



Universidad Nacional Autónoma de
México



Facultad de Estudios Superiores Zaragoza

**La concentración de amoniaco como posible señal de
vida en exoplanetas**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
B I Ó L O G O
P R E S E N T A

CESAR LEONARDO CORONEL SILVA

Directora: Dra. Antígona Segura Peralta

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM

Asesor: M. en C. Germán Calva Vásquez

FES Zaragoza, UNAM

México, D. F. Enero 2012



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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 esta 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.

AGRADECIMIENTOS

A la Dra. Antígona Segura Peralta, por la asesoría constante y tiempo dedicado a este proyecto, y sobre todo por su importante influencia en mi desarrollo profesional.

A mis revisores:

Dr. Carlos Castillejos Cruz

M. en C. Germán Calva Vásquez

Biól. María de los Ángeles Galván Villanueva

Biól. Maricela Arteaga Mejía

Por su dedicación y tiempo invertido en este trabajo.

Esta investigación se realizó con el apoyo del proyecto PAPIIT-IN119709-3 Modelos atmosféricos de planetas habitables.

DEDICATORIAS

A mi familia, en especial a mis padres Marina y Roberto, por su apoyo incondicional durante toda mi vida, y a mi abuelita Sabi por el trato afectivo y sincero que me ha dado desde que tengo memoria.

A mis amigos, tanto a los que me han acompañado desde la infancia hasta los que por suerte encontré en el camino, de los cuales no mencionaré nombres por miedo a olvidar alguno.

A mi mentor Carlos Martínez, por las invaluable enseñanzas académicas y personales, así como por el tiempo que me brindó para charlar con él en repetidas ocasiones.

A todos ustedes solo me resta decirles...Gracias.

CONTENIDO	Página
1 INTRODUCCIÓN	1
2 MARCO TEÓRICO	2
2.1 ASTROBIOLOGÍA	2
2.2 LA TIERRA COMO MUNDO HABITABLE	2
2.3 OTROS MUNDOS HABITABLES	4
2.4 BIOSEÑALES	5
2.4.1 Bioseñales atmosféricas	6
2.5 EL AMONIACO COMO BIOSEÑAL EN EXOPLANETAS	7
2.5.1 Ciclo del nitrógeno	8
2.5.2 Procesos productores de amoniaco	11
2.5.3 Fijación de nitrógeno	12
2.5.4 Amonificación	14
2.5.5 Hábitat de los organismos implicados en la producción de amoniaco	15
2.5.6 Organismos productores de amoniaco en el Arqueano	16
2.6 EL MODELADO MATEMÁTICO EN BIOLOGÍA	17
2.6.1 Descripción del modelo fotoquímico 1D	19
3 JUSTIFICACIÓN	20
4 HIPÓTESIS	21
5 OBJETIVOS	21
5.1 OBJETIVO GENERAL	21

5.2 OBJETIVOS PARTICULARES	21
6 MÉTODO	22
6.1 CÁLCULO DE BIOMASA	23
7 RESULTADOS	24
8 DISCUSIÓN	27
9 CONCLUSIONES	30
10 APÉNDICES	32
10.1 Apéndice 1. Lista de reacciones	32
10.2 Apéndice 2. Modelo fotoquímico 1D dependiente del tiempo (método de Euler inverso)	36
10.2.1 Flujo	36
10.2.2 Continuidad	36
10.2.3 Fronteras	37
10.2.3.1 Inferior	39
10.2.3.2 Superior	39
10.2.4 Formulación de la matriz	40
10.2.5 Ecuación de partículas	43
10.2.6 Condición de frontera superior	43
10.2.7 Condición de frontera inferior	44
10.3 Apéndice 3. Balance del hidrógeno	45
11 BIBLIOGRAFÍA	46

ÍNDICE DE TABLAS

Página

Tabla 1. Procesos clave y procariotas del ciclo del nitrógeno.	9
Tabla 2. Organismos fijadores de nitrógeno de vida libre.	13
Tabla 3. Mecanismos de destrucción del NH₃ considerados en el modelo fotoquímico.	26
Tabla 4. Flujos de NH₃ en moléculas cm⁻² s⁻¹ calculados con el modelo fotoquímico.	26
Tabla 5. Producción de amoníaco obtenida.	27
Tabla 6. Biomasa en gramos calculada a partir de los datos obtenidos con el modelo fotoquímico.	27
Tabla 7. Número de células calculado a partir de la biomasa obtenida en la Tabla 5.	28

Figura 1. Espectros de los planetas terrestres en el infrarrojo medio.	6
Figura 2. Tres etapas que ilustran los acontecimientos más importantes en la evolución del ciclo del nitrógeno.	10
Figura 3. Concentraciones de amoníaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-4} de metano y 0.02 bar de CO_2.	24
Figura 4. Concentraciones de amoníaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-5} de metano y 0.02 bar de CO_2.	25
Figura 5. Concentraciones de amoníaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-6} de metano y 0.02 bar de CO_2.	25
Figura 6. Tasa de producción del NH_3 para mantener concentraciones específicas de amoníaco en la superficie de un planeta como la Tierra.	26
Figura 7. Absorción del amoníaco en micrómetros.	29
Figura 8. Espectro de planetas con 0.2 bares de CO_2 alrededor del Sol.	29

RESUMEN

En la Tierra el amoníaco (NH_3) es producido casi en su totalidad por fuentes biológicas, principalmente mediante los procesos de fijación de nitrógeno y amonificación. Además, los organismos implicados en la producción de este compuesto aparecieron muy temprano en la historia de la vida. Estos hechos nos permiten suponer que el NH_3 es un compuesto que está íntimamente relacionado con la vida. Bajo este supuesto, se propone que la concentración de amoníaco puede ser una señal de vida en exoplanetas cuya atmósfera esté constituida principalmente por CO_2 y N_2 similar a la de la Tierra durante el Arqueano. Para comprobar esto debemos establecer las concentraciones, flujos y producciones de amoníaco que podrían darse bajo distintos escenarios y calcular la biomasa necesaria para generar dichas cantidades. Para lograr esto se utilizó un modelo fotoquímico de una dimensión, el cual fue alimentado con distintas concentraciones superficiales de metano y amoníaco para generar varios escenarios y, a su vez, se desarrolló un cálculo de la biomasa basado en NH_3 . Otro punto importante es determinar que tan factible es la detección remota del amoníaco. Esto se logró analizando la absorción del NH_3 y otros compuestos químicos que absorben en longitudes de onda similares para determinar si la absorción del amoníaco no se ve enmascarada por la de otro compuesto. Los resultados obtenidos a través del modelo fotoquímico y el cálculo de la biomasa indican que es posible asociar una biota microbiana a determinadas concentraciones de NH_3 . Así mismo, se comprobó que la detección remota del amoníaco es factible, ya que la absorción de este compuesto no se ve enmascarada por la absorción de otros compuestos y se encuentra dentro del rango de longitudes de onda que buscaran misiones futuras como el Terrestrial Planet Finder (TPF) de la NASA y Darwin de la ESA. Por lo que la concentración de amoníaco puede ser considerada una potencial bioseñal.

1 INTRODUCCIÓN

Hasta el día de hoy el único ejemplo de vida que conocemos es el de nuestro planeta. Sin embargo, desde el descubrimiento del primer planeta alrededor de una estrella similar al Sol por Mayor y Queloz en 1995 se han abierto muchas posibilidades para la detección de vida, mismas que se ven aumentadas con los avances continuos en la tecnología. En este sentido, es importante que se desarrollen estrategias e instrumentos que permitan detectar vida en planetas alrededor de otras estrellas. Para hacer esto, los modelos numéricos y computacionales son herramientas poderosas que nos permiten visualizar teóricamente distintos escenarios que podrían presentarse en otros mundos. Asimismo, las señales atmosféricas son particularmente útiles ya que nos ofrecen un panorama global del planeta y, a su vez, pueden ser detectadas remotamente por telescopios espaciales.

La composición atmosférica más probable de un exoplaneta tipo terrestre es CO_2 y N_2 . Bajo estas condiciones no se conoce ninguna bioseñal. Por lo que se propone al amoniaco. El NH_3 es producido en su mayor parte por procesos biológicos. Este compuesto es básico para las moléculas orgánicas que conforman la vida. Sin embargo, este compuesto se forma a partir del nitrógeno, el cual se encuentra en forma de N_2 en las atmosferas de los planetas tipo terrestres, lo que implica que se necesita un proceso de fijación para que este nitrógeno pueda ser incorporado a las células en forma de amoniaco.

Para que el NH_3 pueda ser considerado una bioseñal, tiene que probarse que pueden producirse cantidades suficientes de este compuesto para que su abundancia en la atmósfera sea detectable en planetas con condiciones similares a las de la Tierra durante el Arqueano por instrumentos que se espera existan en un futuro. Para corroborar esto, en este trabajo se ha planteado determinar las cantidades de amoniaco que pueden ser asociadas a una biota microbiana en una atmósfera carente de oxígeno que está constituida principalmente de CO_2 y N_2 similar a la de la Tierra durante el Arqueano.

2 MARCO TEÓRICO

2.1 ASTROBIOLOGÍA

La astrobiología es la ciencia que estudia el origen, evolución y distribución de la vida en el universo. Integra conocimientos de la biología, física, química, astronomía y geología que permiten entender cómo surgió la vida en la Tierra, cómo evolucionó, la interacción entre el planeta y los organismos vivos, los procesos que dieron lugar a la formación de nuestro planeta, los lugares en el espacio dónde puede originarse la vida y las técnicas con las que se podría detectar la presencia de vida en otros planetas (SOMA, 2011). En esta definición está implícito que la astrobiología incluye el estudio de la biología terrestre. Esto es apropiado, ya que el enfoque de la búsqueda de vida en otros lugares se ve influenciado por el conocimiento de la vida en la Tierra y, a su vez, la comprensión del origen y evolución de la vida en la Tierra es mejorado mediante el estudio de las condiciones en otros mundos y el medio ambiente galáctico (Chyba y Hand, 2005).

La palabra astrobiología fue utilizada por el astrónomo Otto Struve (1955), y fue adoptada por la NASA en 1995 (NAI, 2004). Antes de eso, la palabra exobiología era más comúnmente utilizada en las exploraciones espaciales realizadas por los E.U. El biólogo y premio Nobel en Fisiología y Medicina Joshua Lederberg definió el término exobiología en 1960, y la palabra aun es utilizada ocasionalmente por la NASA y, más comúnmente, por la Agencia Espacial Europea (ESA).

2.2 LA TIERRA COMO MUNDO HABITABLE

Hasta ahora, el único ejemplo de vida con el que contamos es el de nuestro planeta. Las características más generales de la vida en la Tierra son que está constituida por la química del carbono y que necesita agua líquida. De esta forma la habitabilidad se define como los sitios en los que puede existir agua en estado líquido. Para planetas que giran alrededor de otras estrellas (exoplanetas) el concepto de habitabilidad se restringe a la superficie del planeta. Como se

detallará más adelante, la detección de vida en exoplanetas sólo es posible si ésta produce una señal global y para ello la vida debe estar en la superficie o muy cerca de ella.

A partir de comparar la Tierra con otros planetas podemos determinar que características hacen del nuestro un mundo habitable. En primera instancia debe ser un planeta de tipo terrestre, es decir, que sea un cuerpo que gira alrededor de una estrella, esté constituido principalmente por roca y cuya masa no sea mayor a 10 veces la masa de la Tierra (Segura, 2010). Esta característica es fundamental ya que los gigantes gaseosos como Júpiter no presentan una superficie sólida y esto hace poco probable el surgimiento y sustento de vida. Así mismo, la masa planetaria sirve para retener una atmósfera, mantener una actividad tectónica y poseer un campo magnético (Segura, 2010). Otra característica importante es la presencia de agua líquida ya que este compuesto presenta propiedades físicas y químicas que lo hacen esencial para la vida, como el hecho de que es el líquido que más sustancias disuelve (disolvente universal) y es la base de las reacciones enzimáticas de hidrólisis en los seres vivos.

Además de poseer una atmósfera, agua y el tamaño adecuado para retener ambas, la Tierra tiene otra característica que la hace habitable y ésta es que se encuentra en el lugar indicado. La energía que emite una estrella se diluye cuadráticamente con la distancia. Así pues existe una zona anular alrededor de una estrella en la que la energía es ideal para que un planeta con atmósfera mantenga agua líquida en su superficie. Esta zona se denomina zona habitable (Kasting *et al.*, 1993).

En 1993, Carl Sagan y varios colaboradores publicaron los resultados de un experimento en el que la Tierra fue observada con la sonda Galileo como un planeta más (Sagan *et al.*, 1993). Este experimento mostró que nuestro mundo posee en la actualidad tres características relevantes que permiten identificarlo como un mundo habitable:

1. Oxígeno (O₂) gaseoso abundante.

2. Metano (CH_4) atmosférico en desequilibrio termodinámico extremo.
3. Pigmento superficial ampliamente distribuido con una absorción marcada en el límite rojo del espectro visible.

Sin embargo, la evidencia geológica nos indica que hace 4×10^9 años, en el Arqueano, la atmósfera de nuestro planeta estaba compuesta principalmente por bióxido de carbono (CO_2) y nitrógeno (N_2) (Kasting y Catling, 2003). La vida existió bajo estas condiciones unos 10^9 años antes de que el oxígeno empezara a elevarse en la atmósfera de la Tierra, por lo que debemos buscar otros compuestos que permitan identificar la presencia de vida en planetas con atmósferas carentes de oxígeno. Además, las atmósferas químicamente más estables en planetas rocosos están compuestas de CO_2 y N_2 y hasta la fecha no hemos identificado compuestos que sean producidos por la vida y que puedan ser detectados por métodos remotos (telescopios espaciales) en planetas con este tipo de atmósferas.

2.3 OTROS MUNDOS HABITABLES

Desde que Mayor y Queloz descubrieron el primer planeta alrededor de una estrella similar al Sol en 1995, se han abierto muchas posibilidades para la detección de vida. En febrero de 2011, el equipo del telescopio espacial Kepler, encabezado por Bill Borucki, anunció que 1,235 candidatos a planeta han sido encontrados en los primeros cuatro meses de observaciones del Kepler (ARC-NASA, 2011). Antes de su anuncio, más de 500 exoplanetas habían sido descubiertos por otros astrónomos utilizando todos los métodos existentes (<http://exoplanet.eu>). A partir de lo aprendido en nuestro planeta se puede decir que las características de un planeta habitable son:

1. Contiene agua.
2. Recibe suficiente energía del Sol para que su atmósfera pueda mantener la temperatura superficial por arriba del punto de congelación del agua.
3. La atmósfera mantiene la presión requerida para que el agua esté líquida.
4. Dinámica de placas tectónicas que reciclan la atmósfera.
5. Tiene la masa adecuada para retener su atmósfera y mantener la dinámica de placas tectónicas.

Estas características son un requerimiento para la habitabilidad superficial en planetas alrededor de otras estrellas pues si la vida se encuentra en el fondo del océano o en cuevas profundas no será posible detectarla. Las tecnologías actuales permiten determinar la masa o el radio planetario y la distancia que hay entre la estrella y su planeta. La energía recibida por el planeta puede ser calculada fácilmente conociendo la luminosidad de la estrella alrededor de la cual gira y la distancia entre dicha estrella y su planeta. En un futuro se tendrán nuevos instrumentos que permitirán medir más eficazmente el espectro reflejado (en el visible) y emitido (en el infrarrojo) por un planeta, lo cual permitirá conocer la composición de su atmósfera, si es que la tiene, algunas características de su superficie y detectar vida, si es que ésta produce una señal global (Segura, 2010). Este último requerimiento se debe a que no será posible resolver espacialmente el disco del planeta, lo que se observará serán todas las características del mismo mezcladas en un solo punto de luz. Sin embargo, para planear dichas misiones futuras se necesitan modelos que nos muestren el posible rango de atmósferas terrestres que podríamos observar, así como modelos que posteriormente nos permitan interpretar los resultados.

2.4 BIOSEÑALES

Las bioseñales son características que pueden ser detectadas de manera remota y cuya abundancia o presencia sólo pueden ser producidas por la vida. Existen por lo menos dos tipos de bioseñales: espectral resultado de la presencia de productos biológicos y señales electromagnéticas generadas por la tecnología

(Des Marais *et al.*, 2002). En este caso solo se considera al primero de estos dos tipos, en particular las bioseñales espectrales de tipo atmosférico.

2.4.1 Bioseñales atmosféricas

En la Tierra los seres vivos producen una gran variedad de compuestos que son liberados a la atmósfera, algunos como el metano y el bióxido de carbono, son también producidos por procesos geológicos y otros, como el oxígeno y el óxido nitroso son producidos únicamente por la vida. La mejor bioseñal sería la detección simultánea de más de un compuestos producido por la vida (Des Marais *et al.*, 2002). En la Figura 1 se muestra una comparación del espectro en el infrarrojo medio (5-20 μm) de los planetas terrestres, Venus, la Tierra y Marte. Puede verse que el espectro de la Tierra presenta características particulares que lo distinguen de otros planetas. Nuestro planeta muestra la absorción del agua y el ozono (O_3), mientras que en los espectros de Venus y Marte sólo es evidente la presencia de CO_2 . Para que exista O_3 en una atmósfera se requiere la presencia de O_2 pues el ozono se forma a partir de la fotólisis del O_2 . Puesto que el ozono se deriva del oxígeno que a su vez es un producto de la vida, la detección de cualquiera de estos dos compuestos en concentraciones significativas en el espectro de un planeta sería una señal de vida.

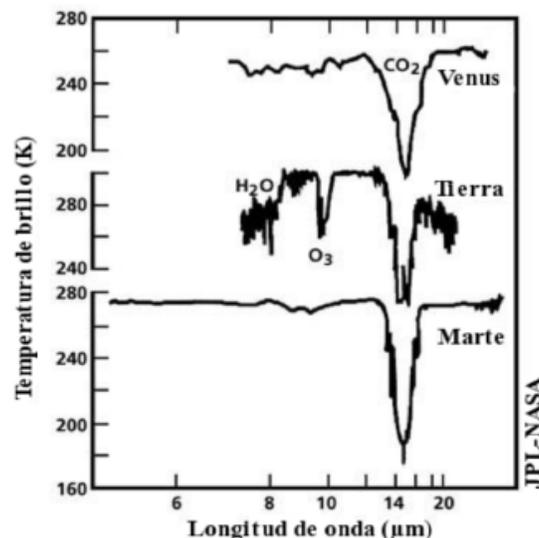


Figura 1. Espectros de los planetas terrestres en el infrarrojo medio (JPL-NASA)

En un planeta como la Tierra (con agua líquida en la superficie y localizado en la zona habitable) el oxígeno no puede acumularse de manera abiótica en cantidades mayores a 10 ppmv, por lo que su abundancia sólo puede ser explicada por la vida (Segura *et al.*, 2007). Es importante tener en cuenta que las bioseñales sólo pueden interpretarse en función de un contexto geológico. Por ejemplo, Marte contiene 1.3×10^{-3} partes por volumen de O_2 en su atmósfera producido por la fotólisis de CO_2 (Carleton y Traub, 1972), sin embargo, si detectáramos un planeta así sería descartado como planeta habitable por su evidente falta de agua. Si existiera vapor de agua abundante en la atmósfera de Marte ésta evitaría la acumulación abiótica de O_2 (Segura *et al.*, 2007).

2.5 EL AMONIACO COMO BIOSEÑAL EN EXOPLANETAS

Puesto que la Tierra es el único ejemplo de mundo habitable, se utilizará como referencia para la investigación. Debido a que la composición atmosférica más probable de los planetas tipo terrestre es de CO_2 y N_2 se usará la época del Arqueano como parámetro para los modelos, ya que en este periodo la atmósfera de la Tierra carecía de oxígeno y estaba compuesta principalmente de CO_2 y N_2 .

Para que el NH_3 sea considerado una bioseñal se tienen que tomar en cuenta los procesos que lo generan, su relación con la vida y se deben calcular las cantidades que serían detectables por instrumentos como los que se encuentran actualmente en planificación como las misiones Terrestrial Planet Finder (TPF) de la NASA y Darwin de la Agencia Espacial Europea, y en construcción como el telescopio espacial James Webb (JWST por sus siglas en inglés) de la NASA. El primer paso para realizar esto es suponer diferentes cantidades iniciales de amoníaco en una atmósfera de CO_2 , posteriormente determinar la producción y flujos superficiales del NH_3 , para después ver si estas cantidades pueden ser producidas por una biota microbiana como la terrestre. Para lograr lo anterior se deben emplear modelos fotoquímicos (Domagal-Goldman *et al.*, 2011; Venot *et al.*, 2010; Line *et al.*, 2011) que permitan calcular el perfil de abundancia de NH_3 con respecto a la altura debido a que, como otros compuestos, el amoníaco se

destruye fácilmente por la radiación UV que proviene de la estrella alrededor de la cual gira el planeta. Así mismo, deben utilizarse modelos que permitan calcular el flujo superficial que se necesita para generar una abundancia dada en la atmósfera planetaria. Y finalmente, se tiene que calcular la biomasa necesaria para producir estas cantidades de amoníaco.

2.5.1 Ciclo del nitrógeno

En la atmósfera de la Tierra primitiva, las únicas fuentes de energía, eran la radiación solar y las descargas eléctricas. En este periodo se tenía una Tierra con la mayoría de su atmósfera compuesta por N_2 y carente de vida. En este punto, existía un “ciclo prebiótico del nitrógeno”, en donde el NO formado por los rayos en la atmósfera a partir del N_2 y el CO_2 , reaccionaba a la forma NO_3^- y NO_2^- disuelta en los océanos (Mancinelli y Mckay, 1988).

Para que el ciclo del nitrógeno tal y como lo conocemos actualmente pudiera comenzar en el planeta, en primer lugar el N_2 tuvo que convertirse en N reactivo (Nr) en un escenario con vida pero carente de oxígeno. El término nitrógeno reactivo (Nr) incluye todo el nitrógeno que participa en la actividad biológica, en la reactividad fotoquímica y compuestos de nitrógeno radiativamente activos en la atmósfera y la biosfera de la Tierra. Por lo tanto, el Nr incluye formas inorgánicas reducidas de nitrógeno (por ejemplo, NH_3 y NH_4^+), formas inorgánicas oxidadas (por ejemplo, NO_x , HNO_3 , N_2O y NO_3^-), y compuestos orgánicos (por ejemplo, urea, aminas y proteínas) (Galloway, 2003). Después de la aparición de la vida hace unos 3500 millones de años, comienza una serie cambios en nuestro planeta, siendo quizá el más relevante, la acumulación del oxígeno en la atmósfera terrestre. Asimismo la vida trajo otro cambio fundamental y éste fue en la dinámica del principal componente de la atmósfera terrestre, el N_2 .

A finales del siglo XIX, los seres humanos habían descubierto el nitrógeno y los componentes esenciales del ciclo del nitrógeno. En otras palabras, hasta entonces se supo que algunos microorganismos convierten el N_2 en NH_3 , otros

microorganismos convierten NH_3 a NO_3^- , y sin embargo, una tercera clase de microorganismos convierten el NO_3^- de vuelta a N_2 (Tabla 1), completando así las secciones del ciclo (Galloway, 2003).

Por lo anterior, es posible observar que el ciclo del nitrógeno es un proceso que ha evolucionado a lo largo de la historia del planeta (Figura 2) y que los microorganismos jugaron un papel central en esta evolución.

Tabla 1. Procesos clave y procariotas del ciclo del nitrógeno (Madigan *et al.*, 2003)

PROCESO	PROCARIOTAS
Nitrificación ($\text{NH}_4^+ \rightarrow \text{NO}_3^-$) ($\text{NH}_4^+ \rightarrow \text{NO}_2^-$) ($\text{NO}_2^- \rightarrow \text{NO}_3^-$)	<i>Nitrosomonas</i> <i>Nitrobacter</i>
Desnitrificación ($\text{NO}_3^- \rightarrow \text{N}_2$)	<i>Bacillus</i> , <i>Paracoccus</i> , <i>Pseudomonas</i>
Fijación de N_2 ($\text{N}_2 + 8\text{H} \rightarrow \text{NH}_3 + \text{H}_2$) Vida libre Aerobia Anaerobia Simbiótica	<i>Azotobacter</i> Cianobacterias <i>Clostridium</i> , bacterias fototróficas rojas y verdes <i>Rhizobium</i> <i>Bradyrhizobium</i> <i>Frankia</i>
Amonificación ($\text{N orgánico} \rightarrow \text{NH}_4^+$)	Pueden hacerla muchos microorganismos

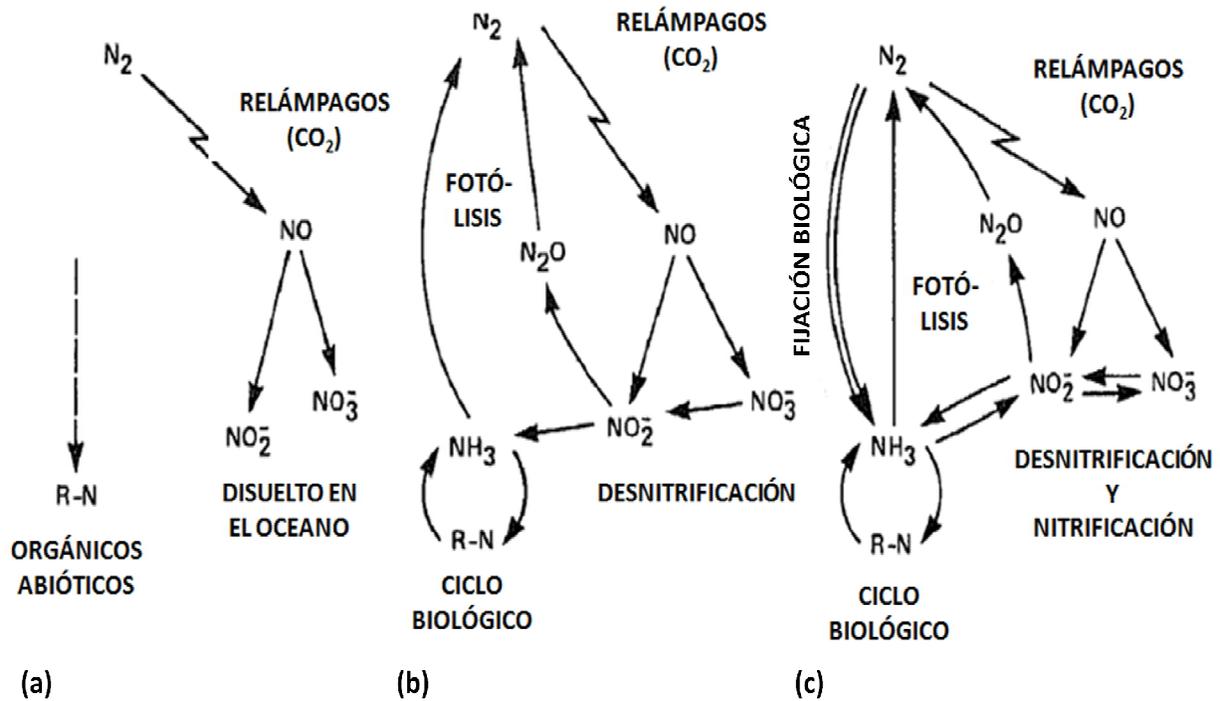
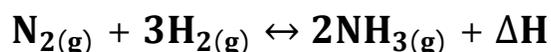


Figura 2. Tres etapas que ilustran los acontecimientos más importantes en la evolución del ciclo del nitrógeno. (a), el ciclo prebiótico del nitrógeno en donde el NO formado por los rayos en la atmósfera a partir del N_2 y el CO_2 , reaccionaba a la forma NO_3^- y NO_2^- disueltos en los océanos. R-N indica la posible deposición en el océano de compuestos orgánicos que contienen nitrógeno. (b), el ciclo del nitrógeno después del origen de los sistemas vivos, en una atmósfera anaerobia. (c), las principales vías del ciclo del nitrógeno tras el incremento del O_2 en la atmósfera terrestre (Mancinelli y Mckay, 1988).

En los organismos modernos, la asimilación del nitrógeno inorgánico es universalmente canalizada a través del amoníaco, el cual representa la principal fuente de nitrógeno inorgánico, lo que sugiere que jugó un papel fundamental en la evolución temprana de la vida. A pesar de que los nitratos y nitritos son importantes fuentes de nitrógeno inorgánico para los organismos existentes, estos compuestos se cree fueron menos abundantes en la Tierra primitiva, y probablemente jugaron un papel de menor importancia hasta que su concentración aumentó después de la oxidación de la atmósfera terrestre (Raymond, 2005).

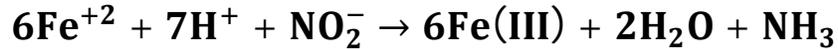
2.5.2 Procesos productores de amoniaco

En la actualidad las fuentes más importantes de amoniaco (NH_3) son los residuos animales (principalmente de peces teleósteos e invertebrados acuáticos), la amonificación del humus seguido por las emisiones de los suelos, las pérdidas de fertilizantes a base de amoniaco de los suelos y las emisiones industriales (Seinfeld y Pandis, 2006). Dentro de los procesos industriales para obtener amoniaco el principal método empleado es el de Haber – Bosch. En este proceso el nitrógeno atmosférico es mezclado con hidrogeno gaseoso:



Como la reacción natural es muy lenta, se necesitan factores que aumenten su rendimiento. Para que este proceso sea óptimo se requiere de una temperatura de entre 450 – 500 °C, una presión aproximada de 200 atmósferas y catalizadores como óxidos de aluminio y potasio (Rodríguez, 1984). Algo de nitrógeno es fijado a NH_3 por los rayos de las tormentas y la luz ultravioleta, pero estos procesos no biológicos son cuantitativamente insignificantes y ellos juntos no representan más del 0.5% de la fijación de nitrógeno (Brock y Madigan, 1993; Stainer *et al.*, 1996). Sin embargo, durante el Arqueano las principales fuentes de NH_3 debieron ser otras, ya que la formación de nitrógeno reducido en planetas con atmósferas de dióxido de carbono y nitrógeno como la de la Tierra primitiva requiere de procesos distintos, que si bien se llevan a cabo en la actualidad, debieron ser más abundantes durante el Arqueano. Una fuente geológica de amoniaco en la Tierra primitiva se iniciaría con la fijación del nitrógeno en NO por un choque de calentamiento (Yung y McElroy, 1979; Chameides y Walker, 1981; Fegley Jr. *et al.*, 1986). El NO así formado reacciona con el HCO generado fotoquímicamente para formar HNO, que posteriormente se precipita con la lluvia en los océanos y forma nitritos (Mancinelli y McKay, 1988). El nitrito se puede reducir a amoniaco

con uno de los constituyentes más abundantes en la corteza terrestre y sedimentos profundos, hierro ferroso (Summers y Chang, 1993), como se muestra a continuación:



Sin embargo, la reacción del amoníaco con el nitrito:



impide considerar a este proceso como una importante fuente de amoníaco durante el Arqueano, aunque hay que considerar que estas reacciones dependen de la proporción de amoníaco y nitrito. La principal fuente de amoníaco en este periodo sería de origen microbiano a través de los procesos de fijación de nitrógeno y amonificación (Donald, 1994) por lo que este trabajo se centrara en estos procesos. Si bien la desnitrificación también libera una cierta cantidad de NH_3 , este proceso libera mayormente N_2 el cual puede ser nuevamente fijado.

2.5.3 Fijación de nitrógeno

La conversión del N_2 a nitrógeno reactivo se denomina fijación de nitrógeno (Macinelli y Mckay 1988), y es una propiedad que poseen sólo algunas arqueobacterias, cianobacterias y bacterias (Tabla 2). Hasta donde se sabe, ningún organismo eucariótico es capaz de fijar nitrógeno.

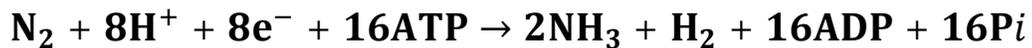
Tabla 2. Organismos fijadores de nitrógeno de vida libre (Brock y Madigan 1993)

Aerobios		
Organótrofos	Fotótrofos	Litótrofos
Bacterias: <i>Azotobacter</i> spp. <i>Klebsiella</i> <i>Beijerinckia</i> <i>Bacillus polymyxa</i> <i>Mycobacterium flavum</i> <i>Azospirillum lipoferum</i> <i>Citrobacter Freundii</i> Metilótrofos (varios pero no todos)	Cianobacterias (Varias pero no todas)	<i>Alcaligenes</i> <i>Thiobacillus</i> (Algunas especies)
Anaerobios		
Organótrofos	Fotótrofos	Litótrofos
Bacterias: <i>Clostridium</i> ssp. <i>Desulfovibrio</i> <i>Desulfotomaculum</i>	Bacterias: <i>Chromatium</i> <i>Chlorobium</i> <i>Rhodospirillum</i> <i>Rhodopseudomonas</i> <i>Rhodomicrobium</i> <i>Rhodobacter</i> <i>Heliobacterium</i>	<i>Methanosarcina</i> <i>Methanococcus</i> (Arqueobacterias)

En el proceso de fijación biológica del N_2 , éste es reducido a NH_3 que posteriormente es convertido a forma orgánica e incorporado al metabolismo celular o es transferido al medio, ya que frecuentemente este sistema produce más nitrógeno útil del que necesita el organismo. El nitrógeno asimilado por el microorganismo, vuelve al medio en forma de amoníaco tras la muerte del organismo y la posterior mineralización (Lengeler *et al.*, 1999). El proceso de fijación de N_2 es catalizado por la enzima nitrogenasa, que consta de dos componentes proteínicos separados que reciben el nombre de dinitrogenasa y dinitrogenasa reductasa. Ambos componentes contienen hierro en su estructura y la dinitrogenasa también contiene molibdeno (Brock y Madigan, 1993).

Debido a la estabilidad del triple enlace del N_2 , este compuesto es extremadamente inerte y su activación es un proceso que demanda mucha

energía, pues deben ser transferidos seis electrones para reducir el N₂ a 2NH₃. Aunque sólo se necesitan 6 electrones para reducir el N₂ en NH₃, mediciones cuidadosas han demostrado que realmente se consumen 8 electrones, 2 electrones se pierden como hidrógeno (H₂), por cada mol de N₂ que se reduce (Brock y Madigan, 1993).



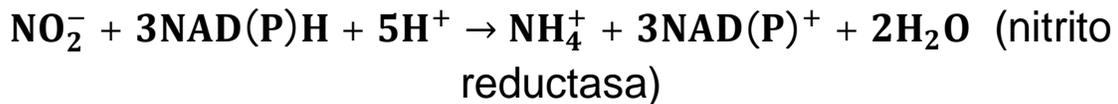
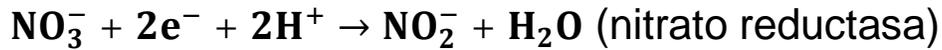
La fijación del nitrógeno es sumamente reductora en la naturaleza y el oxígeno inactiva rápida e irreversiblemente a la dinitrogenasa reductasa, sin embargo, este proceso puede llevarse a cabo en bacterias aerobias, se cree que esto es posible debido a que dentro de la célula se forma un microambiente que protege a la enzima del oxígeno circundante (Brock y Madigan, 1993).

2.5.4 Amonificación

En cualquier lugar que muera un organismo los restos son rápidamente atacados por los microorganismos y los compuestos nitrogenados son degradados con liberación de amoníaco. Parte del nitrógeno es asimilado por los propios microorganismos y de esta forma es convertido en constituyentes de la célula bacteriana. Finalmente, estos constituyentes son convertidos en amoníaco tras la muerte de las bacterias (Stanier *et al.*, 1996).

El primer paso de este proceso de amonificación es la hidrólisis de las proteínas y de los ácidos nucleicos, con liberación de aminoácidos y bases orgánicas nitrogenadas respectivamente. La descomposición de estas moléculas bajo condiciones anaeróbicas (putrefacción) generalmente no conduce a la liberación inmediata como amoníaco de todo el nitrógeno amínico. En presencia de aire las aminas son oxidadas por otras bacterias con liberación de amoníaco (Stanier *et al.*, 1996).

Este proceso es mediado secuencialmente por la nitrato y la nitrito reductasa, a través de las siguientes reacciones:



2.5.5 Hábitat de los organismos implicados en la producción de amoníaco

Las cianobacterias tienen una distribución muy extensa en la naturaleza, en la tierra y en hábitats marinos. En general, son tolerantes a los ambientes extremos, y a menudo son los únicos organismos fotosintéticos de los manantiales de agua caliente, lagos salinos y otros entornos extremos. En los desiertos que son sujetos a intensa luz solar, las cianobacterias permanecen en estado latente durante la mayor parte del año y crecen en los breves periodos de lluvia y de menor temperatura. En los lagos de agua dulce, especialmente en aquellos que son ricos en nutrientes pueden desarrollarse fácilmente las cianobacterias (Brock y Madigan, 1993).

Las bacterias verdes sulfurosas y las bacterias púrpuras son anaerobias estrictas y fototróficamente obligadas, siendo incapaces de efectuar un metabolismo respiratorio en la oscuridad (Brock y Madigan, 1993), por lo que habitan en regiones con abundante luz solar que a su vez son carentes de oxígeno.

Dentro de las arqueobacterias, algunos metanógenos son capaces de fijar nitrógeno. A pesar de la anaerobiosis obligada y de su metabolismo especializado, estos organismos están ampliamente distribuidos en todo el mundo. Aunque solamente en los ambientes anaeróbicos se encuentran altos niveles de

metanogénesis, por ejemplo en los pantanos y en las ciénagas, en el rumen y en las ventilas hidrotermales (Brock y Madigan, 1993).

2.5.6 Organismos productores de amoníaco en el Arqueano

El Arqueano en la escala de tiempo geológica comprende entre 4000 millones y 2500 millones de años atrás. A comienzos del Arqueano se origina la vida y se mantiene presente a lo largo de todo este periodo. La vida durante el Arqueano fue exclusivamente de tipo procariótico y no se ha encontrado hasta hoy evidencia fósil de organismos eucarióticos en este periodo. Consistiendo de casi todos los tipos de bacterias y arqueobacterias que aún persisten hasta nuestros tiempos. Microorganismos como las bacterias púrpuras y verdes, arqueobacterias y cianobacterias tuvieron un gran auge durante este periodo, lo cual queda claro al observar la vasta cantidad de microfósiles, fósiles químicos y estromatolitos fósiles que se han encontrado de este periodo. Los estromatolitos son estructuras organo-sedimentarias laminadas, comúnmente de CaCO_3 , que crecen adheridas al sustrato y emergen verticalmente del mismo, produciendo estructuras de gran variedad morfológica y volumétrica. Su formación y desarrollo a lo largo del tiempo, se debe a la actividad de poblaciones microbianas, típicamente dominadas por cianobacterias (Instituto de Geología-UNAM, 2011). Algunas de estas evidencias fósiles datan de hace aproximadamente 3600 millones de años, como las encontradas en Barberton Mountain Land, en la actual Sudáfrica y Pilbara Block, en Australia occidental. Además, se han encontrado estromatolitos y microfósiles de posibles comunidades fotosintéticas en el Onverwacht Group y Warrawoona Group, en la actual Sudáfrica (que datan de hace 3500 millones de años). La evidencia de vida más antigua en la actual Norteamérica data de hace 3000 millones de años en Steep Rock, Ontario. Ya para hace 2700 millones de años los estromatolitos eran abundantes en varias localidades de las actuales África, América del Norte y del Sur, Australia y Asia (Margulis y Sagan, 1996). El hecho de que la mayoría de las especies de cianobacterias, bacterias púrpuras

fotosintéticas, bacterias verdes sulfurosas, eubacterias Gram-positivas y arqueobacterias aparecieron durante el Arqueano indica que los procesos productores de amoníaco eran indudablemente llevados a cabo en este periodo.

Como se mencionó anteriormente, la producción de NH_3 durante el Arqueano debió ser casi en su totalidad por procesos biológicos. Estos procesos serían comunes en el Arqueano, ya que la gran tolerancia a condiciones extremas, la diversidad metabólica, la consecuente variedad de hábitats que pueden ocupar los organismos productores de amoníaco y la ausencia de otros organismos que pudieran competir con ellos por los hábitats les brindaría, en teoría, la posibilidad de proliferar prácticamente sin limitaciones en la Tierra durante este periodo.

2.6 EL MODELADO MATEMÁTICO EN BIOLOGÍA

Un modelo es una representación imperfecta de la realidad, en el cual se descartan los aspectos irrelevantes del fenómeno que se pretende modelar y se destacan los esenciales (Miramontes, 1998). Por ejemplo en un modelo de la caída libre de un objeto bajo la acción de la gravedad, son irrelevantes el color, la textura y el olor de éste. Un modelo matemático es aquel en el que la representación de los aspectos relevantes y de sus relaciones causales se hace utilizando el razonamiento matemático de derivar resultados a partir de un conjunto de postulados sobre los cuales hay acuerdo generalizado (Miramontes, 1998).

La aplicación del razonamiento matemático en la biología ha tenido un efecto de retroalimentación notable; la matemática a menudo se ha inspirado en fenómenos biológicos y esto ha generado nuevos campos de estudio, mientras que la biología se ha beneficiado en muchas de sus áreas del uso de las matemáticas y, aunque existen diferencias notables entre ambas ciencias, éstas no han sido un obstáculo para una relación larga y fructífera; al contrario, han sentado las bases de una interacción mutuamente ventajosa (Miramontes, 1998). Esta relación no es nada nuevo y Leonardo de Pisa, mejor conocido como *Fibonacci*, en 1219 proporcionó

el que quizás sea el primer modelo matemático en biología (Sánchez *et al.*, 2002). Desde ese momento, un gran número de importantes pensadores como el reverendo Thomas Robert Malthus en la Inglaterra de fines del siglo XVIII, el demógrafo belga Pierre François Verhulst durante el primer tercio del siglo XIX, el matemático italiano Vito Volterra a principios del XX, el médico alemán Wilhelm Winberg y el matemático inglés Godfrey Harold Hardy en 1908, Conrad Hal Waddington en 1933, Alan Turing en 1952, entre otros no menos importantes, se dedicaron a consolidar una biología teórica (Sánchez *et al.*, 2002).

El zoólogo y humanista clásico escocés D'Arcy Wentworth Thompson argumenta que los fenómenos biológicos, a pesar de sus particularidades, están sometidos a las leyes del mundo físico. Por consiguiente, la fragmentación del estudio de la naturaleza en leyes físicas, químicas y biológicas es errónea. En su lugar, Thompson ofrece la idea útil y atractiva de que la ciencia posee una unidad esencial porque en el universo hay, simplemente, leyes naturales (Thompson, 1986).

En este sentido, la astrobiología es un claro ejemplo de la interacción entre ciencias como la biología, física, química, geología, matemáticas, etc. En la cual, la implementación de modelos matemáticos y el uso de herramientas computacionales ha brindado avances considerables en el conocimiento sobre el origen, evolución, distribución y búsqueda de vida en el universo. Dichos modelos están encaminados a determinar las posibles condiciones que existen o existieron tanto en otros planetas como en la Tierra misma, tomando en cuenta aquellas características que podrían ser detectadas y asociadas con la vida. Un enfoque para lograr esto es utilizar modelos atmosféricos que permitan determinar, entre otros, la composición, transferencia de energía y dinámica de las atmósferas planetarias. Un caso particular de los modelos atmosféricos son aquellos llamados modelos fotoquímicos que calculan las reacciones químicas y de fotólisis en una atmósfera con una composición inicial determinada y sometida a una fuente de energía como puede ser la proveniente de una estrella. El cálculo de las abundancias o flujos de los distintos compuestos químicos se hace a partir del

planteamiento y resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas en las que la incógnita a resolver es la variación de las especies químicas en el tiempo y en el espacio. Dependiendo del problema particular a resolver, los modelos fotoquímicos incluyen un número específico de compuestos, así como las reacciones en las que estos participan. La solución del sistema de ecuaciones se realiza con métodos matemáticos ya establecidos, cada modelo utiliza aquel método que le da mayor exactitud o rapidez, dependiendo de la aplicación.

En el caso que ocupa a esta investigación, estos modelos permiten determinar qué compuestos de origen biológico que son liberados a la atmósfera pueden ser detectados remotamente. De manera similar ciertos compuestos químicos presentes en la atmósfera pueden asociarse con la vida si se encuentran en determinadas concentraciones. La efectividad de los modelos fotoquímicos para lograr lo anterior, radica en su capacidad de integrar múltiples factores físicos y químicos que determinan la dinámica y composición atmosférica de un planeta. Las características generales del modelo fotoquímico empleado en esta investigación se describen a continuación.

2.6.1 DESCRIPCIÓN DEL MODELO FOTOQUÍMICO 1D

El modelo fotoquímico 1D fue desarrollado por Pavlov y colaboradores en el 2001, y posteriormente fue modificado por Kharecha y colaboradores en 2005. El modelo está diseñado para atmósferas terrestres con un alto porcentaje de CO_2 y CH_4 e incluye otros 71 compuestos traza dentro de los cuales se encuentran hidrocarburos, compuestos nitrogenados y compuestos azufrados entre otros. El modelo simula una atmósfera anóxica compuesta principalmente de N_2 y CO_2 . Las 73 especies químicas contenidas en el modelo participan en 359 reacciones (Apéndice 1) y abarca desde la superficie del planeta hasta los 100 km de altura en intervalos de 1 km. El ángulo cenital solar está fijado en 50° , y el método dos rayos es utilizado para determinar la transferencia radiativa. El modelo fotoquímico resuelve las ecuaciones de continuidad en cada altura y para todas las especies

químicas de larga vida se incluye el transporte por difusión turbulenta y molecular. Las condiciones de frontera para cada especie se aplican en la parte superior e inferior del modelo de la atmósfera, y el conjunto resultante de ecuaciones diferenciales se integra al estado de equilibrio utilizando el método de Euler inverso (Apéndice 2). El perfil de difusión turbulenta se parametriza con el coeficiente de turbulencia y se asume el mismo que el medido en la Tierra actual (Segura *et al.*, 2007). Una característica clave del modelo que lo hace útil para este estudio es su capacidad para realizar un seguimiento del balance de hidrógeno atmosférico o balance redox (Apéndice 3).

La atmósfera simulada tiene una presión superficial de 1 bar. El perfil de temperatura de cada atmósfera es calculado por un modelo radiativo convectivo que desciende directamente del empleado por Haqq-Misra y colaboradores (2008). Este modelo incorpora un algoritmo de dispersión δ de dos rayos (Toon *et al.*, 1989) para calcular los flujos y utiliza coeficientes de correlación k para parametrizar la absorción por CO₂, H₂O, CH₄, C₂H₆, y NO₂ en cada uno de los 38 intervalos espectrales en el visible/infrarrojo cercano y 55 intervalos espectrales en el infrarrojo térmico (Kasting y Ackerman, 1986). La radiación incidente usada por el modelo fotoquímico y el modelo radiativo convectivo será la del Sol a 1 UA (unidad astronómica). Los modelos de evolución estelar indican que el sol debió ser ~25% menos brillante durante el Arqueano (Haqq-Misra *et al.*, 2008) por lo que la radiación incidente en el planeta simulado fue multiplicada por 0.75.

3 JUSTIFICACIÓN

La composición atmosférica más probable de un exoplaneta de tipo terrestre (rocoso) es CO₂ y N₂. Bajo estas condiciones no se conoce ninguna bioseñal. Por lo que se propone al amoniaco. El amoniaco es producido en su mayor parte por el proceso de fijación biológica del nitrógeno. Este elemento es básico para las moléculas orgánicas que conforman la vida pero debido a que se encuentra en forma de N₂ en las atmósferas de planetas tipo terrestres, se requiere un proceso

de fijación que permita su incorporación a los seres vivos. Para que sea considerado una bioseñal, tiene que probarse que pueden producirse cantidades suficientes de este compuesto para que su abundancia en la atmósfera sea detectable en planetas con condiciones similares a las de la Tierra durante el Arqueano por instrumentos que se espera existan en el futuro.

4 HIPÓTESIS

La presencia de amoníaco en una atmósfera rica en CO_2 y N_2 como la de la Tierra durante el Arqueano, puede ser el resultado de actividad biológica y ser detectable como una bioseñal.

5 OBJETIVOS

5.1 Objetivo general

Determinar las cantidades de amoníaco que pueden ser asociadas a una biota microbiana en una atmósfera carente de oxígeno que está constituida principalmente de CO_2 y N_2 similar a la de la Tierra durante el Arqueano.

5.2 Objetivos particulares

- Calcular el perfil de abundancia de amoníaco desde la superficie del planeta hasta los 100 km de altura a través del modelo fotoquímico 1D.
- Obtener el flujo superficial de NH_3 mediante el mismo modelo.
- Determinar la potencial producción de amoníaco en una atmósfera similar a la de Tierra durante el Arqueano.
- Calcular la biomasa necesaria para producir las cantidades específicas de NH_3 obtenidas a través del modelo fotoquímico 1D.

6 MÉTODO

Para obtener el perfil de abundancia y los flujos superficiales de amoniaco se utilizó un modelo fotoquímico en una dimensión (1D) en el que se supuso una atmósfera inicial de 0.98 bar de N₂ y 2% de CO₂ con una presión superficial atmosférica de 1 bar. Se establecieron tres concentraciones superficiales de metano (1, 10 y 100 ppmv) y para cada una de ellas se supusieron concentraciones superficiales de amoniaco de 1×10^{-10} , 1×10^{-9} , 1×10^{-8} , 1×10^{-7} y 1×10^{-6} en fracción por volumen. A partir de estos parámetros iniciales el modelo calculó las abundancias con respecto a la altura y flujos superficiales de las especies incluidas en el código hasta llegar al equilibrio químico. Este equilibrio se alcanza cuando la tasa de pérdida de cada compuesto iguala a la tasa de producción del mismo compuesto.

La producción de amoniaco se obtuvo mediante la conversión a gramos/año de los flujos de NH₃ expresados en moléculas cm⁻² s⁻¹ obtenidos con el modelo fotoquímico para cada una de las concentraciones superficiales de amoniaco establecidos anteriormente y para cada una de las concentraciones superficiales de metano (1, 10 y 100 ppmv), a través de la siguiente ecuación:

$$P(NH_3) = F_i \times \left(\frac{17.03}{6.022 \times 10^{23}} \right) \times (31558000) \times (4\pi)(6.4 \times 10^8)^2$$

En donde:

$P(NH_3)$ = producción de amoniaco

F_i = *i*-ésimo flujo de NH₃

17.03 = peso molecular del NH₃

6.022×10^{23} = número de Avogadro

31558000 = un año expresado en segundos

6.4×10^8 = radio de la Tierra expresado en cm

6.1 CÁLCULO DE BIOMASA

El cálculo de biomasa se desarrolló mediante un proceso lógico de incorporación de varios hechos y propiedades del amoníaco como se explica a continuación: La síntesis de 1 gramo de masa celular requiere alrededor de 140 mg de nitrógeno (Lengeler *et al.*, 1999). El nitrógeno se encuentra disponible en diferentes estados de oxidación (indicados entre paréntesis) y formas de sustratos moleculares, por ejemplo, NH_4^+ (-3), NO_3^- (+5), N_2 (0), aminoácidos (-3), urea (-3), purinas (-3) , y pirimidinas (-3). El estado de oxidación de la mayoría de las formas de nitrógeno celular (grupos amino, bases nitrogenadas, compuestos N-heterocíclicos, etc.) es equivalente al del amoníaco (-3) (Lengeler *et al.*, 1999). Dado que los distintos sustratos de nitrógeno se reducen o se hidrolizan a amoníaco antes de ser incorporados a la célula, puede considerarse que el nitrógeno total necesario para la producción de biomasa es en forma de amoníaco. Partiendo de este hecho, puede establecerse que la biomasa potencialmente producible es proporcional a la cantidad de amoníaco disponible. Por lo tanto, si consideramos que la producción de amoníaco $P(\text{NH}_3)$, obtenida anteriormente es el nitrógeno total disponible para la formación de masa celular, tenemos que, la biomasa es igual a la producción de amoníaco, entre la cantidad de nitrógeno requerida para formar 1 gramo de masa celular, es decir, la biomasa = $P(\text{NH}_3) \times 1000 / 140$.

Tomando en cuenta que todo el nitrógeno fijado e incorporado por las células, es liberado nuevamente al medio tras la muerte del organismo (mediante el proceso de amonificación) en forma de amoníaco, es posible suponer que la biomasa necesaria para producir una cantidad determinada de NH_3 es equivalente a la biomasa que puede ser producida a partir de esta cantidad de NH_3 (con posibles fluctuaciones provocadas por factores como la cantidad de radiación UV, disponibilidad de otros compuestos químicos, cambios climáticos, etc.).

7 RESULTADOS

Para cada concentración superficial de metano (1×10^{-4} , 1×10^{-5} y 1×10^{-6}) el modelo fotoquímico calcula la concentración de todos los compuestos para cada capa de la atmósfera, de manera que se obtiene un perfil de concentración con respecto a la altura que depende de la cantidad de capas en la que se divide la atmósfera. En este caso se obtienen 500 valores de concentración del NH_3 , por lo que los datos son graficados para un mejor análisis.

Los resultados se presentan en las figuras 3 a 6. En las figuras 3 a 5 se muestra el perfil de abundancia y en los tres casos puede observarse que por encima de los 12 km el NH_3 es destruido rápidamente en la estratósfera, esto se debe a que el principal medio de destrucción del amoniaco es la fotólisis (Tabla 3). Por debajo de los 12 km los compuestos son mezclados por convección y su concentración depende de las reacciones químicas con otros compuestos de la atmósfera presentes a esas alturas.

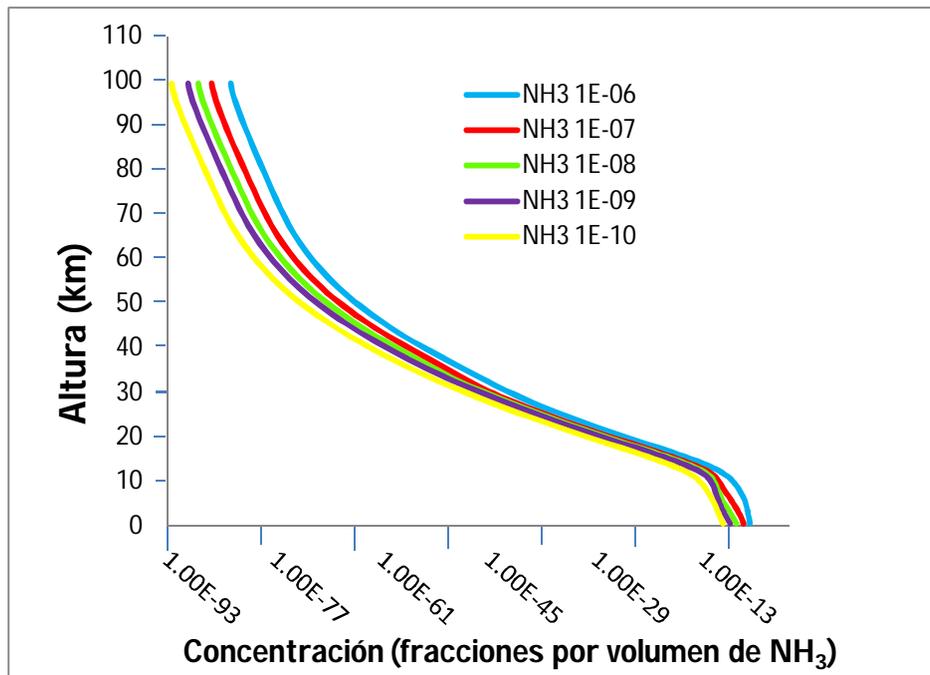


Figura 3. Concentraciones de amoníaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-4} de metano y 0.02 bar de CO_2 . Las concentraciones superficiales de NH_3 se fijaron en 1×10^{-6} , 1×10^{-7} , 1×10^{-8} , 1×10^{-9} y 1×10^{-10}

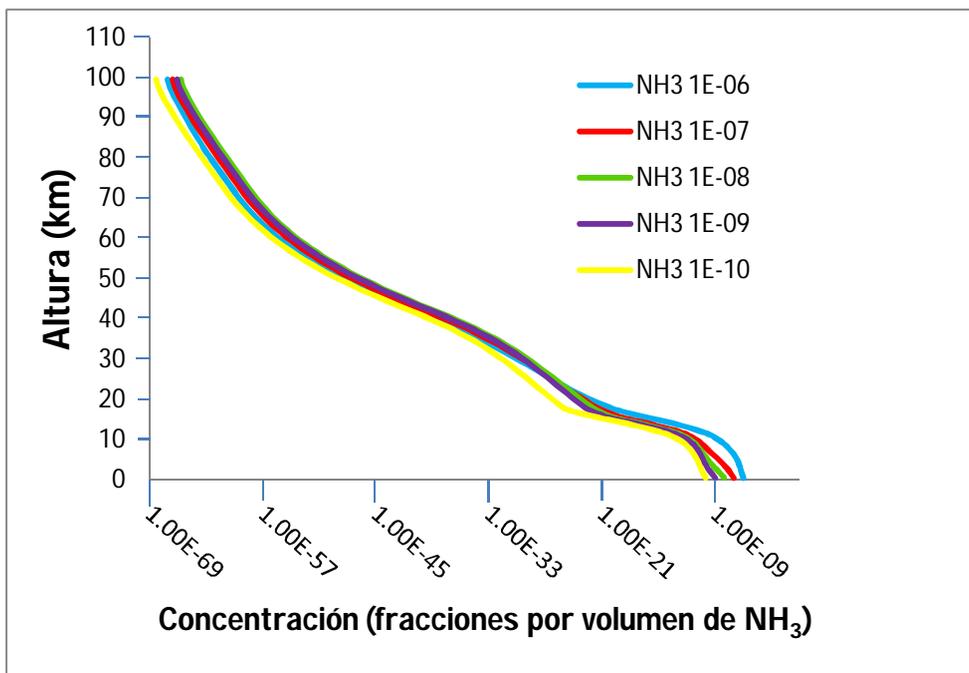


Figura 4. Concentraciones de amoniaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-5} de metano y 0.02 bar de CO₂. Las concentraciones superficiales de NH₃ se fijaron en 1×10^{-6} , 1×10^{-7} , 1×10^{-8} , 1×10^{-9} y 1×10^{-10}

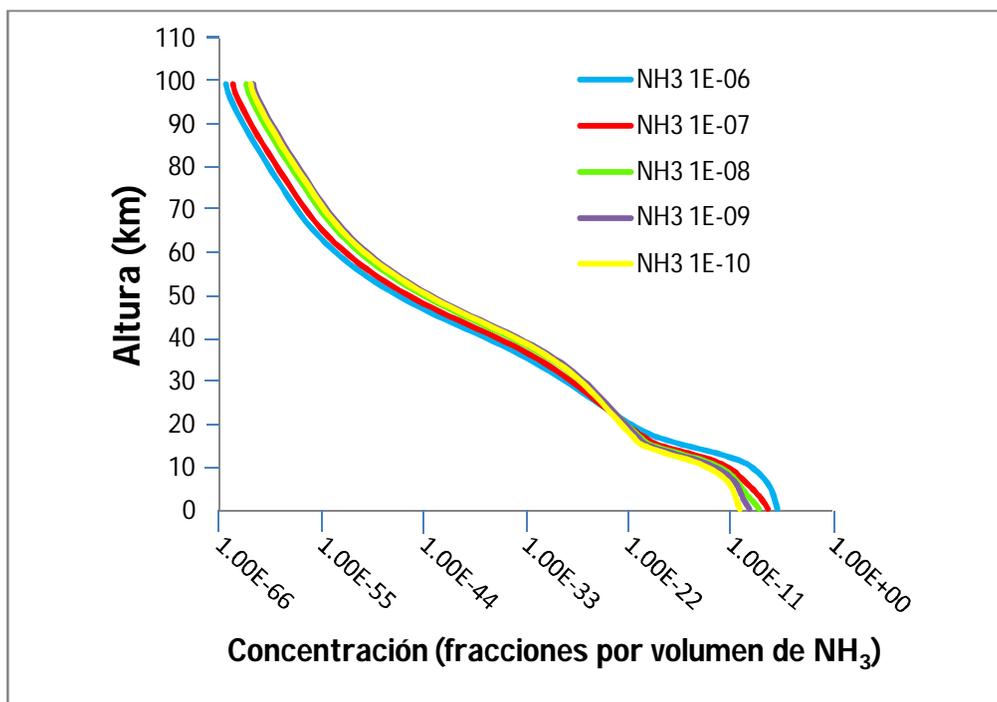


Figura 5. Concentraciones de amoniaco calculadas por el modelo fotoquímico para una atmósfera análoga a la de la Tierra en el Arqueano con una concentración de 1×10^{-6} de metano y 0.02 bar de CO₂. Las concentraciones superficiales de NH₃ se fijaron en 1×10^{-6} , 1×10^{-7} , 1×10^{-8} , 1×10^{-9} y 1×10^{-10}

Tabla 3. Mecanismos de destrucción del NH₃ considerados en el modelo fotoquímico

Reacción	Tasa de pérdida (moléculas s ⁻¹)
NH ₃ + <i>hν</i> (radiación solar) → NH ₂ + H	2.644×10 ¹²
NH ₃ + OH → NH ₂ + H ₂ O	6.380×10 ⁷
NH ₃ + O ¹ D (oxígeno atómico) → NH ₂ + OH	3.218×10 ⁻⁴

Con base en los datos de concentración superficial, flujos de NH₃ obtenidos con el modelo fotoquímico y las concentraciones establecidas de metano (Tabla 4), a través de una conversión simple (de moléculas cm⁻² s⁻¹ a g/año) se obtuvo la producción de amoníaco necesaria para mantener cantidades específicas de este compuesto en la superficie de un planeta como la Tierra (Fig. 6)

Tabla 4. Flujos de NH₃ en moléculas cm⁻² s⁻¹ calculados con el modelo fotoquímico

	CH ₄ 1×10 ⁻⁴	CH ₄ 1×10 ⁻⁵	CH ₄ 1×10 ⁻⁶
Concentración superficial	Flujo de NH₃	Flujo de NH₃	Flujo de NH₃
1.00×10 ⁻⁶	7.46×10 ¹²	8.61×10 ¹²	9.18×10 ¹²
1.00×10 ⁻⁷	1.59×10 ¹²	1.69×10 ¹²	1.74×10 ¹²
1.00×10 ⁻⁸	2.73×10 ¹¹	2.79×10 ¹¹	2.84×10 ¹¹
1.00×10 ⁻⁹	3.00×10 ¹⁰	2.88×10 ¹⁰	2.65×10 ¹⁰
1.00×10 ⁻¹⁰	2.56×10 ⁹	2.12×10 ⁹	1.70×10 ⁹

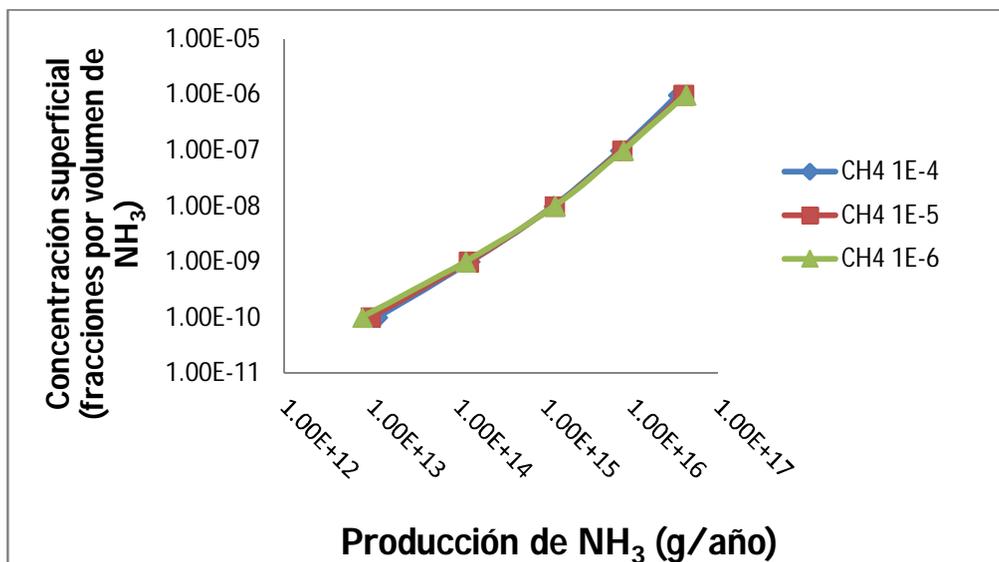


Figura 6. Tasa de producción del NH₃ para mantener concentraciones específicas de amoníaco en la superficie de un planeta como la Tierra.

Tabla 5. Producción de amoniaco obtenida

Concentración específica de CH₄	1×10⁻⁴	1×10⁻⁵	1×10⁻⁶
Concentración superficial de NH₃	Producción de NH₃ (g/año)	Producción de NH₃ (g/año)	Producción de NH₃ (g/año)
1.00×10 ⁻⁰⁶	3.43×10 ¹⁶	3.96×10 ¹⁶	4.22×10 ¹⁶
1.00×10 ⁻⁰⁷	7.30×10 ¹⁵	7.76×10 ¹⁵	7.99×10 ¹⁵
1.00×10 ⁻⁰⁸	1.25×10 ¹⁵	1.28×10 ¹⁵	1.30×10 ¹⁵
1.00×10 ⁻⁰⁹	1.38×10 ¹⁴	1.32×10 ¹⁴	1.22×10 ¹⁴
1.00×10 ⁻¹⁰	1.18×10 ¹³	9.74×10 ¹²	7.81×10 ¹²

La biomasa estimada necesaria para producir cada una de las concentraciones de la Tabla 5 se muestra a continuación.

Tabla 6. Biomasa en gramos calculada a partir de los datos obtenidos con el modelo fotoquímico

Concentración superficial de NH₃	CH₄ 1×10⁻⁴	CH₄ 1×10⁻⁵	CH₄ 1×10⁻⁶
1.00×10 ⁻⁰⁶	2.45×10 ¹⁷	2.83×10 ¹⁷	3.01×10 ¹⁷
1.00×10 ⁻⁰⁷	5.21×10 ¹⁶	5.54×10 ¹⁶	5.71×10 ¹⁶
1.00×10 ⁻⁰⁸	8.93×10 ¹⁵	9.14×10 ¹⁵	9.29×10 ¹⁵
1.00×10 ⁻⁰⁹	9.86×10 ¹⁴	9.43×10 ¹⁴	8.71×10 ¹⁴
1.00×10 ⁻¹⁰	8.43×10 ¹³	6.96×10 ¹³	5.58×10 ¹³

8 DISCUSIÓN

Para determinar si las concentraciones de NH₃ obtenidas en este estudio podrían asociarse a una biota en planetas con atmósferas compuestas principalmente de CO₂ y N₂ similares a la de la Tierra durante el Arqueano y, por lo tanto, considerar al amoniaco como una potencial bioseñal, se deben tomar en cuenta varios aspectos. Primero, consideremos que el amoniaco es destruido rápidamente por encima de los 12 km de altura (como se muestra en los resultados), esto quiere decir que es necesaria una producción constante de este compuesto para que su presencia en la atmosfera sea detectable, y puesto que, como se menciono anteriormente, los procesos no biológicos como la fijación de nitrógeno por

relámpagos y luz UV son cuantitativamente insignificantes y la reacción del nitrito con el hierro ferroso también es limitada, dicha producción solo podría ser mantenida por una biota microbiana a través de los procesos biológicos de fijación de nitrógeno y amonificación.

Asimismo, hay que analizar las biomasa calculadas. Los gramos de biomasa obtenidos anteriormente, por si solos no dicen mucho, pero consideremos que la masa de una célula acuática procarionte promedio es de 2×10^{-14} g (Whitman *et al.*, 1998), por lo tanto, según los datos mostrados en la Tabla 6, se tendría el número de células que se muestra en la Tabla 7, estos números de células son muy similares al total existente en la actualidad en los océanos de la Tierra, el cual es de $\sim 4.5 \times 10^{28}$ células (Karner *et al.*, 2001).

Tabla 7. Número de células calculado a partir de la biomasa obtenida en la Tabla 5

Concentración superficial de NH_3	$\text{CH}_4 1 \times 10^{-4}$	$\text{CH}_4 1 \times 10^{-5}$	$\text{CH}_4 1 \times 10^{-6}$
1.00×10^{-06}	1.225×10^{31}	1.4143×10^{31}	1.5071×10^{31}
1.00×10^{-07}	2.6071×10^{30}	2.7714×10^{30}	2.8536×10^{30}
1.00×10^{-08}	4.4643×10^{29}	4.5714×10^{29}	4.6429×10^{29}
1.00×10^{-09}	4.9286×10^{28}	4.7143×10^{28}	4.3571×10^{28}
1.00×10^{-10}	4.2143×10^{27}	3.4786×10^{27}	2.7893×10^{27}

Una vez establecida la relación del amoniaco con una biota, el siguiente paso es determinar que tan factible es que en un exoplaneta este compuesto pueda ser detectado remotamente por instrumentos en órbita. Los interferómetros planeados dentro de las misiones Darwin (ESA) y TPF (NASA) cubrirán una región espectral entre los 5 y 25 μm (infrarrojo medio). La absorción del amoniaco está dada entre los 8 y los 12 μm aproximadamente (Figura 7), por lo que cae dentro del rango de búsqueda de estas misiones.

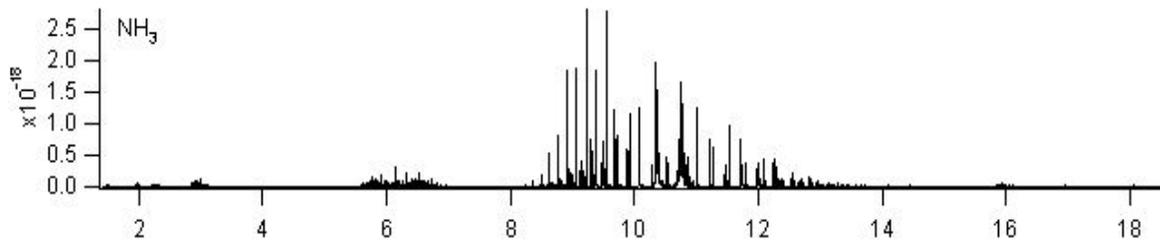


Figura 7. Absorción del amoniaco en micrómetros (VPL-NASA, 2011)

Sin embargo, existe el problema de que la absorción del NH_3 pueda ser “enmascarada” por la absorción de otro compuesto. Para descartar esta posibilidad, analicemos el posible espectro de planetas con una atmosfera similar a la de la Tierra primitiva obtenido por Segura y colaboradores (2007).

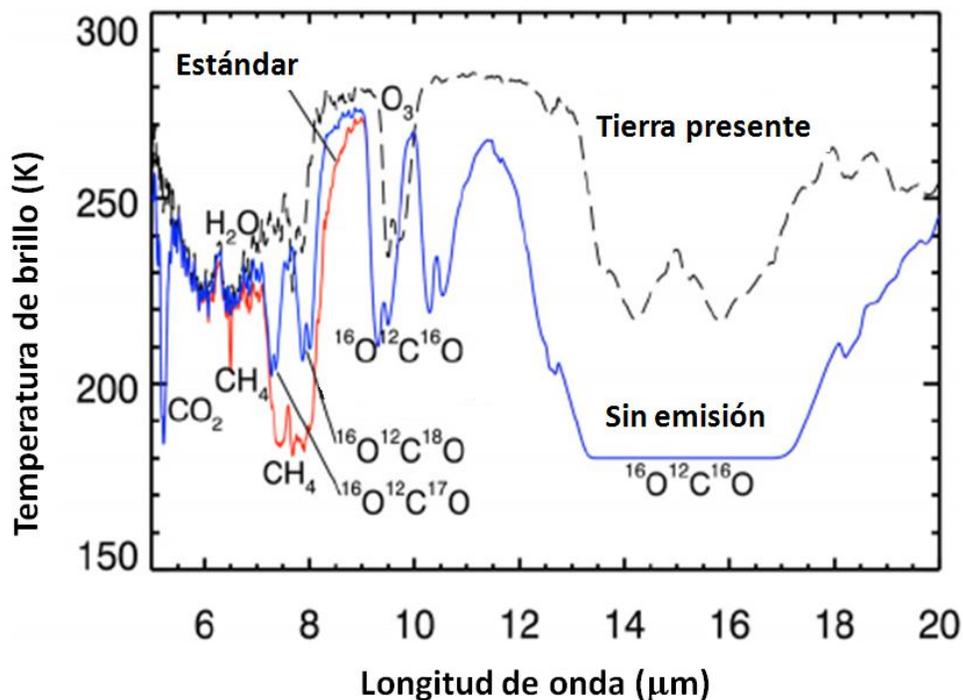


Figura 8. Espectro de planetas con 0.2 bares de CO_2 alrededor del Sol. Caso estándar con una producción de hidrógeno similar a la de la Tierra presente (rojo) y caso sin producción volcánica de hidrógeno (azul). El espectro de la Tierra actual se muestra como comparación (línea discontinua).

En la Figura 8 podemos observar que en comparación con el espectro de la Tierra actual, el espectro en el infrarrojo medio de los dos casos de Tierra primitiva es dominado por la absorción de los distintos isótopos de CO_2 ($^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{17}\text{O}$ y $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$) en los 5.3, 7.4, 8.0, 9.4, 10.5 y 15 μm (Segura *et al.*, 2007) . Esto quiere decir que existen por lo menos 3 ventanas (entre los 8.0-9.4, los 9.4-10.5 y los 10.5-13 μm) en las que podría observarse la absorción del amoníaco.

9 CONCLUSIONES

El nitrógeno representa cerca del 11% de la composición de los microorganismos (Donald, 1994), y como se observó anteriormente, este nitrógeno es incorporado al material celular aproximadamente en un 100% en forma de amoníaco y por lo tanto éste compuesto es un importante constituyente de la vida microbiana. El que este compuesto sea producido casi en su totalidad por procesos biológicos y el hecho de que los organismos que lo fijan hayan aparecido muy temprano en la historia de la vida, lo hace una potencial bioseñal.

Asimismo, el hecho de que los resultados en cuanto al número de células obtenidos en este estudio se ajusten bien a los datos actuales, nos permite considerar al NH_3 como una potencial señal de vida en la Tierra desde el Arqueano hasta la actualidad y, por lo tanto, una posible señal de vida para planetas con condiciones similares a las que presentaba nuestro planeta hace unos 3500 millones de años.

La detección remota del amoníaco es posible, ya que las misiones de búsqueda de vida futuras contemplan el rango de absorción de este compuesto. Además, la absorción del NH_3 no se ve enmascarada (por lo menos no completamente) por la absorción de otros compuestos como el CO_2 y el CH_4 . Estos hechos apoyan al amoníaco como una potencial bioseñal en planetas con atmósferas carentes de oxígeno constituidas principalmente por N_2 y CO_2 .

Sin embargo, es necesario realizar más investigación en este campo del conocimiento y, de este modo, poder generar nuevos y mejores métodos que nos permitan detectar vida remotamente.

10 Apéndices

10.1 Apéndice 1. Lista de reacciones

- 1) $\text{H}_2\text{O} + \text{O}^1\text{D} = 2\text{OH}$
- 2) $\text{H}_2 + \text{O}^1\text{D} = \text{OH} + \text{H}$
- 3) $\text{H}_2 + \text{O} = \text{OH} + \text{H}$
- 4) $\text{H}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
- 5) $\text{H} + \text{O}_3 = \text{OH} + \text{O}_2$
- 6) $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$
- 7) $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$
- 8) $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
- 9) $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$
- 10) $\text{OH} + \text{O} = \text{H} + \text{O}_2$
- 11) $\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$
- 12) $\text{OH} + \text{O}_3 = \text{HO}_2 + \text{O}_2$
- 13) $\text{HO}_2 + \text{O} = \text{OH} + \text{O}_2$
- 14) $\text{HO}_2 + \text{O}_3 = \text{OH} + 2\text{O}_2$
- 15) $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$
- 16) $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$
- 17) $\text{O} + \text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$
- 18) $\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{O}_3 + \text{M}$
- 19) $\text{O} + \text{O}_3 = 2\text{O}_2$
- 20) $\text{OH} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
- 21) $\text{O}^1\text{D} + \text{M} = \text{O}(^3\text{P}) + \text{M}$
- 22) $\text{O}^1\text{D} + \text{O}_2 = \text{O}(^3\text{P}) + \text{O}_2$
- 23) $\text{O}_2 + h\nu = \text{O}(^3\text{P}) + \text{O}^1\text{D}$
- 24) $\text{O}_2 + h\nu = \text{O}(^3\text{P}) + \text{O}(^3\text{P})$
- 25) $\text{H}_2\text{O} + h\nu = \text{H} + \text{OH}$
- 26) $\text{O}_3 + h\nu = \text{O}_2 + \text{O}^1\text{D}$
- 27) $\text{O}_3 + h\nu = \text{O}_2 + \text{O}(^3\text{P})$
- 28) $\text{H}_2\text{O}_2 + h\nu = 2\text{OH}$
- 29) $\text{CO}_2 + h\nu = \text{CO} + \text{O}(^3\text{P})$
- 30) $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$
- 31) $\text{CO} + \text{O} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{M}$
- 32) $\text{H} + \text{CO} + \text{M} = \text{HCO} + \text{M}$
- 33) $\text{H} + \text{HCO} = \text{H}_2 + \text{CO}$
- 34) $\text{HCO} + \text{HCO} = \text{H}_2\text{CO} + \text{CO}$
- 35) $\text{OH} + \text{HCO} = \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$
- 36) $\text{O} + \text{HCO} = \text{H} + \text{CO}_2$
- 37) $\text{O} + \text{HCO} = \text{OH} + \text{CO}$
- 38) $\text{H}_2\text{CO} + h\nu = \text{H}_2 + \text{CO}$
- 39) $\text{H}_2\text{CO} + h\nu = \text{HCO} + \text{H}$
- 40) $\text{HCO} + h\nu = \text{H} + \text{CO}$
- 41) $\text{H}_2\text{CO} + \text{H} = \text{H}_2 + \text{HCO}$
- 42) $\text{CO}_2 + h\nu = \text{CO} + \text{O}^1\text{D}$
- 43) $\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$
- 44) $\text{HCO} + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CO}$
- 45) $\text{H}_2\text{CO} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{HCO}$
- 46) $\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
- 47) $\text{OH} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{M}$
- 48) $\text{H}_2\text{CO} + \text{O} = \text{HCO} + \text{OH}$
- 49) $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} = \text{OH} + \text{HO}_2$
- 50) $\text{HO}_2 + h\nu = \text{OH} + \text{O}$
- 51) $\text{CH}_4 + h\nu = 1\text{CH}_2 + \text{H}_2$
- 52) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = 2\text{CH}_2 + \text{H}_2$ (en lugar de C_2H_2 y C_2H_4)
- 53) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = \text{CH}_4 + 1\text{CH}_2$
- 54) $\text{HNO}_2 + h\nu = \text{NO} + \text{OH}$
- 55) $\text{HNO}_3 + h\nu = \text{NO}_2 + \text{OH}$
- 56) $\text{NO} + h\nu = \text{N} + \text{O}$
- 57) $\text{NO}_2 + h\nu = \text{NO} + \text{O}$
- 58) $\text{CH}_4 + \text{OH} = \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$
- 59) $\text{CH}_4 + \text{O}^1\text{D} = \text{CH}_3 + \text{OH}$
- 60) $\text{CH}_4 + \text{O}^1\text{D} = \text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2$
- 61) $1\text{CH}_2 + \text{CH}_4 = 2\text{CH}_3$
- 62) $1\text{CH}_2 + \text{O}_2 = \text{HCO} + \text{OH}$
- 63) $1\text{CH}_2 + \text{M} = 3\text{CH}_2 + \text{M}$
- 64) $3\text{CH}_2 + \text{H}_2 = \text{CH}_3 + \text{H}$
- 65) $3\text{CH}_2 + \text{CH}_4 = 2\text{CH}_3$
- 66) $3\text{CH}_2 + \text{O}_2 = \text{HCO} + \text{OH}$
- 67) $\text{CH}_3 + \text{O}_2 + \text{M} = \text{H}_2\text{CO} + \text{OH}$
- 68) $\text{CH}_3 + \text{OH} = \text{H}_2\text{CO} + \text{H}_2$
- 69) $\text{CH}_3 + \text{O} = \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$
- 70) $\text{CH}_3 + \text{O}_3 = \text{H}_2\text{CO} + \text{HO}_2$
- 71) $\text{CH}_3 + \text{CH}_3 + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_6 + \text{M}$
- 72) $\text{CH}_3 + h\nu = 1\text{CH}_2 + \text{H}$
- 73) $\text{CH}_3 + \text{H} + \text{M} = \text{CH}_4 + \text{M}$
- 74) $\text{CH}_3 + \text{HCO} = \text{CH}_4 + \text{CO}$
- 75) $\text{CH}_3 + \text{HNO} = \text{CH}_4 + \text{NO}$
- 76) $\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{CO} = \text{CH}_4 + \text{HCO}$
- 77) $\text{H} + \text{NO} + \text{M} = \text{HNO} + \text{M}$
- 78) $\text{N} + \text{N} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{M}$
- 79) $\text{N} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{O}$
- 80) $\text{N} + \text{O}_3 = \text{NO} + \text{O}_2$
- 81) $\text{N} + \text{OH} = \text{NO} + \text{H}$
- 82) $\text{N} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{O}$
- 83) $\text{NO} + \text{O}_3 = \text{NO}_2 + \text{O}_2$
- 84) $\text{NO} + \text{O} + \text{M} = \text{NO}_2 + \text{M}$
- 85) $\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$
- 86) $\text{NO} + \text{OH} + \text{M} = \text{HNO}_2 + \text{M}$
- 87) $\text{NO}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{O}_2$
- 88) $\text{NO}_2 + \text{OH} + \text{M} = \text{HNO}_3 + \text{M}$
- 89) $\text{NO}_2 + \text{H} = \text{NO} + \text{OH}$
- 90) $\text{HNO}_3 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{NO}_2 + \text{O}$
- 91) $\text{HCO} + \text{NO} = \text{HNO} + \text{CO}$
- 92) $\text{HNO} + h\nu = \text{NO} + \text{H}$
- 93) $\text{H} + \text{HNO} = \text{H}_2 + \text{NO}$

- 94) $O + HNO = OH + NO$
95) $OH + HNO = H_2O + NO$
96) $HNO_2 + OH = H_2O + NO_2$
97) $CH_4 + O = CH_3 + OH$
98) $1CH_2 + H_2 = CH_3 + H$
99) $1CH_2 + CO_2 = H_2CO + CO$
100) $3CH_2 + O = HCO + H$
101) $3CH_2 + CO_2 = H_2CO + CO$
102) $C_2H_6 + OH = C_2H_5 + H_2O$
103) $C_2H_6 + O = C_2H_5 + OH$
104) $C_2H_6 + O^1D = C_2H_5 + OH$
105) $C_2H_5 + H = CH_3 + CH_3$
106) $C_2H_5 + O = CH_3 + HCO + H$
107) $C_2H_5 + OH = CH_3 + HCO + H_2$
108) $C_2H_5 + HCO = C_2H_6 + CO$
109) $C_2H_5 + HNO = C_2H_6 + NO$
110) $C_2H_5 + O_2 + M = CH_3 + HCO + OH$
111) $SO + hv = S + O$
112) $SO_2 + hv = SO + O$
113) $H_2S + hv = HS + H$
114) $SO + O_2 = O + SO_2$
115) $SO + HO_2 = SO_2 + OH$
116) $SO + O + M = SO_2 + M$
117) $SO + OH = SO_2 + H$
118) $SO_2 + OH + M = HSO_3 + M$
119) $SO_2 + O + M = M + SO_3$
120) $SO_3 + H_2O = H_2SO_4$
121) $HSO_3 + O_2 = HO_2 + SO_3$
122) $HSO_3 + OH = H_2O + SO_3$
123) $HSO_3 + H = H_2 + SO_3$
124) $HSO_3 + O = OH + SO_3$
125) $H_2S + OH = H_2O + HS$
126) $H_2S + H = H_2 + HS$
127) $H_2S + O = OH + HS$
128) $HS + O = H + SO$
129) $HS + O_2 = OH + SO$
130) $HS + HO_2 = H_2S + O_2$
131) $HS + HS = H_2S + S$
132) $HS + HCO = H_2S + CO$
133) $HS + H = H_2 + S$
134) $HS + S = H + S_2$
135) $S + O_2 = SO + O$
136) $S + OH = SO + H$
137) $S + HCO = HS + CO$
138) $S + HO_2 = HS + O_2$
139) $S + HO_2 = SO + OH$
140) $S + S = S_2$
141) $S_2 + OH = HSO + S$
142) $S_2 + O = S + SO$
143) $SH + H_2CO = H_2S + HCO$
144) $SO_2 + hv = SO_2(^1B)$
145) $SO_2 + hv = SO_2(^3B)$
146) $S_2 + hv = S + S$
147) $S_2 + hv = S_2^*$
148) $H_2SO_4 + hv = SO_2 + 2 OH$
149) $SO_3 + hv = SO_2 + O$
150) $SO_2(^1B) + M = SO_2(^3B) + M$
151) $SO_2(^1B) + M = SO_2 + M$
152) $SO_2(^1B) = SO_2(^3B) + hv$
153) $SO_2(^1B) = SO_2 + hv$
154) $SO_2(^1B) + O_2 = SO_3 + O$
155) $SO_2(^1B) + SO_2 = SO_3 + SO$
156) $SO_2(^3B) + M = SO_2 + M$
157) $SO_2(^3B) = SO_2 + HV$
158) $SO_2(^3B) + SO_2 = SO_3 + SO$
159) $SO + NO_2 = SO_2 + NO$
160) $SO + O_3 = SO_2 + O_2$
161) $SO_2 + HO_2 = SO_3 + OH$
162) $HS + O_3 = HSO + O_2$
163) $HS + NO_2 = HSO + NO$
164) $S + O_3 = SO + O_2$
165) $SO + SO = SO_2 + S$
166) $SO_3 + SO = SO_2 + SO_2$
167) $S + CO_2 = SO + CO$
168) $SO + HO_2 = HSO + O_2$
169) $SO + HCO = HSO + CO$
170) $H + SO + M = HSO + M$
171) $HSO + hv = HS + O$
172) $HSO + NO = HNO + SO$
173) $HSO + OH = H_2O + SO$
174) $HSO + H = HS + OH$
175) $HSO + H = H_2 + SO$
176) $HSO + HS = H_2S + SO$
177) $HSO + O = OH + SO$
178) $HSO + S = HS + SO$
179) $S + S_2 + M = S_3 + M$
180) $S_2 + S_2 + M = S_4 + M$
181) $S + S_3 + M = S_4 + M$
182) $S_4 + S_4 + M = S_8(AER) + M$
183) $S_4 + hv = S_2 + S_2$
184) $S_3 + hv = S_2 + S$
185) $NH_3 + hv = NH_2 + H$
186) $NH_3 + OH = NH_2 + H_2O$
187) $NH_3 + O^1D = NH_2 + OH$
188) $NH_2 + H + M = NH_3 + M$
189) $NH_2 + NO = N_2 + H_2O$
190) $NH_2 + NH_2 + M = N_2H_4 + M$
191) $NH_2 + O = NH + OH$
192) $NH_2 + O = HNO + H$
193) $NH + NO = N_2 + O + H$
194) $NH + O = N + OH$
195) $N_2H_4 + hv = N_2H_3 + H$
196) $N_2H_4 + H = N_2H_3 + H_2$
197) $N_2H_3 + H = 2NH_2$
198) $N_2H_3 + N_2H_3 = N_2H_4 + N_2 + H_2$
199) $NH + H + M = NH_2 + M$
200) $NH + hv = N + H$
201) $NH_2 + hv = NH + H$

- 202) $\text{NH}_2 + h\nu = \text{NH}_2^*$
 203) $\text{NH}_2^* = \text{NH}_2 + h\nu$
 204) $\text{NH}_2^* + \text{M} = \text{NH}_2 + \text{M}$
 205) $\text{NH}_2^* + \text{H}_2 = \text{NH}_3 + \text{H}$
 206) $\text{NH}_2 + \text{HCO} = \text{NH}_3 + \text{CO}$
 207) $\text{NH} + \text{HCO} = \text{NH}_2 + \text{CO}$
 208) $1\text{CH}_2 + \text{O}_2 = \text{H}_2\text{CO} + \text{O}$
 209) $3\text{CH}_2 + \text{O}_2 = \text{H}_2\text{CO} + \text{O}$
 210) $\text{C}_2\text{H}_2 + h\nu = \text{C}_2\text{H} + \text{H}$
 211) $\text{C}_2\text{H}_2 + h\nu = \text{C}_2 + \text{H}_2$
 212) $\text{C}_2\text{H}_4 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
 213) $3\text{CH}_2 + \text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$
 214) $\text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_3 + \text{M} = \text{C}_3\text{H}_8 + \text{M}$
 215) $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{OH} = \text{C}_3\text{H}_7 + \text{H}_2\text{O}$
 216) $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O} = \text{C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$
 217) $\text{C}_3\text{H}_8 + \text{O}^1\text{D} = \text{C}_3\text{H}_7 + \text{OH}$
 218) $\text{C}_3\text{H}_7 + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_5$
 219) $3\text{CH}_2 + {}_3\text{CH}_2 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$
 220) $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} = \text{CO} + \text{CH}_3$
 221) $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_3 + \text{M}$
 222) $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
 223) $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$
 224) $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_4 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3$
 225) $\text{C}_2\text{H}_3 + \text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_5$
 226) $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{H}_2\text{CO} + \text{CH}_3$
 227) $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O} = \text{HCO} + \text{CH}_3$
 228) $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{M}$
 229) $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{HCO}$
 230) $\text{C}_2\text{H} + \text{H}_2 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}$
 231) $\text{C}_2\text{H} + \text{CH}_4 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_3$
 232) $\text{C}_2\text{H} + \text{C}_2\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{C}_2\text{H}_5$
 233) $\text{C}_2\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{M}$
 234) $\text{C}_3\text{H}_8 + h\nu = \text{C}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$
 235) $\text{C}_3\text{H}_8 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_6 + 1\text{CH}_2$
 236) $\text{C}_3\text{H}_8 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_4$
 237) $\text{C}_3\text{H}_8 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_3$
 238) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2 + \text{H}_2$
 239) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} + \text{H}$
 240) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$
 241) $\text{C}_2\text{H}_6 + h\nu = 2\text{CH}_3$
 242) $\text{C}_2\text{H}_4 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$
 243) $\text{C}_3\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_3 + \text{H}$
 244) $\text{CH}_4 + h\nu = 3\text{CH}_2 + 2\text{H}$
 245) $\text{CH}_4 + h\nu = \text{CH}_3 + \text{H}$
 246) $\text{CH} + h\nu = \text{C} + \text{H}$
 247) $\text{CH}_2\text{CO} + h\nu = 3\text{CH}_2 + \text{CO}$
 248) $\text{CH}_3\text{CHO} + h\nu = \text{CH}_3 + \text{HCO}$
 249) $\text{CH}_3\text{CHO} + h\nu = \text{CH}_4 + \text{CO}$
 250) $\text{C}_2\text{H}_5\text{CHO} + h\nu = \text{C}_2\text{H}_5 + \text{HCO}$
 251) $\text{C}_3\text{H}_3 + h\nu = \text{C}_3\text{H}_2 + \text{H}$
 252) $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + h\nu = \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}$
 253) $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + h\nu = \text{C}_3\text{H}_2 + \text{H}_2$
 254) $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + h\nu = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}$
 255) $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + h\nu = \text{C}_3\text{H}_3 + \text{H}$
 256) $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + h\nu = \text{C}_3\text{H}_2 + \text{H}_2$
 257) $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_2 + 3\text{CH}_2$
 258) $\text{C}_3\text{H}_6 + h\nu = \text{CH}_2\text{CCH}_2 + \text{H}_2$
 259) $\text{C}_3\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H}_4 + 3\text{CH}_2$
 260) $\text{C}_3\text{H}_6 + h\nu = \text{C}_2\text{H} + \text{CH}_4 + \text{H}$
 261) $\text{C} + \text{OH} = \text{CO} + \text{H}$
 262) $\text{C} + \text{H}_2 + \text{M} = 3\text{CH}_2 + \text{M}$
 263) $\text{C} + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{O}$
 264) $\text{CH} + \text{H} = \text{C} + \text{H}_2$
 265) $\text{CH} + \text{O} = \text{CO} + \text{H}$
 266) $\text{CH} + \text{H}_2 = 3\text{CH}_2 + \text{H}$
 267) $\text{CH} + \text{H}_2 + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{M}$
 268) $\text{CH} + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{OH}$
 269) $\text{CH} + \text{CO}_2 = \text{HCO} + \text{CO}$
 270) $\text{CH} + \text{CH}_4 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$
 271) $\text{CH} + \text{C}_2\text{H}_2 = \text{C}_3\text{H}_2 + \text{H}$
 272) $\text{CH} + \text{C}_2\text{H}_4 = \text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{H}$
 273) $\text{CH} + \text{C}_2\text{H}_4 = \text{CH}_2\text{CCH}_2 + \text{H}$
 274) $3\text{CH}_2 + \text{O} = \text{CH} + \text{OH}$
 275) $3\text{CH}_2 + \text{O} = \text{CO} + \text{H} + \text{H}$
 276) $3\text{CH}_2 + \text{H} + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{M}$
 277) $3\text{CH}_2 + \text{H} = \text{CH} + \text{H}_2$
 278) $3\text{CH}_2 + \text{CO} + \text{M} = \text{CH}_2\text{CO} + \text{M}$
 279) $3\text{CH}_2 + 3\text{CH}_2 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H}_2$
 280) $3\text{CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_2 + \text{M} = \text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{M}$
 281) $3\text{CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_3 = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_2$
 282) $3\text{CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_5 = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4$
 283) $\text{CH}_2\text{CO} + \text{H} = \text{CH}_3 + \text{CO}$
 284) $\text{CH}_2\text{CO} + \text{O} = \text{H}_2\text{CO} + \text{CO}$
 285) $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + \text{H} + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_2 + \text{M}$
 286) $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + \text{H} + \text{M} = \text{C}_3\text{H}_5 + \text{M}$
 287) $\text{CH}_3 + \text{O}_2 + \text{M} = \text{CH}_3\text{O}_2 + \text{M}$
 288) $\text{CH}_3 + \text{CO} + \text{M} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{M}$
 289) $\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{CO} = \text{CH}_4 + \text{HCO}$
 290) $\text{CH}_3 + \text{OH} = \text{CO} + \text{H}_2 + \text{H}_2$
 291) $\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_3 = \text{C}_3\text{H}_5 + \text{H}$
 292) $\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{H} = \text{CH}_4 + \text{O}_2$
 293) $\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{H} = \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{CO}$
 294) $\text{CH}_3\text{O}_2 + \text{O} = \text{H}_2\text{CO} + \text{HO}_2$
 295) $\text{CH}_3\text{CO} + \text{H} = \text{CH}_4 + \text{CO}$
 296) $\text{CH}_3\text{CO} + \text{O} = \text{H}_2\text{CO} + \text{HCO}$
 297) $\text{CH}_3\text{CO} + \text{CH}_3 = \text{C}_2\text{H}_6 + \text{CO}$
 298) $\text{CH}_3\text{CO} + \text{CH}_3 = \text{CH}_4 + \text{CH}_2\text{CO}$
 299) $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{H} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2$
 300) $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{O} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{OH}$
 301) $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{OH} = \text{CH}_3\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$
 302) $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{CH}_3 = \text{CH}_3\text{CO} + \text{CH}_4$
 303) $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_2 + \text{M}$
 304) $\text{CH}_3\text{C}_2\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{C}_3\text{H}_5 + \text{M}$
 305) $\text{C}_2 + \text{O} = \text{C} + \text{CO}$
 306) $\text{C}_2 + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{CO}$

- 307) $C_2 + H_2 = C_2H + H$
 308) $C_2 + CH_4 = C_2H + CH_3$
 309) $C_2H + O = CO + CH$
 310) $C_2H + C_3H_8 = C_2H_2 + C_3H_7$
 311) $C_2H_2 + O = 3CH_2 + CO$
 312) $C_2H_2 + OH = C_2H_2OH$
 313) $C_2H_2 + OH + M = CH_2CO + H + M$
 314) $C_2H_2OH + H = H_2O + C_2H_2$
 315) $C_2H_2OH + H = H_2 + CH_2CO$
 316) $C_2H_2OH + O = OH + CH_2CO$
 317) $C_2H_2OH + OH = H_2O + CH_2CO$
 318) $C_2H_3 + O = CH_2CO + H$
 319) $C_2H_3 + OH = C_2H_2 + H_2O$
 320) $C_2H_3 + CH_3 = C_2H_2 + CH_4$
 321) $C_2H_3 + CH_3 + M = C_3H_6 + M$
 322) $C_2H_3 + C_2H_3 = C_2H_4 + C_2H_2$
 323) $C_2H_3 + C_2H_5 = C_2H_4 + C_2H_4$
 324) $C_2H_3 + C_2H_5 = CH_3 + C_3H_5$
 325) $C_2H_4 + OH + M = C_2H_4OH + M$
 326) $C_2H_4OH + H = H_2O + C_2H_4$
 327) $C_2H_4OH + H = H_2 + CH_3CHO$
 328) $C_2H_4OH + O = OH + CH_3CHO$
 329) $C_2H_4OH + OH = H_2O + CH_3CHO$
 330) $C_2H_5 + OH = CH_3CHO + H_2$
 331) $C_2H_5 + O = CH_3CHO + H$
 332) $C_2H_5 + CH_3 = C_2H_4 + CH_4$
 333) $C_2H_5 + C_2H_3 = C_2H_6 + C_2H_2$
 334) $C_2H_5 + C_2H_5 = C_2H_6 + C_2H_4$
 335) $C_2H_5 + H + M = C_2H_6 + M$
 336) $C_2H_5 + H = C_2H_4 + H_2$
 337) $C_3H_2 + H + M = C_3H_3 + M$
 338) $C_3H_3 + H + M = CH_3C_2H + M$
 339) $C_3H_3 + H + M = CH_2CCH_2 + M$
 340) $C_3H_5 + H = CH_3C_2H + H_2$
 341) $C_3H_5 + H + M = C_3H_6 + M$
 342) $C_3H_5 + H = CH_4 + C_2H_2$
 343) $C_3H_5 + CH_3 = CH_3C_2H + CH_4$
 344) $C_3H_5 + CH_3 = CH_2CCH_2 + CH_4$
 345) $C_3H_6 + OH = CH_3CHO + CH_3$
 346) $C_3H_6 + O = CH_3 + CH_3 + CO$
 347) $C_3H_6 + H + M = C_3H_7 + M$
 348) $C_3H_7 + CH_3 = C_3H_6 + CH_4$
 349) $C_3H_7 + OH = C_2H_5CHO + H_2$
 350) $C_3H_7 + O = C_2H_5CHO + H$
 351) $H + CH_2CCH_2 = CH_3C_2H + H$
 352) $O + H_2CO = OH + HCO$
 353) $3CH_2 + C_2H_2 + M = CH_2CCH_2 + M$
 354) $C_2H + C_2H_2 = HC(AER) + H$
 355) $1CH_2 + H_2 = 3CH_2 + H_2$
 356) $C_3H_5 + H = CH_2CCH_2 + H_2$
 357) $HCO + H_2CO = CH_3O + CO$
 358) $CH_3O + CO = CH_3 + CO_2$
 359) $C_2H + CH_2CCH_2 = HC(AER) + H$

Donde:

O^1D = oxígeno atómico (en estado electrónico 1D)

$O(^3P)$ = oxígeno atómico (en estado electrónico 3P)

$h\nu$ = radiación solar

M = cualquier tercer molécula o átomo

$SO_2 (^1B)$ = dióxido de azufre (configuración electrónica 1B)

$SO_2 (^3B)$ = dióxido de azufre (configuración electrónica 3B)

(AER) = aerosoles formados por hidrocarburos

Subíndice 2* = cargado eléctricamente

10.2 Apéndice 2. Modelo fotoquímico 1D dependiente del tiempo (método de Euler inverso)

Se quiere resolver el flujo junto con la ecuación de continuidad para $i = 1, \dots, I$ diferentes especies

10.2.1 Flujo

$$\Phi_i = -K_E n \frac{\partial f_i}{\partial z} \quad (1)$$

10.2.2 Continuidad

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = p_i - e_i n_i - \frac{\partial \Phi_i}{\partial z} \quad (2)$$

Donde:

Φ_i = Flujo de la i -ésima especie

n_i = Número de densidad de la i -ésima especie (cm^{-3})

f_i = Proporción de mezcla de la i -ésima especie (cm^{-3})

n = Número total de la densidad de la atmósfera

z = Altura (cm)

p_i = Tasa de producción de compuestos químicos ($\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$)

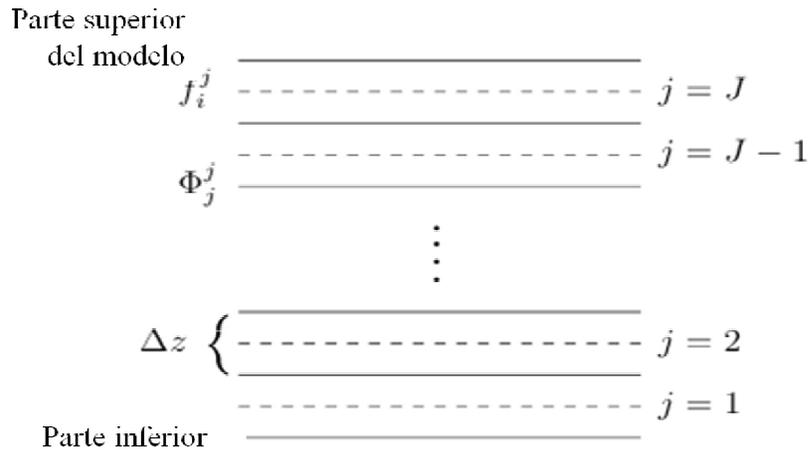
e_i = frecuencia de pérdida química

K_E = Coeficiente de difusión de Eddy ($\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$)

Al diferenciar la ecuación (1) y sustituyendo el resultado en la ecuación (2) se pueden combinar estas ecuaciones en una única ecuación de segundo orden diferencial parcial (EDP) para la proporción de mezcla:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_E n \frac{\partial f_i}{\partial z} \right) + \frac{p_i}{n} - e_i f_i \quad (3)$$

Para resolver la Ec. (3) debemos subdividir la atmósfera en J capas de igual espesor ΔZ :



El número de capas $j = 1, \dots, J$ empieza en la parte inferior. La proporción de mezclas f_i^j se definen en el punto medio de las capas j los flujos Φ_j se definen en la capa.

10.2.3 Fronteras

La derivada $\frac{\partial f_i}{\partial z}$ se aproxima utilizando diferencias finitas centradas:

$$\frac{\partial f_i^{j+1/2}}{\partial z} = \frac{f_i^{j+1} - f_i^j}{\Delta z}$$

La derivada $\frac{\partial}{\partial z} \left(Kn \frac{\partial f_i}{\partial z} \right)$ se aproxima de la misma manera. Esto lleva a la diferencia finita de la Ec. (3):

$$\frac{\partial f_i^j}{\partial t} = \frac{1}{n_j(\Delta z)^2} [(K_{En})_{j+1/2}(f_i^{j+1} - f_i^j) - (K_{En})_{j-1/2}(f_i^j - f_i^{j-1})] + \frac{p_i^j}{n_j} - e_i^j f_i^j \quad (4)$$

Donde los subíndices $j \pm \frac{1}{2}$ indican que estas cantidades deben ser evaluadas en las fronteras de la capa.

Ahora, en este punto se ha convertido el sistema original de I EDPs en un conjunto $I \times J$ de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDOs). Se enumeraran consecutivamente $k = 1, \dots, K$, donde $K = I \times J$.

Se tienen los números de todas las especies en la capa inferior, entonces todas las especies de la segunda capa, y así hasta llegar a la parte superior. Por lo tanto, si renombramos las proporciones de mezcla con la variable x , tenemos:

$$x_k \equiv f_i^j \quad k = i + (j - 1)I$$

Reescribiendo la Ec. (4) en términos de estas nuevas variables se obtiene:

$$\frac{\partial x_k}{\partial t} = \frac{1}{n_j(\Delta z)^2} [(K_{En})_{j+1/2}(x_{k+I} - x_k) - (K_{En})_{j-1/2}(x_k - x_{k-I})] + \frac{p_k}{n_j} - e_k x_k \quad (5)$$

$$\text{para } k = 1, \dots, K (= I \times J)$$

Ahora bien, esta ecuación es válida en el punto de la red interior $j = 2, \dots, J - 1$. En las fronteras se debe tener algo diferente, ya que f_i^0 y f_i^{J+1} no están definidas. Para ver cómo manejar este problema, hay que tener en cuenta que tal vez la Ec. (4) puede escribirse como:

$$\frac{\partial f_i^j}{\partial t} = \frac{-1}{n_j \Delta z} \left(\Phi_1^{j+1/2} - \Phi_1^{j-1/2} \right) + \frac{p_i^j}{n_j} - e_i^j f_i^j \quad (6)$$

Estos términos pueden ser evaluados en términos de los flujos (específicos) en la parte superior e inferior de la atmósfera.

10.2.3.1 Inferior

Si se reemplaza j por 1 y se suprime el subíndice i por conveniencia, la Ec. (6) se convierte en:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \frac{1}{n_1 \Delta z} \left[(K_E n)_{1+1/2} \left(\frac{f_2 - f_1}{\Delta z} \right) + \Phi_g \right] + \frac{p_1}{n_1} - e_1 f_1 \quad (7)$$

Donde Φ_g es el flujo específico hacia arriba en la parte inferior. Para las especies de vida corta a menudo se asume que Φ_g es cero. Otra suposición común es que una especie fluye hacia abajo con una velocidad de deposición V_d , de modo que $\Phi_g = -V_d n_i = -V_d n_1 f_1$. En este caso la Ec. (7) se convierte en:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \frac{1}{n_1 (\Delta z)^2} (K_E n)_{1+1/2} (f_2 - f_1) + \frac{p_1}{n_1} - \left(e_1 + \frac{V_d}{\Delta z} \right) f_1 \quad (8)$$

Finalmente, es posible que se desee especificar una proporción de mezcla constante, en cuyo caso $\frac{\partial f_1}{\partial t} = 0$.

10.2.3.2 Superior

Con $j = J$, la Ec. (6) se convierte en:

$$\frac{\partial f_J}{\partial t} = \frac{1}{n_J \Delta z} \left[\Phi_t + (K_E n)_{J-1/2} \left(\frac{f_J - f_{J-1}}{\Delta z} \right) \right] + \frac{p_J}{n_J} - e_J f_J \quad (9)$$

Donde Φ_t es el flujo específico hacia arriba en la parte superior de la atmósfera. La mayoría de las veces se asume que Φ_t es igual a cero (equilibrio difusivo). Sin

embargo, se quiere especificar un flujo constante hacia abajo o una velocidad constante de efusión hacia arriba V_e , de tal manera que $\Phi_t = (V_e) n_1 f_1$.

En este último caso, la Ec. (9) se puede escribir:

$$\frac{\partial f_J}{\partial z} = \frac{1}{n_J(\Delta z)^2} (K_E n)_{J-1/2} (f_{J-1} - f_J) + \frac{p_J}{n_J} - \left(e_J + \frac{V_e}{\Delta z} \right) f_J \quad (10)$$

Rara vez, si acaso, se desearía especificar una proporción de mezcla constante en el límite superior.

10.2.4 Formulación de la matriz

Volviendo a la Ec. (5) y reduciendo la rotación para definir el vector

$$\vec{x} = x_1, \dots, x_k$$

Se puede escribir a la Ec.(5) como, simplemente:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = \vec{F}(\vec{x}) \quad (11)$$

La Ec. (11) representa un conjunto K no lineal, EDOs acopladas. El sistema es “rígido” porque las especies químicas tienen un tiempo de vida marcadamente diferente. Para resolver un sistema rígido sin tener que usar saltos de tiempo muy pequeños se debe utilizar un método implícito. Es decir, los términos que están a la derecha de la ecuación ($\vec{F}(\vec{X})$) deben ser evaluados en el paso de tiempo siguiente. Esto se puede hacer exactamente porque $\vec{F}(\vec{X})$ no es lineal, se utilizara el que tal vez es el método más simple, el llamado método de Euler inverso.

Dejando que el superíndice n represente el salto de tiempo, se resuelve la Ec. (11) dejando

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \vec{F}(\vec{x}^{n+1})\Delta t \quad (12)$$

Permitir $\overrightarrow{\Delta x} \equiv \vec{x}^{n+1} - \vec{x}^n$

Se puede aproximar $\vec{F}(\vec{x}^{n+1})$ mediante el uso de un paso de la serie de Taylor:

$$\vec{F}(\vec{x}^{n+1}) \simeq \vec{F}(\vec{x}^n) + J\overrightarrow{\Delta x} \quad (13)$$

Donde $J = \frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{x}}$ es la matriz Jacobiana:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial x_K} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial F_K}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial F_K}{\partial x_K} \end{pmatrix} \quad K = I \times J$$

La matriz Jacobiana es en banda porque cada elemento x_K está relacionado únicamente con otras x del mismo nivel, más las x correspondientes a la misma especie en los puntos de la red directamente arriba y abajo. El ancho de banda de la matriz es $2I + 1$, donde I es el número de especies químicas. La longitud de la matriz es, por supuesto, igual a $K = I \times J$. Por lo tanto, J se ve así:

$$J = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \leftarrow & & 2I + 1 & & \rightarrow & & \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ K \end{matrix}$$

Ahora, usando la Ec. (13) y la definición de $\overrightarrow{\Delta x}$, se puede reescribir la Ec. (13) como:

$$[I - J\Delta t]\overrightarrow{\Delta x} = \vec{F}(\vec{x}^n)\Delta t \quad (14)$$

Donde I es la matriz identidad. Dividiendo entre el rendimiento Δt :

$$\left[\frac{1}{\Delta t}I - J\right]\overrightarrow{\Delta x} = \vec{F}(\vec{x}^n) \quad (15)$$

Teniendo en cuenta que J de un \vec{F} puede ser evaluada en el paso de tiempo n (ver Ec. (5)). Se resuelve el sistema lineal representado en la Ec. (15) utilizando el LINPACK que resuelve la matriz en banda de la subrutina SGBFA y SGBSL para encontrar un $\overrightarrow{\Delta x}$. A continuación, la proporción de mezcla de nuevas especies se calcula a partir de

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \overrightarrow{\Delta x} \quad (16)$$

Teniendo en cuenta que $\Delta t \rightarrow \infty$, este método proporciona:

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n - J^{-1}\vec{F}(\vec{x}^n) \quad (17)$$

Que puede ser reconocido como el solucionador de estados estacionarios de Newton. De hecho, es posible utilizar el programa de esta manera siempre que el inicio esté suficientemente cerca de la solución deseada.

10.2.5 Ecuación de partículas

$$\Phi_p = -K_e n \frac{\partial f_p}{\partial z} - W n f_p \quad f_p \equiv \frac{n_p}{n} \quad (18)$$

$$\frac{n_p}{\partial t} = p_p - e_p n_p - \frac{\partial \Phi_p}{\partial z} \quad (19)$$

Aquí W es positiva hacia abajo

Combinándolas, se obtiene:

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} = \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} \left(K n \frac{\partial f_p}{\partial z} + W n f_p \right) + \frac{p_p}{n} - e_p f_p \quad (20)$$

Después de diferenciaciones finitas, los coeficientes de los términos relevantes son:

$$f_p^{j+1} : \frac{(Kn)_{j+1/2}}{n_j (\Delta z)^2} + \frac{(Wn)_{j+1}}{n_j (2\Delta z)}$$

$$f_p^{j-1} : \frac{(Kn)_{j-1/2}}{n_j (\Delta z)^2} + \frac{(Wn)_{j-1}}{n_j (2\Delta z)}$$

$$f_p^j : \text{Lo mismo que para los gases}$$

10.2.6 Condición de frontera superior

Análogo a la Ec. (9) mostrada anteriormente, se puede escribir

$$\frac{\partial f_p^j}{\partial t} = -\frac{1}{n_j \Delta z} \left[\Phi_t + (Kn)_{j-1/2} \left(\frac{f_p^j - f_p^{j-1}}{\Delta z} \right) \right] + \frac{p_j}{n_j} - \left(e_j + \frac{W_j}{\Delta z} \right) f_j \quad (21)$$

Donde Φ_t es el flujo en la parte superior. Para $\Phi_t = 0$, esta ecuación es la misma que la Ec. (11) mostrada en el método, donde la velocidad de efusión V_e se sustituye por W_j (la velocidad de caída en la malla superior).

10.2.7 Condición de frontera inferior

Análoga a la Ec. (8) antes mostrada, tenemos

$$\frac{\partial f_p^1}{\partial t} = \frac{(Kn)_{3/2}}{n_1(\Delta z)^2} (f_p^2 - f_p^1) \frac{p_1}{n_1} - \left(e_1 + \frac{V_d}{\Delta z} + \frac{W_2}{\Delta z} \right) f_p^1 \quad (22)$$

Es decir la velocidad de caída sólo se añade a la velocidad de deposición asumida (Kasting, 2010).

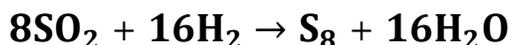
10.3 Apéndice 3. Balance del hidrógeno

El principio básico de este balanceo es que cuando una especie se oxida, otra especie debe ser reducida y viceversa. Alternativamente, se podría reformular este principio como la exigencia de que los electrones de la atmósfera estén balanceados.

En la práctica, resulta más fácil hacer un seguimiento del equilibrio redox con base en la abundancia de hidrógeno molecular, H₂. Kasting y Brown (1998) definieron las especies “redox neutras”: H₂O (para H), N₂ (para N), CO₂ (para C) y SO₂ (para S). A todas las demás especies se les asignan coeficientes redox en relación a los gases anteriores mediante la determinación de la cantidad de H₂ que se produce o se consume durante su formación a partir de las especies redox neutras. Tomemos como ejemplo la formación de peróxido de hidrógeno:



Por lo tanto en el balance de hidrógeno el coeficiente del H₂O₂ es (-1), esto quiere decir que cuando una molécula de peróxido de hidrógeno es arrastrada por la lluvia, se produce una molécula de H₂. De manera parecida, la formación de azufre elemental, S₈, puede escribirse como:



Por lo tanto, por cada molécula de S₈ que es arrastrada por la lluvia se consumen 16 moléculas de H₂, por lo que el coeficiente redox del S₈ es (+16). La emisión de gases volcánicos de especies distintas al H₂ se maneja de la misma manera y está se suma a la tasa de emisión total de gases de hidrógeno. Debido a que la estratósfera es fría y seca en todas las simulaciones, la contribución del H₂O a la suma de las proporciones de mezcla de todas las especies que contienen hidrógeno (H₂) es insignificante (Segura *et al.*, 2007).

11 BIBLIOGRAFÍA

- Brock, T. D., and Madigan, M. T. (1993) *Microbiología*, Sexta edición, Prentice Hall Hispanoamericana S. A.
- Carleton, N. P. and Traub, W. A. (1972) Detection of molecular oxygen on Mars. *Science* 177: 988-992.
- Chameides, W. L., Walker, J. C. G. (1981). Rates of fixation by lightning of carbon and nitrogen in possible primitive atmospheres. *Origins of Life and Evolution of the Biosphere* 11: 291-302.
- Chyba, C. F., and Hand, K. P. (2005) Astrobiology: The study of the living universe. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 43: 2.1–2.44.
- Des Marais, D. J., Harwit, M. O., Jucks, K. W., Kasting, J. F., Lin, D. N. C., Lunine, J. I., Schneider, J., Seager, S., Traub, W. A. and Woolf, N. (2002) Remote sensing of planetary properties and biosignatures on extrasolar terrestrial planets. *Astrobiology* 2: 153-181.
- Domagal-Goldman, S. D., Meadows, V. S., Claire, M. W. and Kasting, J. F. (2011) Using biogenic sulfur gases as remotely detectable biosignatures on anoxic planets. *Astrobiology* 11: 419-441.
- Donald, A. B. (1994) *The Molecular Biology of Cyanobacteria*, Kluwer Academic Publishers.
- Enciclopedia de los planetas extrasolares (2011) disponible en línea en <http://exoplanet.eu>
- Fegley, Jr. B., Prinn, R. G., Hartman, H. and Watkins, G. H. (1986) Chemical Effects of Large Impacts on the Earth's Primitive Atmosphere. *Nature* 319: 305–308.
- Galloway, J. N. (2003) The global nitrogen cycle. Disponible en línea en <http://adsabs.harvard.edu/abs/2003TrGeo...8..557G>

- Haqq-Misra, J. D., Domagal-Goldman, S. D., Kasting, P. J. and Kasting J. F. (2008) A revised, hazy methane greenhouse for the Archean Earth. *Astrobiology* 8: 1127-1137.
- Kaltenegger, L., Segura, A. and Mohanty, S. (2011) Model spectra of the first potentially habitable super-Earth-GJ581d. *The Astrophysical Journal* 733: 35-46
- Karner, M. B., DeLong, E. F. and Karl, D. M. (2001) Archaeal dominance in the mesopelagic zone on the Pacific Ocean, *Nature* 409: 507-510.
- Kasting, J. F. and Ackerman, T. P. (1986) Climatic consequences of very high CO₂ levels in the earth's early atmosphere. *Science* 234: 1383-1385.
- Kasting, J. F. and Brown, L. L. (1998) In the molecular origins of life: Assembling the pieces of the puzzle, editado por A. Brack, New York: Cambridge Univ. Press. pp. 35–56.
- Kasting, J. F. and Catling, D. (2003) Evolution of a habitable planet. *Annu. Rev. Astron. Astrophys* 41: 429-463.
- Kasting, J. F., Whitmire, D. P. and Reynolds, R. T. (1993) Habitable zones around main sequence stars. *Icarus* 101: 108-128.
- Lengeler, J. W., Drews, G. and Schlegel, H. G. (1999) *Biology of the Prokaryotes*, Blackwell Science.
- Line, M. R., Vasisht, G., Chen, P., Angerhausen, D. and Yung, Y. L. (2011) Thermochemical and photochemical kinetics in cooler hydrogen-dominated extrasolar planets: A methane-poor GJ436b?. *The Astrophysical Journal* 738, article id. 32.
- Macinelli, R. L., and Mckay, C. P. (1988) The evolution of nitrogen cycling. *Origins of Life and Evolution of the Biosphere* 18: 311-325.
- Madigan, M. T., Martinko, J. M. y Parker, J. (2003) *Brock biología de los microorganismos*, 10^a edición, Prentice Hall.

- Margulis, L., and Sagan, D. (1996) *¿Qué es la vida?*, Metatemas 45, Tusquets Editores.
- Mayor, M. and Queloz, D. (1995) A Jupiter-Mass companion to a solar-type star. *Nature* 378: 355-359.
- Melia, F, Falcke, H. (2001) The supermassive black hole at the galactic center. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 39: 309–352.
- Miramontes, P. (1998) La biología matemática. Disponible en línea en <http://www.matematicas.unam.mx/biomat/pedro/raymundo.pdf>
- NASA ARC (2011) disponible en línea en <http://kepler.nasa.gov/news/nasakeplernews/index.cfm?FuseAction=ShowNews&NewsID=98>
- NASA JPL (2002) disponible en línea en <http://planetquest.jpl.nasa.gov/TPF/TPFrevue/BioJun02.pdf>
- NASA JPL (2011) disponible en línea en http://planetquest.jpl.nasa.gov/TPF/tpf_signsOfLife.cfm
- NASA NAI (2004) disponible en línea en http://www.nai.arc.nasa.gov/institute/_nai.cfm#astrobiology
- NASA VPL (2011) Disponible en línea en <http://vpl.astro.washington.edu/spectra/nh3pnnlimagesmicrons.htm>
- Pavlov, A. A., Brown, L. L., and Kasting, J. F. (2001) UV shielding of NH₃ and O₂ by organic hazes in the Archean atmosphere. *Journal of Geophysical Research* 106: 23267-23287.
- Raymond, J. (2005) The evolution of biological carbon and nitrogen cycling – a genomic perspective. *Reviews in Mineralogy & Geochemistry* 59: 211-231.
- Rodríguez, B. C., Sevillano, G. F. y Subramaniam, P. (1984) la fijación de nitrógeno atmosférico una biotecnología en la producción agraria. Disponible en

línea en
http://www.ceresnet.com/ceresnet/esp/servicios/teleformacion/agroambiente/nitrogeno_atmosferico.pdf

Sagan, C., Thompson, W. R., Carlson, R., Gurnett, D. and Hord, C. (1993) A Search for Life on Earth from the Galileo Spacecraft. *Nature* 365: 715-721.

Sánchez, G. F., Miramontes, P., Gutiérrez, S. J., Soberón, M. J., Cocho, G. G., Aldama, A., Falconi, M. M., Esteva, L. y Lara-Aparicio, M. (2002) Clásicos de la biología matemática. Primera Edición, Siglo xxi editors, S. A. de C. V. México D.F.

Segura, A., Meadows, V. S., Kasting, J. F., Crisp, D., and Cohen, M. (2007) Abiotic formation of O₂ and O₃ in high-CO₂ terrestrial atmospheres. *Astronomy & Astrophysics* 472: 665-679.

Segura, A. (2010) Las huellas de la vida: caracterización remota de mundos habitables y habitados. En *Astrobiología: del Big Bang a las Civilizaciones, Tópicos Especiales en Ciencias Básicas e Ingeniería vol. 1*, Editado por Lemarchand, G. A. y Tancredi, G. UNESCO-Montevideo, pp 195 – 222.

Seinfeld, J.H. and Pandis, S. N. (2006) *Atmospheric chemistry and physics from air pollution to climate change*, Second edition, Wiley-Interscience.

Simpson, G. G. (1964) The Non-Prevalence of Humanoids. *Science* 143: 769–775.

Sociedad Mexicana de Astrobiología (2011) Disponible en línea en <http://www.nucleares.unam.mx/~soma/quees.htm>

Stanier, R. Y., Ingraham, J. L., Wheelis, M. L., and Painter, P. R. (1996) *Microbiología*, Segunda edición, Editorial Reverté.

Struve, O. (1955) Life on other worlds. *Sky and Telescope*. 14: 137–146.

Summers, D. P. and Chang, S. (1993) Prebiotic ammonia from reduction of nitrite by iron(II) on the early Earth. *Nature* 365: 630-632.

- Thompson, D. W. (1986) *On Growth and Form*. Dover Publications Inc., Nueva York.
- Toon, O. B., McKay, C. P., Ackerman, T. P. and Santhanam, K. (1989) Rapid calculation of radiative heating rates and photodissociation rates in inhomogeneous multiple scattering atmospheres. *Journal of Geophysical Research* 94: 16287-16301.
- UNAM Instituto de Geología (2011) Disponible en línea en http://www.geologia.unam.mx/igl/index.php?option=com_content&view=article&id=543:temas-estromatolitos&catid=175:temas&Itemid=222
- Venot, O., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hébrard, E. and Bounaceur, R. (2010) A new chemical model of the atmosphere of HD 209458b. European Planetary Science Congress 2010, Rome, Italy, pp 265.
- Whitman, W. B., Coleman, D. C. and Wiebe, W. J. (1998) Prokaryotes: the unseen majority. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 95: 6578-6583.
- Yung, Y. L. and McElroy, M. B., (1979) Fixation of nitrogen in the prebiotic atmosphere. *Science* 203: 1002-1004 .