifica a

$$\int \frac{dx}{(1 - 2x)} = \int \alpha n_t dt, \quad (5.17)$$

que usando como condición inicial  $x(0) = 0$ , nos da

$$x(t) = \frac{1 - \exp(-2\alpha n_t t)}{2}. \quad (5.18)$$

Como se puede ver de las ecuaciones (5.12) y (5.18), la abundancia se comporta de manera exponencial y para  $t \rightarrow \infty$  (equilibrio) se recupera la solución de la ecuación (5.9). Los resultados se muestran en las figuras 5.2 y 5.3.

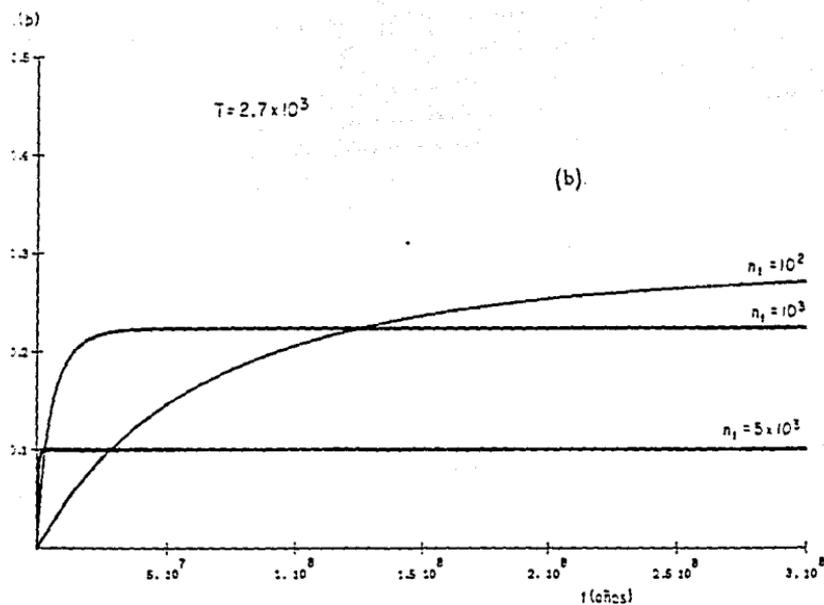
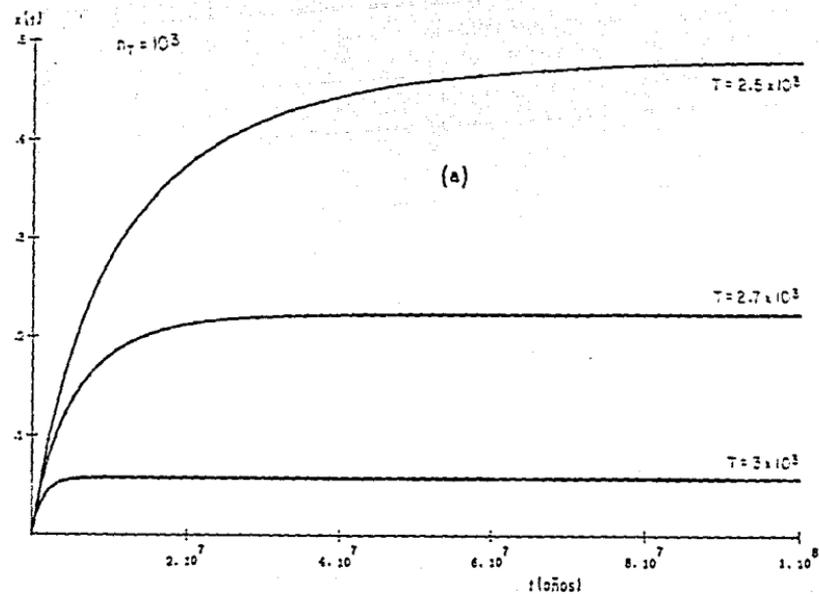


Figura 5.2 Evolución de la abundancia molecular para una nube sin radiación disociante. La condición inicial es  $x=0$ . (a) Nube con densidad constante  $n_1 = 1000 \text{ cm}^{-3}$ , (b) Nube con temperatura constante  $T = 2700 \text{ K}$ .

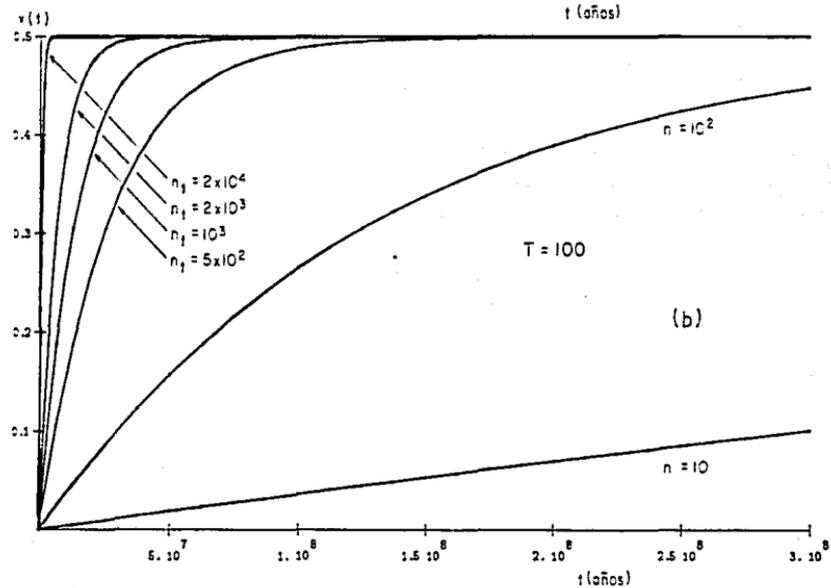
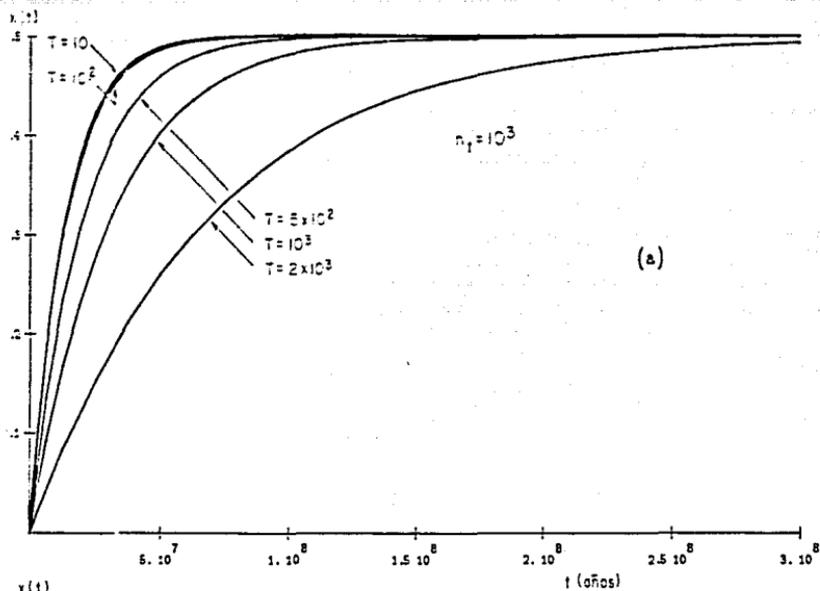


Figura 5.3 Evolución temporal de la abundancia molecular a temperaturas menores a 2000 K; (a) a una densidad constante  $n_1 = 10^3 \text{ cm}^{-3}$ , (b) a una temperatura constante  $T = 10^2 \text{ K}$ .

### 5.3 Enfriamiento producido por la formación de H<sub>2</sub>

Como explicamos en el capítulo 4, Hollenbach & Salpeter (1970), fueron los primeros en hacer un estudio detallado de la dinámica de las reacciones de recombinación sobre la superficie de granos de polvo. Estos autores concluyeron que después de formada la molécula, esta podría ser evaporada de la superficie del grano, pero sólo unas cuantas décimas de eV de la energía de amarre de la molécula se convierten en energía de traslación de la molécula evaporada. Posteriormente, Hunter & Watson (1978) obtuvieron que la energía cinética con la que la molécula abandona el grano es del orden de 0.4 eV. Comparando esta energía con la que pierde el gas por los dos átomos que se adhieren al grano, se puede estimar la energía perdida (o ganada) por el gas por cada molécula que se forma sobre la superficie de los granos de polvo.

En promedio, cada átomo que se adhiere a la superficie del grano tiene una energía cinética igual a  $3kT/2$ , donde  $k$  es la constante de Boltzmann. Entonces, por cada molécula formada el gas pierde  $3kT$ , pero gana  $\Delta E_k = 0.4 \text{ eV}$  en el momento que la molécula se desprende del grano. De lo anterior se tiene que la energía que pierde el gas por cada molécula que se forma es de  $3kT - \Delta E_k$ . De esta forma el enfriamiento neto es (en unidades cgs)

$$\begin{aligned} \Lambda_f &= R_f(3kT - \Delta E_k) \\ &= R_f[(4.14 \times 10^{-16})T - 6.4 \times 10^{-13}] \quad (\text{ergs cm}^{-3} \text{ s}^{-1}), \end{aligned} \quad (5.26)$$

Nótese que para  $T \geq 10^3 \text{ K}$ , el gas se enfría debido a la formación de moléculas pero para  $T < 10^3 \text{ K}$ ,  $\Lambda_f$  es negativa y el gas en realidad se calienta. La figura 5.4 muestra  $\Lambda_f$  como función de  $n_T$  y  $T$ .

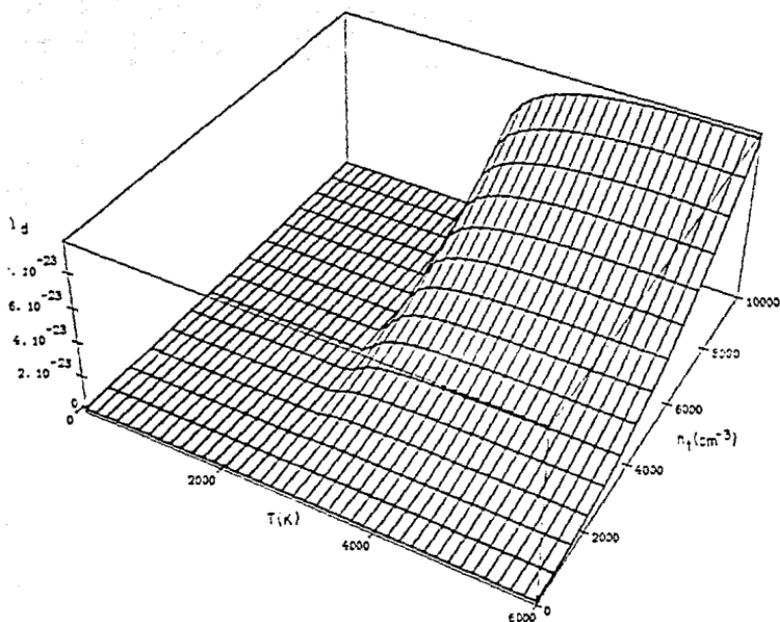


Figura 5.4 Enfriamiento producido por formación de moléculas de hidrógeno sobre superficies de granos de polvo.

Para visualizar el enfriamiento como una función poco dependiente de la densidad, se define la función de enfriamiento como (en unidades cgs)

$$L_f = \frac{\Delta f}{n_i^2} = \alpha(1 - 2x) [4.14 \times 10^{-16}T - 6.4 \times 10^{-13}] \text{ (ergs cm}^3 \text{ s}^{-1}\text{)}. \quad (5.27)$$

En la Figura 5.5 se muestra el comportamiento de esta función.

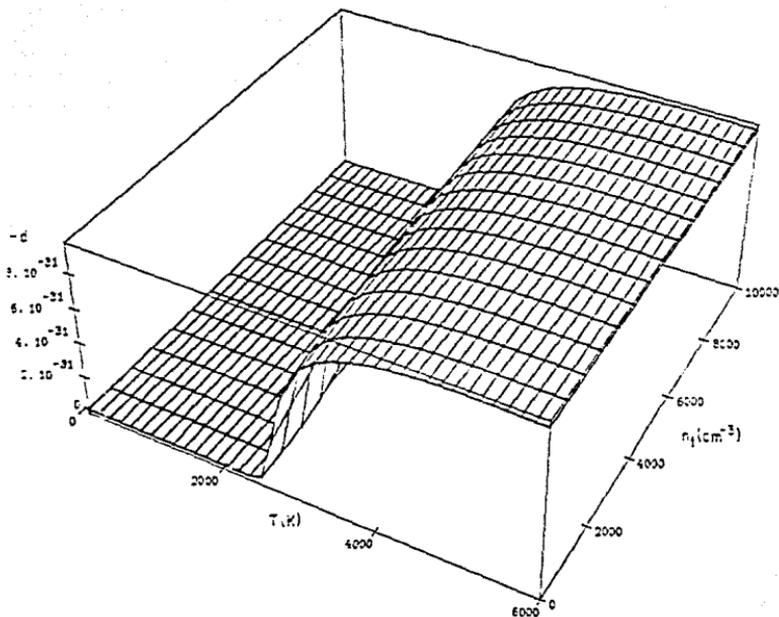


Figura 5.5 Función de enfriamiento para formación de moléculas de hidrógeno sobre superficies de granos de polvo.

#### 5.4 Enfriamiento producido por disociación de $H_2$

Por cada disociación colisional de  $H_2$ , el gas pierde una energía equivalente a la energía de amarre ( $D_e = 4.48 \text{ eV} = 7.17 \times 10^{-12} \text{ ergs}$ ). Entonces, el enfriamiento neto producido por las disociaciones colisionales es

$$\Lambda_d = 7.17 \times 10^{-12} R_d \text{ (ergs cm}^{-3} \text{ s}^{-1}\text{)}, \quad (5.28)$$

y la función de enfriamiento correspondiente es

$$L_d = \frac{\Lambda_d}{n_1^2} = 7.17 \times 10^{-12} \{k_1(1-2x)x + k_2x^2\} \text{ (ergs cm}^3 \text{ s}^{-1}\text{)}. \quad (5.29)$$

La Figura 5.6 muestran el enfriamiento y la función de enfriamiento dado por las ecuaciones anteriores.

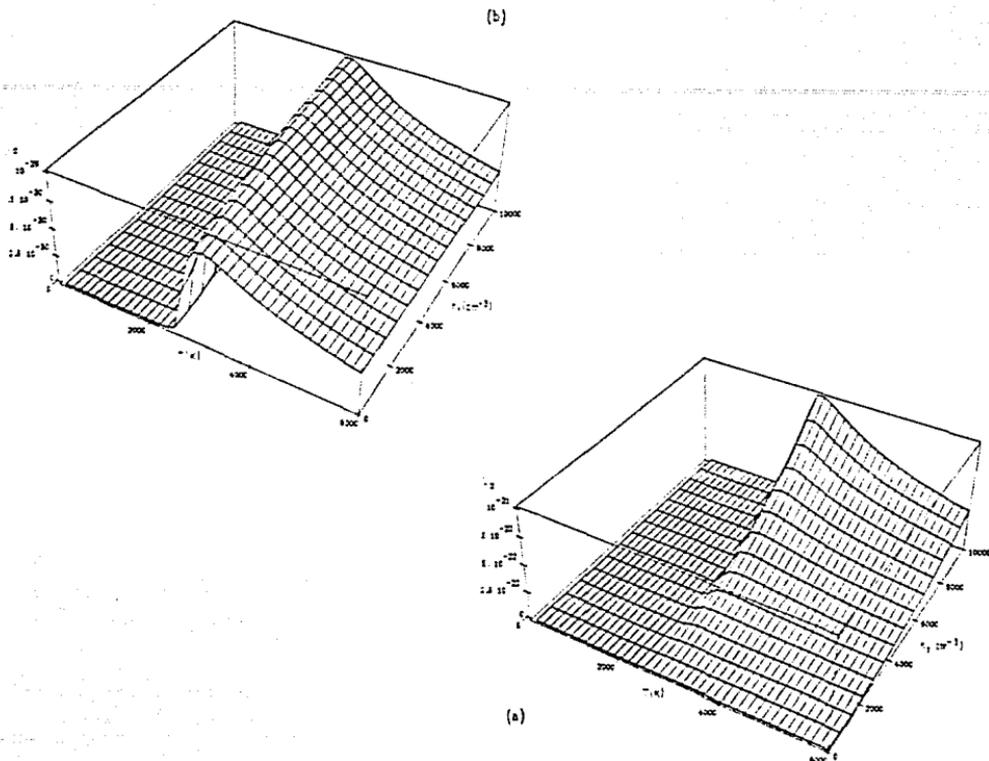


Figura 5.6 (a) Enfriamiento y (b) Función de enfriamiento para disociación de moléculas de hidrógeno por colisiones.

### 5.5 Enfriamiento producido por excitaciones colisionales del $H_2$

Cuando la energía de las colisiones es menor a la energía de amarre de la molécula, no se producen disociaciones pero si se pueden producir excitaciones. La desexcitación radiativa de los niveles excitados colisionalmente produce el enfriamiento del gas. Lepp & Schull (1983) aproximan la tasa de enfriamiento radiativo  $\Lambda_r$  a una suma de términos que representan el enfriamiento de los niveles rotacionales y vibracionales inducidos por las colisiones  $H_2-H$  y  $H_2-H_2$ . Esta tasa de enfriamiento tiene la forma

$$\Lambda_r = n_{H_2} \frac{\bar{\Xi}_{vh}}{[1 + (\bar{\Xi}_{vh}/\bar{\Xi}_{vl})]} + \frac{\bar{\Xi}_{rh}}{[1 + (\bar{\Xi}_{rh}/\bar{\Xi}_{rl})]} \quad (\text{ergs cm}^{-3} \text{ s}^{-1}), \quad (5.30)$$

donde los subíndices  $v$  y  $r$  representan los términos de niveles vibracionales y rotacionales, respectivamente, y los subíndices  $h$  y  $l$  se refieren a los límites a altas y bajas densidades,

$$\Xi_{vh} = 1.10 \times 10^{-13} \exp[-6744/T] \text{ (ergs s}^{-1}\text{)}, \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} \Xi_{rh} &= 3.90 \times 10^{-19} \exp[-6118/T]; \quad T > 1087 \text{ K} \\ &= d \exp[-19.24 - 0.474y - 1.247y^2]; \quad T < 1087 \text{ K} \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\Xi_{vl} = 8.18 \times 10^{-13} n_t \{ (1-2x)A_H + x_1 A_{H_2} \} \text{ (ergs s}^{-1}\text{)}, \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Xi_{rl}}{Q(n_t)} &= 1.38 \times 10^{-22} \exp[-9243/T]; \quad T > 4031 \text{ K} \\ &= d \exp[-22.90 - 0.553y - 1.148y^2]; \quad T < 4031 \text{ K} \end{aligned} \quad (5.34)$$

con  $y = \log(T/10^4 \text{ K})$  y

$$Q(n_t) = n_t^{0.77} (x^{0.77} + 1.2(1-2x)^{0.77}). \quad (5.35)$$

El término  $A_H$  es la tasa de excitación colisional para las transiciones  $v = 0 \rightarrow 1$  inducidas por las colisiones con átomos de hidrógeno (Lepp & Shull 1983; Shull & Beckwith 1982) y tiene el valor

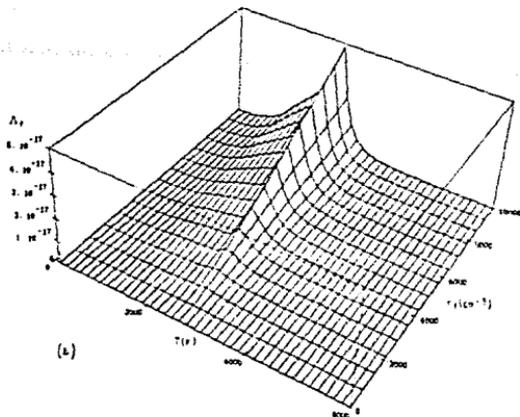
$$\begin{aligned} A_H &= 1.0 \times 10^{-12} T^{1/2} \exp[-6700/T]; \quad T > 1635 \text{ K} \\ &= 1.4 \times 10^{-13} \exp[(T/125) - (T/577)^2 - (5.7 \times 10^8)/T]. \quad T < 1635 \text{ K} \end{aligned} \quad (5.36)$$

Por otra parte,  $A_{H_2}$  es la tasa de excitación colisional  $v = 0 \rightarrow 1$  debida a colisiones entre las moléculas (Shull & Beckwith 1982, Dove & Teitelbaum 1974) y tiene el valor

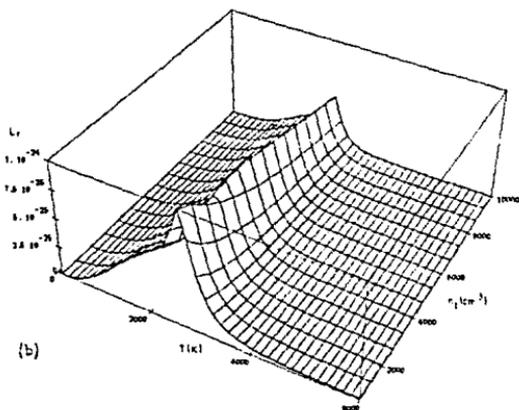
$$A_{H_2} = 1.45 \times 10^{-12} T^{1/2} \exp[-4.2 \Delta E/k(T + 1190)], \quad (5.37)$$

donde  $\Delta E = |E(v, J) - E(v', J')|/k$ ; con  $\Delta J = 0, \pm 1$  (Shull & Beckwith 1982; Dove & Teitelbaum 1974).

La Figura 5.7a muestra los resultados obtenidos para el enfriamiento, usando la abundancia de equilibrio de la ecuación (5.16) y la Figura 5.7b muestra la función de enfriamiento  $L_r = \Lambda_r/n_t^2$ .



(a)



(b)

Figura 5.7 (a) Enfriamiento y (b) función de enfriamiento para excitación inducida por colisiones  $H_2-H_2$  y  $H_2-H$  (ver Apéndice).

# Capítulo 6

## Conclusiones

La presente tesis está compuesta de dos partes. La primera parte, contiene un breve resumen de las propiedades del medio interestelar y una recopilación de la física del  $H_2$ , incluyendo los detalles de su estructura así como un resumen de los cálculos de las tasas de formación y destrucción en condiciones interestelares. La segunda parte contiene nuestros cálculos de las abundancias de la molécula y el enfriamiento que produce en las condiciones típicas del medio interestelar.

Las recopilaciones presentadas en los Capítulos 2, 3 y 4 fueron obtenidas de un número grande de diferentes referencias (de libros y de artículos) y no encontramos alguna monografía que incluyera todos los temas que hemos tratado. Dada la relevancia astronómica del  $H_2$ , es importante que existan trabajos de revisión que contengan (al menos) todos los temas incluidos en los capítulos mencionados y permitan obtener la gran riqueza de información existente con un mínimo de esfuerzo. Esto es particularmente importante para el caso de los estudiantes del Posgrado de Astronomía, quienes necesitan tener acceso rápido a la información de un número grande de temas que, por lo general, están dispersos en una bibliografía muy extensa. Esperamos que el presente trabajo ayude en esa dirección.

Con respecto a los cálculos que realizamos, el tratamiento es muy simplificado pero permite clarificar las ideas más importantes sobre los temas tratados. Para obtener los tiempos en los que una nube opaca convierte su gas atómico en gas molecular, hemos considerando las tasas de formación sobre granos de polvo y la disociación colisional. Los resultados muestran que una nube constituida por puro hidrógeno se transformaría a forma molecular en escalas de tiempo del orden de  $10^7$  a  $10^8$  años. Los modelos con reacciones químicas en la fase gaseosa (que no incluyen al  $H_2$ ), indican que las abundancias de las diferentes especies moleculares en las nubes opacas ( $CO$ ,  $OH$ ,  $NH_3$ , etc.) aumenta fuertemente en tiempos del orden de  $10^6$  a  $10^7$  años (ver Gerola y Glassgold 1978; Tarafdar et al. 1985). Comparando estos dos valores, encontramos diferencias de casi un orden de magnitud; una nube difusa de  $HI$  con  $n_T = 10^2 \text{ cm}^{-3}$  y  $T = 10^2 \text{ K}$ , requiere de  $10^8$  años para convertir el  $HI$  en molecular. La diferencia en estas escalas de tiempo parece ser muy importante porque las "vidas medias" estimadas

para nubes moleculares que están formando estrellas (ver Franco et al. 1988) también parecen indicar que se forman en tiempos mucho menores que  $10^5$  años. Una manera de explicar estas diferencias es que las tasas de reacción en nubes opacas deberán ser mayores que las que hemos considerado en nuestro cálculo. Debemos recordar que nosotros tomamos las obtenidas a partir de observaciones en regiones transparentes y difusas, que son las únicas disponibles a la fecha. Sería importante el tratar de deducir las tasas de reacciones en regiones opacas. Así mismo, en un futuro próximo, haremos un cálculo mas preciso en el cual consideraremos la evolución molecular con los cambios en la temperatura y la densidad producidos por el enfriamiento. Estas nuevas temperaturas y densidades modificaran las abundancias, las que a su vez modificaran el enfriamiento.

Para el colapso de una "nube real" (que también contiene al resto de los elementos mas pesados) que está formando estrellas, es necesario que la energía gravitacional sea radiada eficientemente. El  $H_2$ , a pesar de su gran abundancia, no es un enfriador eficiente debido su baja emisión. Entonces tenemos que pensar en otros enfriadores. El polvo, por ejemplo, debido a sus frecuentes colisiones con el gas, es excitado continuamente y puede ser un elemento importante en el colapso de las nubes que forman estrellas. Así mismo, dada su mayor eficiencia radiativa, también lo pueden ser otras moléculas más pesadas, como el CO, el OH y el  $NH_3$ .

A bajas temperaturas (menores a  $2 \times 10^3$ ), las excitaciones colisionales no alcanzan a disociar a la molécula de  $H_2$ . Por lo tanto, no hay disociaciones y solamente el proceso de formación nos define la evolución de las abundancias del  $H_2$ . Para nubes difusas, la formación de moléculas sobre las superficies de granos de polvo es una fuente de calentamiento. De hecho este proceso es uno de los principales en el calentamiento de las nubes difusas (ver Spitzer 1978).

En regiones donde la temperatura es mayor a los 2000 K, las disociaciones juegan un papel importante y las abundancias en el equilibrio del  $H_2$  no alcanzan el valor del 100 %. Por lo cual, estas regiones solo pueden ser parcialmente moleculares.

Finalmente, para redondear la discusión, vale la pena delinear el caso de abundancias "primigenias" (solo H y He). Dado que no hay otros enfriadores, el enfriamiento producido por la molécula de  $H_2$  debe ser el mas importante. De hecho, la contracción de nubes con este tipo de abundancias, tal como lo mencionan Palla et al (1983), debe ser determinado por la tasa de enfriamiento del  $H_2$ . En estas nubes no hay granos de polvo y por lo tanto el proceso de formación molecular será exclusivamente en la fase gaseosa y a altas densidades.

(\* APENDICE \*)

- (\* Primero encontramos la abundancia del H molecular  
 $x_1$  = abundancia normalizada a la densidad total nT  
 El resto de los simbolos son similares a los usados en el texto \*)

```

y=Log[10,N[T/10^4]];
n11= N[ 4 - 0.416 * y - 0.327 * (y^2), 10 ];
n1= 10^(n11);
k11=If[T > 7390, N[ 6.11 * 10^-14 Exp[(-2.93 * 10^4)/T ] ],
           N[ 2.67 * 10^-15 Exp[-(6750/T)^2 ] ] ];
k1n = 3.52 * 10^-9 Exp[(-4.39 * 10^4)/T];
n22= N[ 4.13 - 0.968 * y + 0.119 * (y^2), 10 ];
n2= 10^(n22);
k21=If[T > 7291, N[ 5.22 * 10^-14 Exp[(-3.22 * 10^4)/T ] ],
           N[ 3.17 * 10^-15 Exp[-(4060/T) - (7500/T)^2 ] ] ];
k2n = 5.48 * 10^-9 Exp[(-5.3 * 10^4)/T];
k1l= N[ N [ Log[10, k1n ] ] - N[(Log[10, k1n/k11 ] ) ] /
        (1+ nT/n1)];
k1=10^(k1l);
k22= N[ N [ Log[10, k2n ] ] - N[(Log[10, k2n/k21 ] ) ] /
        (1+ nT/n2)];
k2=10^(k22);
T2 = T/(100);
a= (3 * 10^(-17))*(( T2^(.5))/ ( 1 + .4*T2^(.5) + .2*T2 + .08*T2^2));
  
```

- (\* Para  $T < 1200$ , los valores de  $K_1$  y  $K_2$  son iguales a cero; por lo que  
 $x_1 = 0.5$  \*)

```

x1=If[ T<1200 , .5,
      -(k1 + 2*a) + ((k1 + 2 * a)^2 + 4(k2 - 2*k1) * a)^.5 ) /
      (2 * (k2 - 2 * k1))];
  
```

- (\* Aqui se calculan las funciones de enfriamiento:  
 $lr$ =radiativo,  $ld$ =colisional,  $lf$ =por formacion,  $lt$ =total;  
 asi como el enfriamiento:  
 $er$ =radiativo,  $ed$ =colisional,  $ef$ =por formacion,  $et$ =total \*)

```

Rfn1 = a * (1 - 2 * x1);
Rdn1 = (k1 * x1) * (1 - 2 * x1) + (k2 * (x1)^2);
dE= 5.7 * 10^3;
aH2 = (1.45 * 10^-12 * T^-.5) * Exp[ (-4.2 * dE) / (T + 1190)];
aH = If[ T>1635 , (10^-12 * T^-.5) * N[Exp[ -(6700)/T]],
        (1.4 * 10^-13) * N[Exp [ (T/125) - (T/577)^2 - (( 5.7 * 10^3) /
        T ) ] ] ];
lv1 = (8.18) * (10^-13) * (nT) * ( ( 1 - (2 * x1) ) * aH ) +
      (x1 * aH2));
lvh = (1.1 * 10^-13) * N[ Exp[ -6744/T ] ];
q = ((nT)^-.77) * ( ((x1)^-.77) + 1.2 * ((1 - (2 * x1))^-.77) );
lr1 = If[ T > 4031 , ( q * 1.38 * 10^-22 ) * N[ Exp[ -9243 / T ] ] ,
  
```

```

q * 10^(- (22.9) - (0.553 * y) - (1.148 * y^2) ) ];
lrr = If[ T > 1087 , ( 3.9 * 10^-19 ) * N[ Exp[ -6118 / T ] ] ,
10^(- (19.24) + (0.474 * y) - (1.247 * y^2) ) ] ];
lr = (x1 / nT) * ( ( lvh / (1 + (lvh /lvl) ) ) +
( lrr / (1 + (lrr /lrl) ) ) );
ld = (7.17) * (10^-12) * (Rdnl) ;
lf = ( (4.14 * 10^-16 * T) - (6.4 * 10^-13) ) * (Rfnl) ;
lt = (lr + ld + lf);

```

```

er = lr * (nT)^2 ;
ed = ld * (nT)^2 ;
ef = lf * (nT)^2 ;
et = lt * (nT)^2 ;

```

Aqui abrimos los archivos que generan las graficas \*)

```

OpenWrite["felr.ps"];
Display["felr.ps",
Plot3D[ lr , {T, 100, 6000}, {nT, 700, 10000},
PlotRange -> {0, 1 * 10^-24}, PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", "Lr"}, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["feld.ps"];
Display["feld.ps", Plot3D[ ld , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},
PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", "Ld"}, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["felf.ps"];
Display["felf.ps",
Plot3D[ lf , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},
PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", "Lf"}, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["felt.ps"];
Display["felt.ps",
Plot3D[ lt , {T, 100, 6000}, {nT, 700, 10000},
PlotRange -> {0, 1 * 10^-24}, PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", "Lt"}, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["ener.ps"];
Display["ener.ps",
Plot3D[ er , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},
PlotRange -> {0, 5 * 10^-17}, PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", }, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["ened.ps"];
Display["ened.ps",
Plot3D[ ed , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},
PlotPoints -> {40, 15},
AxesLabel -> {"T", "nt", }, Shading -> False ];

```

```

OpenWrite["enef.ps"];
Display["enef.ps",
Plot3D[ ef , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},

```

```
PlotPoints -> {40, 15},  
AxesLabel -> {"T", "nt", }, Shading -> False ]];
```

```
OpenWrite["enet.ps"];
```

```
Display["enet.ps",
```

```
Plot3D[ et , {T, 100, 6000}, {nT, 1, 10000},
```

```
PlotRange -> {0, 5 * 10^-17}, PlotPoints -> {40, 15},
```

```
AxesLabel -> {"T", "nt", }, Shading -> False ]];
```

## Referencias

- Aannestad, P. A. & Purcell, E. M. 1973, *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **11**, 309.
- Alonso, M. & Finn E. J. 1971, *Fundamentos Cuánticos y Estadísticos* (Fondo Educativo Interamericano; México).
- Atkins, P. W. 1983, *Molecular Quantum Mechanics* (Oxford University Press; Oxford).
- Bahcall, J., Joss, P. & Cohen, J. 1973, *Ap. J.*, **184**, 57.
- Bally, J., Lane, A. P. 1982, *Ap. J.*, ?.
- Beck, S. C., Lacy, J. H. & Geballe, T. R. 1979, *Ap. J. (Letters)*, **234**, L213.
- Bechwith, S., Neugebauer, G., Becklin, E. E. & Matthews, K. 1980, *A. J.*, **85**, 886.
- Bechwith, S. & Zuckerman, B. 1982, *Ap. J.*, ?.
- Black, J.H. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 731.
- Bohigas, J. & Rosado, M. 1984, *Temas Selectos de Astrofísica*, ed. M. Peimbert (UNAM, México) 159.
- Burke J. R. & Hollenbach D. J. 1983, *Ap. J.*, **265**, 223.
- Dalgarno A. & Stephens, T. L. 1970, *Ap. J. (Letters)*, **160**, L108.
- Davydov, A. S. 1965, *Quantum Mechanics* (Morton Hamermesh; Oxford).
- de Boer, J. H. 1968, *The Dynamical Character of Absorption* (Clarendon Press; Oxford).
- de la Peña, L. 1979, *Introducción a la Mecánica Cuántica* (C.E.C.S.A.; México).
- Dove, J. E., & Teitelbaum, H. 1974, *J. Chem. Phys.*, **6**, 431.
- Duley, W. W. & Williams, D. A. 1984, *Interstellar Chemistry* (Academic Press Inc.; London).
- Dyson, J. E. & Williams, D. A. 1980, *Physics of the Interstellar Medium* (Manchester University Press; Manchester).
- Ehrenson, S., & Phillipson, P. E. 1961, *J. Chem. Phys.*, **34**, 1224.
- Einstein, T. L., Hertz, J. A. & Schieffer, J. R. 1980, *Theory of Chemisorption*, ed. J. R. Smith (Springer Verlag; Berlin), 183.
- Elias, J. H. 1980, *Ap. J.*, **241**, 728.
- Escalante, V. 1991, comunicación personal.
- Fenkel, J. 1924, *Z. Physik*, **26**, 117.
- Ferrara, A., Ferrini & F., Franco, J. 1991, *Ap. J.*, **381**, 137.
- Field, G. B., Sommerville, W. B. & Dressler, K. 1966. *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **4**, 207.

- Flower, D. R., 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 745.
- Franco, J. 1984, *Temas Selectos de Astrofísica*, ed. M. Peimbert (UNAM, México) 13.
- Franco, J. 1991a, *Chemical and Dinamical Evolution of Galaxies*, ed. F. Ferrini, J. Franco & F. Mattencchi (ETS Editrice; Pisa), 506.
- Franco, J. 1991b, *Primera Escuela Mexicana de Astronomía* (Ciencia; México), en prensa.
- Franco, J. & Cantó, J. 1955, *La Astronomía Contemporanea*, ed. L. F. Rodríguez (UNAM, México), 47.
- Franco, J. & Cox, D. P. 1956, *P.A.S.P.*, **98**, 1076.
- Franco, J., Ferrini, F. & Ferrara, A. & Barsella, B. 1991, *Ap. J.*, **366**, 443.
- Franco, J., Tenorio-Tagle, G., Bodenheimer, P. & Rozyczka, M. 1991, *P.A.S.P.*, **103**, 803.
- Franco, J., Tenorio-Tagle, G., Bodenheimer, P., Rozyczka, M. & Mirabel, I. F. 1985, *Ap. J.*, **333**, 826.
- Gelb, A. & Kim, S. K. 1971, *J. Chem. Phys.*, **55**, 4935.
- Goldsmith, P. F., 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 51.
- Goodman, F. O. 1978, *Ap. J.*, **226**, 87.
- Gerola, H. & Glassgold, A. E. 1978, *Ap. J. Suppl.*, **37**, 1.
- Greenberg, J. M. 1978, *Cosmic Dust*, ed. J. A. M. McDonnell (Wiley; New York), 187.
- Herzberg, G. 1938, *Ap. J.*, **87**, 423.
- Herzberg, G. 1944, *Atomic Spectra and Atomic Structure* (Dover Publications; New York).
- Herzberg, G. 1966, *Molecular Spectra and Molecular Structure* (Van Nostrand Reinhold Company; New York).
- Hollenbach, D. & McKee, C. F. 1979, *Ap. J. Suppl.*, **41**, 555.
- Hollenbach, D. & Salpeter E. E. 1970, *J. Chem. Phys.*, **53**, 79.
- Hollenbach, D. & Salpeter E. E. 1971, *Ap. J.*, **163**, 155.
- Hunter, D. A. & Watson, W. D. 1978, *Ap. J.*, **226**, 477.
- Irvine, W. M., Goldsmith, P. F. & Hjalmanson, A. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 561.
- James, H. M., & Coolidge, A. S. 1938, *Ap. J.*, **87**, 438.
- Jenkins, F. A. 1953, *J. Opt. Soc. Am.*, **43**, 425.
- Jura, M. 1974, *Ap. J.*, **191**, 375.
- Jura, M. 1975a, *Ap. J.*, **197**, 575.

- Jura, M. 1975b, *Ap. J.*, **197**, 581.
- Jura, M. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 3.
- Kim, S. J., Drossart, P., Caldwell, J., Maillard, J., Herbst, T. & Shure, M. 1991, *Letters to Nature* **353**, 536.
- King G. W. 1964, *Spectroscopy and Molecular Structure* (Holt, Rinehart and Winston; New York).
- Kirby, K. P. 1990, *Molecular Astrophysics* ed. T. W. Hartquist (Cambridge University Press; Cambridge) 159.
- Kirby, K. P. & Van Dishoeck, E. F. 1988, *Advances in Atomic and Molecular Physics* ed. S. D. Bates & B. Bederson (Academic Press; San Diego) **25**, 437.
- Kittel, C. 1976, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley and Sons, New York).
- Kwan, J. 1977, *Ap. J.*, **216**, 713.
- Lane, A. P., 1989, *Eso Workshop on Low Mass Star Formation and Pre-Main Sequence Objects* Ed. Reipurth, B. 331.
- Lang, K. R. 1980, *Astrophysical Formulae* (Springer-Verlag; New York).
- Leighton, R. B. 1959, *Principles of Modern Physics* (Mc Graw-Hill; New York).
- Lepp, S. & Shull, J. M. 1983, *Ap. J.*, **270**, 578.
- Levshakov, S. A. & Varshalovich, A. F. 1979, *Ap. J. (Letters)*, **20**, 67.
- Lowrance, J., Morton, D., Zucchini, P., Oke, J. B., & Schmidt, M. 1972, *Ap. J.*, **171**, 233.
- Lynds, C. R. 1971, *Ap. J.*, **164**, L73.
- Maclow, M. M. & Shull, J. M. 1986, *Ap. J.*, **302**, 585.
- Martin, P. G. 1978, *Cosmic Dust* (Clarendon Press; Oxford).
- Mathis, J. S. 1990 *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **28**, 37.
- Maeder, R. 1990, *Programming in Mathematica* (Addison-Wesley; Redwood City).
- Morton, D. C. & Dinerstein, H. L. 1976, *Ap. J.*, **204**, 1.
- Munch, G. , H. 1963, *Mem. Soc. Roy. Sci. Liege, Ser. 5*, **7**, 541.
- Myers, P. C. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 71.
- Nicholls, R. W. 1965, *Ap. J.*, **141**, 819.
- O'Donnell, E., & Watson, W. D. 1974, *Ap. J.*, **191**, 89.
- Palla, F., Salpeter, E. E. & Stanhler, S. W. 1983 *Ap. J.*, **271**, 632.XS
- Palouš, J., Franco, J. & Tenorio-Tagle, G. 1990, *Astr. Ap.*, **227**, 175.
- Patch, R. W. 1964, *J. Chem. Phys.*, **41**, 1881.
- Peek, J. M. & Lassetre, E. N. 1963, *J. Chem. Phys.*, **38**, 2392.

- Persson, S. E., Geballe, T. R., Simon, T., Lonsdale, C. J. & Baas, F. 1982, *Ap. J. (Letters)*, **251**, L85.
- Rank, D. H., Fink, U., Foltz, J. V. & Wiggins, T. A. 1964, *Ap. J.*, **140**, 366.
- Rybicki, G. B. & Lightman, A. P. 1979, *Radiative Processes in Astrophysics* (Wiley and Sons, New York).
- Roberge, W. G. & Dalgarno, A. 1982, *Ap. J.*, **255**, 176.
- Savage, B. D., Bohlin, C., Drake, J. F. & Budich, W. 1977, *Ap. J.*, **216**, 291.
- Savage, B. D. & Mathis J. S. 1979, *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **17**, 73.
- Scoville, N. Z., Hall, D. N. B., Kleinmann, S. G. & Ridgway, S. T. 1982, *Ap. J.*, **253**, 136.
- Scoville, N. Z. & Sanders D. B. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 21.
- Shull, H. 1952, *J. Chem. Phys.*, **20**, 18.
- Shull, J. M. 1978, *Ap. J.*, **219**, 677.
- Shull, J. M. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 225.
- Shull, J. M. & Beckwith, S. 1982, *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **20**, 163.
- Spinrad, H. 1963, *Ap. J.*, **138**, 1242.
- Spitzer, L. Jr. 1978, *Physical Processes in the Interstellar Medium* (Princeton University Press; New York).
- Spitzer, L. Jr., & Jenkins, E. B. 1975, *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **13**, 133.
- Stecher, T. P. & Williams, D. A. 1967, *Ap. J. (Letters)*, **149**, L29.
- Tarafdar, S. P., Prasad, S. S., Huntress, W. T., Villere, K. R. & Black, D. C. 1985, *Ap. J.*, **289**, 220.
- Tielens, A. G. G. M. & Allamandola, L. J. 1987, *Interstellar Processes* ed. D. J. Hollembach & H. A. Thronson Jr. (D. Reidel Publishing Company; Holland) 397.
- Thompson, R. I., Lebofsky, M. J., & Rieke, G. H. 1978, *Ap. J. (Letters)*, **222**, L49.
- Thronson, H. A., Jr. 1981, *Ap. J.*, **248**, 984.
- Treffers, R. R., 1979, *Ap. J. (Letters)*, **233**, L17.
- Townes, C. H. & Schawlow, A. L. 1955, *Microwave Spectroscopy* (McGraw-Hill; New York).
- Turner, J. Kirby-Docken, J., Dalgarno, A. 1977, *Ap. J. Suppl.*, **35**, 251.
- Turner, B. E. & Ziyurs, L. M. 1974, *Galactic and Extragalactic Radio Astronomy (Second Edition)* (Springer-Berlin).

- Watson, W. D. 1976a, *Atomic and Molecular Physics and the Interstellar Matter*, ed. R. Balian, P. Encrenaz and J. Lequeux (Elsevier, Amsterdam), 177.
- Watson, W. D. 1976b, *Review of Modern Physics*, **48**, No.4, 513.
- Wolfram, S. 1988, *Mathematica* (Addison-Wesley; Redwood City).
- Wood, B. J. & Wise, H. 1962, *J. Phys. Chem.*, **66**, 1049.
- Zabriskie, F. 1962, *Ap. J.*, **67**, 168.

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA