



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

PROGRAMA DE POSGRADO EN ASTROFÍSICA

Instituto de Radioastronomía y Astrofísica

ESTUDIO DE LA COMPLEJIDAD QUÍMICA EN OMC-1S CON  
ALTA RESOLUCIÓN ANGULAR

TESIS

PARA OPTAR POR EL GRADO DE  
MAESTRA EN CIENCIAS  
(ASTROFÍSICA)

PRESENTA:

ESMERALDA DROUAILLET OCHOA

Tutora Principal:

DRA. AINA PALAU PUIGVERT, INSTITUTO DE RADIOASTRONOMÍA Y  
ASTROFÍSICA

MORELIA, MICHOACÁN, MÉXICO. JULIO 2021



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.



# Resumen

El estudio de la formación de estrellas de masa baja es de suma importancia para la comprensión de la formación de nuestra propia estrella, el Sol, así como la formación de nuestro sistema solar y la formación de exoplanetas. Recientemente, se ha identificado un sub-grupo de objetos estelares jóvenes de masa baja conocido como núcleos calientes de masa baja o *hot corinos*, que se caracterizan por presentar un contenido químico especialmente rico y altas temperaturas ( $\sim 100$  K). Sin embargo, aún no se sabe mucho de ellos siendo así que hasta la fecha solo una docena han podido ser detectados.

Se han utilizando observaciones de ALMA en la banda 6 (211.0-275.0 GHz) como seguimiento al artículo publicado por Palau et al. (2018) para estudiar la región OMC-1S, donde se presentó un cúmulo de fuentes milimétricas compactas con masas que cubren un rango de  $0.02 M_{\odot}$  hasta  $1.54 M_{\odot}$ , muchas de las cuales no habían sido reportadas antes. Esta región fue observada con un haz de  $0.88'' \times 0.53''$  y con una resolución espectral de 1.95 km/s en una banda de 1.87 GHz que incluye líneas de numerosas moléculas complejas y con una sensibilidad sin precedentes. Por tanto, estos datos constituyen una excelente oportunidad para llevar a cabo una búsqueda ciega de moléculas complejas en las 21 fuentes milimétricas detectadas.

El método a seguir para la caracterización de *hot corinos* es la identificación de diferentes transiciones rotacionales de una misma molécula con diferentes energías en el nivel superior para conocer la temperatura rotacional de la región mediante un diagrama rotacional, la cual se puede asociar con la temperatura cinética propia de la región bajo la suposición de equilibrio termodinámico local. Se ha hecho uso de las bases de datos de CDMS (*Cologne Database for Molecular Spectroscopy*) y JPL (*Molecular Spectroscopy Jet Propulsion Laboratory*) para obtener los parámetros moleculares de las diferentes transiciones. Con la versión 3.8 de *Python* se han generado los espectros sintéticos con los cuales se llevó a cabo la identificación de las diferentes moléculas. Así mismo, se han generado los diagramas rotacionales para cada *hot corino* detectado.

De las 21 fuentes milimétricas observadas, se han logrado identificar líneas de emisión de *moléculas orgánicas complejas* (COMs) en al menos 8 de ellas. Por la sensibilidad



que ALMA presenta, se han encontrado desde moléculas simples como el OCS y/o el isótopo del CS hasta moléculas orgánicas complejas como el CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>3</sub>CHO, HCOOCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH e incluso el g'Ga-(CH<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub>; los diagramas rotacionales se han hecho usando las transiciones de la molécula <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN, encontrando temperaturas entre 90 y 260 K. Por tanto, podemos afirmar que existen al menos 8 *hot corinos* en la región, lo cual corresponde a una tasa de detección del ~40%, unas 3 veces mayor a la encontrada en estudios previos de esta región. Además, el cálculo de la profundidad óptica del polvo en los *hot corinos* parece indicar que dicha opacidad sí puede ser un sesgo observacional para la detección de estos. Se ha llevado a cabo un estudio preliminar de los flujos moleculares en la región mediante el análisis de la transición SO(6-5) y se han encontrado indicios de flujo molecular en todos los *hot corinos*. La comparación morfológica de la emisión de COMs y de la dirección del flujo molecular sugiere que la emisión de COMs parece estar asociados a discos en al menos 3 de los 8 *hot corinos* mientras que 4 *hot corinos* parecen estar asociada a los flujos moleculares. Finalmente, se propone un cociente de abundancias del CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH respecto al CH<sub>3</sub>CHO como indicador del grado de procesamiento de las fuentes, siguiendo al modelo propuesto por Öberg et al. (2011).

Estos resultados nos indican la presencia de un cúmulo de *hot corinos*, algo no reportado hasta la fecha, e indican que probablemente la escasez de *hot corinos* es producida por una combinación de profundidad óptica del polvo elevada y falta de sensibilidad en estudios anteriores. Nuestro estudio con ALMA sugiere que puede haber más *hot corinos* que los detectados con los interferómetros anteriores a ALMA y que esta característica puede corresponder a una fase por la que pasen la mayoría de las estrellas como el Sol. Finalmente estos resultados parecen indicar que una fracción significativa de los *hot corinos* pueden estar asociados a choques y no solo a discos protoplanetarios, por lo que es importante que se tomen en cuenta las condiciones físicas de los choques en los modelos de COMs para poder explicar correctamente este tipo de observaciones.

# Agradecimientos

En especial agradecimiento por el apoyo económico por parte de UNAM-PAPIIT IN111421 y por parte de CONACyT con el número del proyecto 86372 del programa “Ciencia de frontera 2019” titulado: “*A multiscale study at the new frontier of the formation and early evolution of stars and planetary systems*”.



# Índice general

<b>Índice general</b>	<b>VII</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Formación estelar de masa baja . . . . .	1
1.1.1. Escenario de formación de las estrellas de masa baja . . . . .	1
1.1.2. Contenido químico en discos protoestelares . . . . .	4
1.2. Hot corinos . . . . .	5
1.2.1. ¿Qué son? . . . . .	5
1.2.2. Formación de COMs: fase gaseosa vs fase sólida . . . . .	7
1.2.3. ¿Dónde se forman las COMs? Discos vs choques . . . . .	8
1.2.4. Escasez: ¿sesgos observacionales o condiciones físicas? . . . . .	10
1.3. Motivación y Objetivos . . . . .	12
<b>2. Observaciones/Metodología</b>	<b>15</b>
2.1. Observaciones . . . . .	15
2.1.1. ALMA: <i>Atacama Large Millimeter/submillimeter Array</i> . . . . .	15
2.1.2. Nube Molecular de Orión 1 Sur (OMC-1S) . . . . .	18
2.1.3. Nuestras observaciones . . . . .	19
2.2. Metodología . . . . .	22
2.2.1. Ejemplos de identificación de líneas . . . . .	22
2.2.2. Generación de espectros sintéticos . . . . .	23
2.2.3. Determinación de la temperatura . . . . .	29
<b>3. Identificación de líneas moleculares y su morfología</b>	<b>35</b>
3.1. Fuente SF6b . . . . .	37
3.2. Fuente SF4 . . . . .	42
3.3. Fuente SF3 . . . . .	47
3.4. Fuente EF1 . . . . .	52
3.5. Fuente EF2 . . . . .	57
3.6. Fuente WF2c . . . . .	62
3.7. Fuente WF3 . . . . .	67
3.8. Fuente N1b . . . . .	72

---

<b>4. Análisis</b>	<b>77</b>
4.1. Diagramas rotacionales . . . . .	79
4.1.1. Caso 1: $K=5$ no detectada . . . . .	80
4.1.2. Caso 2: $K=5$ puede no estar mezclada con otra molécula . . . . .	81
4.1.3. Caso 3: $K=5$ forzosamente mezclada con otra molécula . . . . .	85
4.2. Parámetros físicos . . . . .	89
<b>5. Discusión</b>	<b>91</b>
5.1. Tasa de detección de <i>hot corinos</i> . . . . .	91
5.2. Origen de la emisión de moléculas orgánicas complejas . . . . .	94
5.3. Grado de procesado . . . . .	100
5.4. Comparación con modelos y trabajo futuro . . . . .	103
<b>6. Conclusiones</b>	<b>105</b>
<b>A. Momento cero OMC-1S (por molécula)</b>	<b>107</b>
<b>B. Espectros sintéticos de prueba</b>	<b>109</b>
<b>C. Código: Espectro sintético <math>^{13}\text{CH}_3\text{CN}</math></b>	<b>125</b>
<b>D. Código: Diagrama rotacional <math>^{13}\text{CH}_3\text{CN}</math></b>	<b>133</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>137</b>

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Formación estelar de masa baja

Las estrellas han sido los objetos de estudio básico en la astronomía al permitir estudiar y conocer nuestra propia Galaxia así como también galaxias en otras partes del Universo. Por lo tanto, su proceso de formación ha sido uno de los estudios centrales para los astrónomos. Además, entender el proceso de formación de las estrellas nos ayuda a comprender el proceso de formación del mismo Sol, y en última instancia, el surgimiento de la vida en nuestro sistema solar. En las últimas décadas, el avance en la tecnología ha permitido descubrir resultados asombrosos en esta área. A continuación presentamos un panorama general de lo que se conoce hasta la fecha sobre la formación de estrellas de masa baja, es decir, aquellas que tienen una masa igual o menor al Sol.

#### 1.1.1. Escenario de formación de las estrellas de masa baja

El medio interestelar está formado principalmente por gas y polvo, además de campos magnéticos, rayos cósmicos y radiación, siendo las dos primeras componentes la materia prima para dar inicio a la formación de estrellas. Ahora sabemos que el gas en nuestra galaxia está distribuido de manera inhómegea y concentrado en los brazos espirales en forma de nubes, constituido principalmente por hidrógeno molecular pero conteniendo también muchas otras moléculas, de las cuales la más abundante es el monóxido de carbono, CO (Dame et al. 2001). Estas estructuras han sido llamadas nubes moleculares.

Las nubes moleculares son los lugares donde se empiezan a formar las estrellas y dependiendo de la cantidad de masa que estas contengan serán llamadas pequeñas (o regulares) o gigantes. Las nubes oscuras son aquellas con una masa menor a  $10^4 M_{\odot}$ , tienen un tamaño aproximado de 0.5-1 pc y temperaturas de  $\sim 10$  K. En cambio, las nubes moleculares gigantes tienen masas mayores a  $10^4 M_{\odot}$ , tamaños de  $\sim 10$ -100 pc y temperaturas entre 10 y 50 K.

---

Las nubes moleculares gigantes son estadísticamente menos numerosas que las oscuras pero son aquellas donde se observa que  $\sim 90\%$  de las estrellas, tanto de masa baja y alta, se están formando (Estalella & Pons 1997). En las nubes oscuras, en cambio, se encuentran únicamente estrellas de masa baja. Uno de los modelos más aceptados para la formación de estrellas de masa baja fue publicado en 1987 (Shu et al. 1987). Podemos resumir el escenario propuesto de la siguiente manera:

- El proceso comienza con la acumulación lenta de material de gas y polvo en la nube molecular, figura 1.1. Esta acumulación de material hace que la densidad aumente ( $n \approx 10^6 \text{ cm}^{-3}$ ) mientras que la temperatura se mantiene constante (proceso isotérmico) debido a que la región es ópticamente delgada y permite la emisión de radiación. Estas pequeñas regiones densas dentro de las nubes, que tienen un tamaño aproximado de 0.1 pársec, se conocen como núcleos densos (o *cores*, en inglés) y tienen una rotación heredada de su nube molecular. Eventualmente, si la energía gravitatoria del núcleo supera la energía interna o cualquier otra forma de soporte contra la gravedad el núcleo entrará en una etapa de colapso gravitacional. Este paso en el proceso de formación es conocido como: *colapso en caída libre*.

La temperatura en estas regiones es tan baja ( $T \sim 10 \text{ K}$ ) y la densidad es tan alta que los átomos y las moléculas formadas en la fase gaseosa se congelan (*freeze-out*) en las superficies frías de los granos de polvo (constituidos principalmente de silicatos y carbonáceos) formando mantos de hielo en los granos.

- Como se mencionó anteriormente, las nubes son altamente inhomogéneas y estas inhomogeneidades pueden llegar a fragmentar la nube. Aquellos núcleos densos que ya han iniciado el proceso de colapso son llamados *núcleos pre-estelares*.

La fragmentación se detendrá cuando la densidad en el centro de estas pequeñas regiones sea lo suficientemente alta y se vuelvan opacas a la radiación haciendo que su temperatura, así como también su presión, aumenten hasta formar un primer núcleo cerca del equilibrio hidrostático (o protoestrella). Para una estrella de  $1 M_{\odot}$  esto ocurre en un tiempo  $\approx \times 10^5$  años mientras la envoltura sigue en caída libre hacia la estrella.

- Mientras la envoltura cae hacia la protoestrella y esta última continúa colapsando, la temperatura sigue aumentando. Cuando llega a un valor de  $\sim 2000 \text{ K}$ , el hidrógeno molecular ( $\text{H}_2$ ) de la región comenzará a disociarse en su componente atómica (H) consumiendo la energía producida por el colapso y provocando que la protoestrella pierda el equilibrio hidrostático y entonces un

---

segundo colapso ocurre.

Como la energía generada durante el colapso es absorbida por el proceso de disociación, no hay un aumento significativo de la temperatura. Solo cuando todo el  $H_2$  es convertido a H y la estrella recuperará el equilibrio hidrostático.

Cuando la temperatura alcance valores de  $\sim 10^4$  K el H y el He (proveniente tras el enriquecimiento químico debido a la expulsión de las capas externas de las estrellas evolucionadas cercanas) serán ionizados y cuando la protoestrella sea totalmente ionizada entonces volverá a un estado de equilibrio hidrostático. A este punto, la protoestrella ahora es más pequeña, más caliente y más densa que al inicio.

- La protoestrella continuará acretando material pero esta vez a través de un disco protoestelar ubicado en su ecuador, haciendo que la temperatura y densidad aumenten hacia su centro. Durante este proceso la protoestrella debe eyectar material a alta velocidad para conservar su momento angular y una forma de hacerlo es por los polos formando lo que se conoce como *flujos moleculares*.
- Conforme la protoestrella ha acretado más y más materia, el material de la envoltura se va dispersando dejando visible ahora el objeto en su interior (que ya se encuentra en *pre-secuencia principal*) y el disco con una rotación kepleriana, ahora llamado *disco proto-planetario*. Esto ocurre en un tiempo  $\approx 1 \times 10^7$  años.
- El material del disco protoplanetario servirá no solo para continuar alimentando la protoestrella, sino también como material para la formación de los planetas. Nuestra protoestrella desarrollará *vientos estelares* capaces de dispersar todo el material restante de la envoltura, dejando así finalmente a la estrella en secuencia principal (a una temperatura  $\sim 10^6$  K) e iniciando su evolución estelar en la conocida ZAMs (por sus siglas en inglés, *Zero Age Main Sequence*).

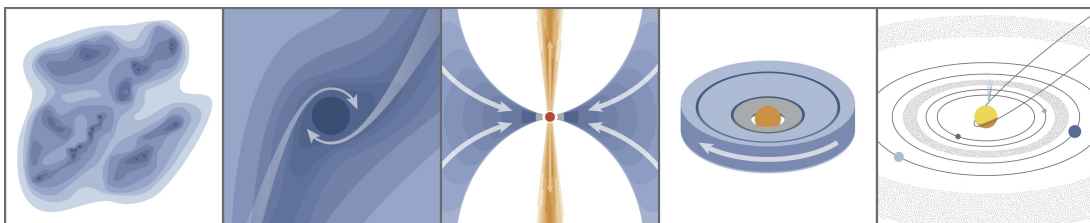


Figura 1.1: Boceto sobre la formación de una estrella de masa baja tomado de Öberg & Bergin (2020).



---

## 1.1.2. Contenido químico en discos protoestelares

Como se vio en la sección anterior, durante la formación de una estrella de masa baja se desarrolla un disco protoestelar el cual ayuda a remover momento angular, pero además también regula el transporte de materia hacia la protoestrella. Estos discos protoestelares han sido estudiados mediante la emisión térmica del polvo en longitudes de onda infrarroja y (sub)milimétrica.

De acuerdo a Henning & Semenov (2013), los discos protoestelares se dividen en dos regiones: una interna ( $r < 20$  AU) estudiada principalmente en el infrarrojo y una externa ( $r > 20$  AU) estudiada en el (sub)milimétrico. De esta forma se ha encontrado que:

- La región interna está protegida de la intensa radiación externa (principalmente UV, rayos cósmicos y rayos X). En el infrarrojo ha sido posible encontrar la emisión de  $\text{H}_2\text{O}$ , OH y algunas moléculas complejas. Cuando la temperatura tiene valores entre 100 y 1000 K se pueden presentar las transiciones rotacionales-vibracionales de, por ejemplo, el CO a  $4.7 \mu\text{m}$  observado en mediano y cercano infrarrojo (MIR y NIR, por sus siglas en inglés). También se ha observado el HCN y el  $\text{C}_2\text{H}_2$ . Con Spitzer ha sido posible detectar el  $\text{CO}_2$ , CN, HCN,  $\text{C}_2\text{H}_2$ . Todas estas en la fase gaseosa.
- En las regiones más externas se ha podido observar  $\text{H}_2\text{O}$  y OH en el lejano infrarrojo (FIR, por sus siglas en inglés); varios iones como por ejemplo el  $\text{H}_3^+$  y el  $\text{He}^+$ . Este último es capaz de destruir el enlace del CO y así devolver material de carbono y oxígeno al medio. Además, se ha encontrado que muchas moléculas están congeladas (*freeze-out*) en un manto de hielo en las superficies de los granos de polvo, donde pueden ser químicamente activas.

Para esta región la química puede variar de manera vertical, es decir, el disco en las regiones externas está dividido en tres capas: la superficie, donde la radiación del FUV, algunos rayos cósmicos y los rayos X juegan un papel importante en la química que se desarrolla; una región tibia (30-70 K) donde su química está basada principalmente en el carbono y una región más cercana al plano medio del disco, donde la temperatura es menor a 20 K, haciendo que la mayoría de las moléculas estén congeladas y donde es posible la hidrogenación de las moléculas en las superficies de los granos.

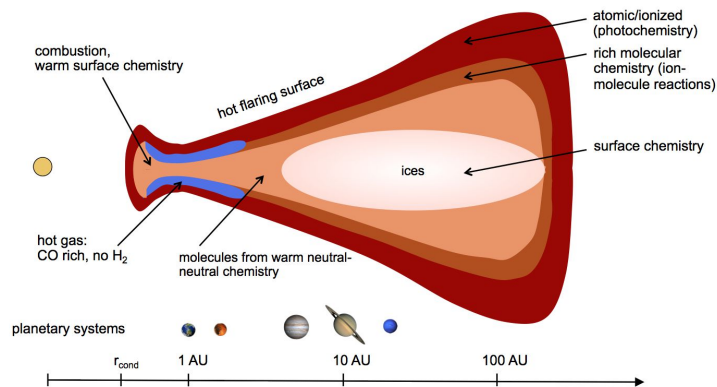


Figura 1.2: Boceto de la estructura química presentada en un disco protoplanetario. Imagen tomada de Kamp (2019).

Algunas moléculas han sido detectadas en los discos de las estrellas en formación, por ejemplo, el SO ha sido detectada en el disco gaseoso alrededor de la estrella Herbig Ae AB Aur (Rivière-Marichalar et al. 2020) y el H<sub>2</sub>S en el disco denso alrededor de GG Tau A (Phuong et al. 2018) con ayuda del interferómetro NOEMA (por sus siglas en inglés *The Northern Extended Millimeter Array*). Sin embargo, a los inicios del funcionamiento del interferómetro de última generación, *Atacama Large Millimeter/submillimeter Array* (ALMA) se detectó la emisión de la molécula *c*-C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> o ciclopropenilideno en el disco protoplanetario TW Hya (Qi et al. 2013). A partir del funcionamiento de ALMA ha sido posible la observación de una rica química en estos discos protoplanetarios, por ejemplo, la molécula de SO<sub>2</sub> en el disco de Oph-IRS 48 (Booth et al. 2021) pero también la detección de moléculas orgánicas como: HCN, CN, CS, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H, H<sub>2</sub>CS, *c*-CH<sub>3</sub>H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>CO, CH<sub>3</sub>OH, HCOOH, HC<sub>3</sub>N, H<sub>3</sub>CN, entre otras (Öberg & Bergin 2020).

## 1.2. Hot corinos

### 1.2.1. ¿Qué son?

La formación de las estrellas de masa baja ha sido un tema investigado desde hace varios años atrás, como ya se mencionó. Sin embargo, hay un resultado observacional encontrado en algunas protoestrellas de masa baja que todavía no se entiende bien y que coincide con una característica de algunas protoestrellas de masa alta.

Se sabe que las estrellas masivas (>8 M<sub>⊙</sub>) probablemente empiezan su formación en las llamadas nubes moleculares gigantes. Este proceso de formación, revelado gracias a observaciones interferométricas, incluye varios fenómenos físicos que involucran tanto gas molecular como gas ionizado, entre ellos: flujos moleculares (*outflows*),

regiones HII ultracompactas (UC HII), emisión máser y núcleos moleculares calientes (*hot cores*) (Herbst & Van Dishoeck 2009) (ver figura 1.3). En Motte et al. (2018) se puede encontrar uno de los escenarios con las diferentes etapas propuestas para la formación de estas estrellas de masa alta.

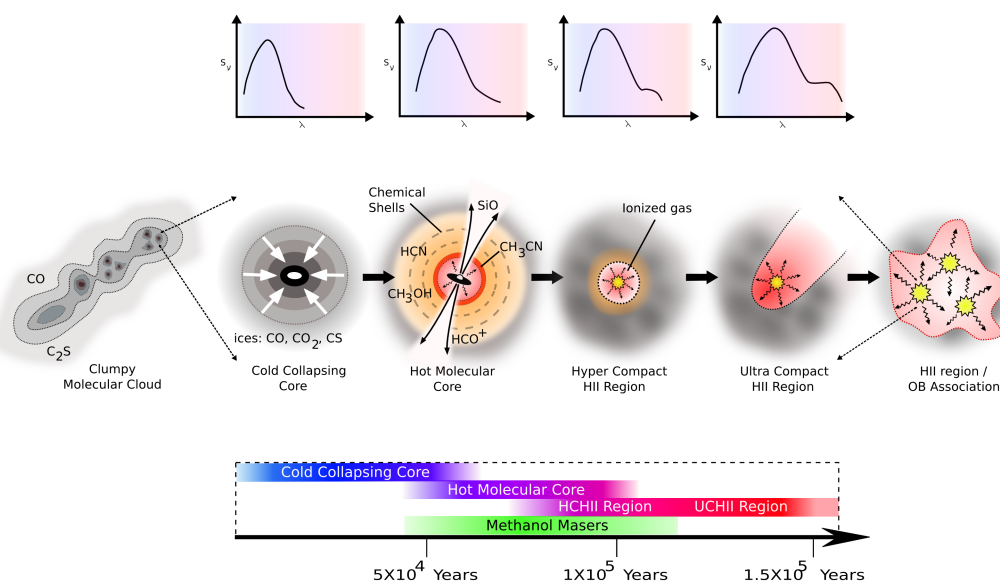


Figura 1.3: Representación de las principales etapas durante la evolución de las estrellas de masa alta. Imagen tomado de Purcell (2018).

Estos núcleos moleculares calientes son regiones alrededor de las jóvenes protoestrellas masivas donde el gas es lo suficientemente denso y caliente ( $n > 10^6 \text{ cm}^{-3}$  y  $T > 100 \text{ K}$ ) como para producir una riqueza química muy considerable. Esta riqueza química es generada por la evaporación de los mantos de hielo de los granos de polvo, debido a la radiación de la misma protoestrella y el disco de acreción, incluso también debido a ondas de choque que calientan el gas. Además, se cree que estos núcleos calientes dan paso a la formación de las regiones HII ultracompactas (Charnley 2011).

Las primeras detecciones de la emisión molecular en estos núcleos calientes fueron realizadas con radiotelescopios de antena única (Blake et al. 1987; Schilke et al. 2001) más tarde con ALMA ha sido posible obtener una mejor sensibilidad y resolución angular permitiendo detectar moléculas cada vez más complejas (Coletta et al. 2020; Willis et al. 2020; Law et al. 2021). Algunas de las moléculas orgánicas complejas (COMs por sus siglas en inglés) encontradas son: el metanol (CH<sub>3</sub>OH), el dimetil éter (CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>), el metil formato (CH<sub>3</sub>OCHO), el acetaldehído (CH<sub>3</sub>CHO), el formaldehído (CH<sub>2</sub>O), el etilenglicol (CH<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub>, entre otras (Charnley 2011; Herbst

---

& Van Dishoeck 2009).

Lo que resulta muy intrigante es que estas regiones densas, calientes y con emisión de moléculas complejas no son exclusivas de las regiones de formación de alta masa sino que también se han observado en regiones de formación de estrellas de masa baja hace menos de 20 años, encontrando abundancias relativamente grandes. Los análogos de los *hot cores* para el caso de las estrellas de masa baja se denominan “núcleos calientes de masa baja” o *hot corinos* (Ceccarelli 2004; Bottinelli et al. 2004). Estos *hot corinos* son más compactos ( $\leq 100$  AU) involucrando una menor cantidad de masa. El primer *hot corino* descubierto fue IRAS 16293-2422 y hasta la fecha solamente unos pocos más han sido detectados (Cazaux et al. 2003; De Simone et al. 2020).

### 1.2.2. Formación de COMs: fase gaseosa vs fase sólida

Las COMs (por sus siglas en inglés, *complex organic molecules*) son aquellas moléculas formadas por 6 o más átomos y al menos uno de estos es un átomo de carbono; el hidrógeno y el oxígeno son átomos que también se pueden encontrar con frecuencia en estas COMs (Skouteris et al. 2018). Es importante mencionar que esta definición de “complejidad” solo aplica para el medio interestelar, no así rigurosamente para la química terrestre, de esto que algunas veces podamos encontrar terminologías como: iCOMs (*interstellar complex organic molecules*) (Ceccarelli et al. 2017). Anteriormente se ha mencionado que una característica de los *hot cores* y *hot corinos* es la riqueza química y que esta está producida en gran parte por la emisión de COMs; a la fecha han sido detectadas más de 200 moléculas en el medio interestelar de las cuales el  $\sim 35\%$  son COMs (CDMS 2021).

Para tratar de entender la formación de las COMs se considera un proceso de tres fases (Herbst & Van Dishoeck 2009)

- Una fase inicial fría
- Una fase de calentamiento
- Una fase de *hot corino*

En la fase inicial fría, las temperaturas pueden tener valores de  $\sim 10$  K permitiendo que los granos de polvo desarrollen un manto de hielo en su superficie donde algunos átomos y moléculas como el CO y cadenas de carbono saturadas, son adheridos; estos mantos de hielo pueden ser formados, por ejemplo, de agua (H<sub>2</sub>O) o dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>); el metanol y el etanol pueden ser sintetizados en esta fase (Vasyunin & Herbst 2013; Herbst & Van Dishoeck 2009); además, las reacciones de ion-molécula así como las reacciones neutro-neutro son las predominantes en esta fase (Vasyunin & Herbst 2013).

Durante esta fase, algunos fotones o partículas energéticas (rayos cósmicos) chocan

---

contra los granos de polvo disociando algunas moléculas en sus radicales (por ejemplo, el  $\text{CH}_3\text{OH}$  en  $\text{CH}_3\text{O}$ ) dando paso a que algunas COMs sean formadas por la recombinación de estos radicales (la formación del  $\text{HCOOCH}_3$  se da de esta manera); también se puede dar la formación de COMs por un proceso conocido como desorción no térmica (Vasyunin & Herbst 2013).

Cuando el colapso pasa de isotérmico a adiabático (después de la generación del primer núcleo hidrostático), la temperatura y densidad del núcleo protoestelar comenzarán a aumentar; este proceso hace que el gas y el polvo de la envoltura y el disco aumenten su temperatura y así los mantos de hielo en los granos de polvo comiencen a sublimarse.

Así finalmente, cuando  $T \sim 100\text{-}300$  K, lo que se puede observar es un enriquecimiento químico en estas regiones dando paso a los *hot cores* y *hot corinos*. En esta etapa la única química que puede continuar es en fase gaseosa. La temperatura alcanzada permite que las reacciones que se den sean tanto endotérmicas como exotérmicas (Herbst & Van Dishoeck 2009).

Sin embargo, recientemente este proceso de formación de COMs ha comenzado a ser tema de debate dado que ha sido posible la detección de estas COMs en regiones muy frías, dando indicios de que la formación de material orgánico en la Galaxia puede comenzar en etapas más tempranas de lo mencionado anteriormente (Vasyunin & Herbst 2013). De esta forma, ha sido reportada la emisión de moléculas complejas como por ejemplo: el acetaldehído ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ), el dimetil éter ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ), el metil formato ( $\text{HCOOCH}_3$ ), en regiones con temperaturas  $\sim 10$  K como lo son los núcleos de las nubes oscuras y núcleos preestelares (Jiménez-Serra et al. 2016; Bacmann et al. 2012; Loison et al. 2016; Vastel et al. 2014).

Las detecciones anteriores implicarían que la química en la superficie de los granos de polvo no es la única responsable de la sintetización para las COMs observadas sino que además alguna química en la fase gaseosa debe estar ocurriendo (Skouteris et al. 2018). De esta forma, posiblemente la química en las regiones de formación estelar podría ser mejor descrita con ambas fases acopladas (gas-grano) (Jørgensen et al. 2020).

### 1.2.3. ¿Dónde se forman las COMs? Discos vs choques

Como se vio en la sección anterior, la formación de las moléculas complejas observada en los *hot cores* ha sido asociada principalmente a la fase de calentamiento dado por la radiación de la estrella naciente y por tanto se ha asociado en muchas ocasiones a los discos protoestelares.

Sin embargo, la emisión de estas moléculas ha sido también observada en regiones donde hay choques, es decir, en las regiones donde los flujos moleculares de las

jóvenes estrellas chocan con el medio interestelar circundante. La química observada dependerá de la velocidad del choque: si estos tienen velocidades menores a 40 km/s entonces pueden calentar el gas a  $\sim 1000$  K propiciando algunas reacciones del tipo neutro-neutro, si son choques con mayor velocidad entonces disociarán e ionizarán el gas calentandolo a una temperatura de hasta  $10^5$  K (Van Der Tak 2005).

Estos choques pueden tanto evaporar los hielos de los granos como hasta destruir los mismos granos, enriqueciendo el medio (Herbst & Van Dishoeck 2009). La primera detección de emisión molecular compleja en un choque se dio cerca de una estrella de masa baja, L1157-B1 (Arce et al. 2008). Este choque ha sido ampliamente estudiado con diferentes telescopios dejando un gran inventario molecular (Jørgensen et al. 2020).

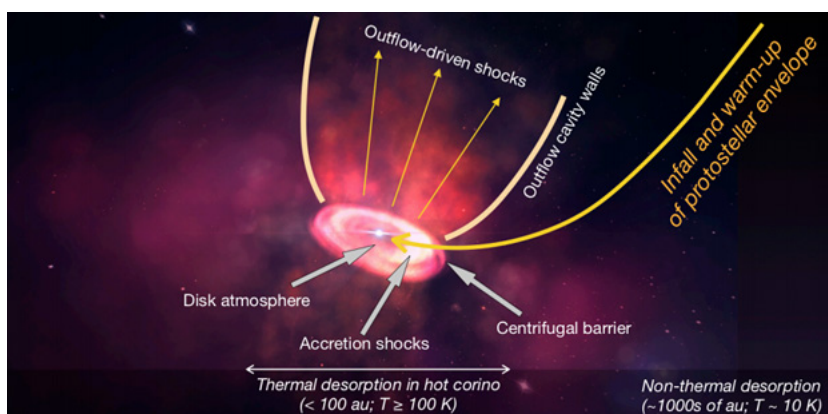


Figura 1.4: Representación de una joven protoestrella de masa baja y las componentes estructurales que son importantes para su química. Imagen tomada de Jørgensen et al. (2020).

Estos flujos con emisión de COMs han sido observados hacia regiones de masa baja, intermedia y alta (Chandler et al. 2005; Leurini et al. 2011; Moscadelli et al. 2013; Öberg et al. 2011; van Kempen et al. 2014; Codella et al. 2017; Ceccarelli et al. 2017; Codella et al. 2020; De Simone et al. 2020).

En la mayoría de casos de fuentes de masa intermedia/alta la emisión no puede ser resuelta, no pudiendo discernir si la emisión viene del disco o del flujo. Sin embargo, estudios de COMs con resolución angular por debajo del segundo de arco han permitido empezar a descubrir si las COMs vienen del disco o del flujo. En Palau et al. (2011) fue posible resolver la emisión observada de algunas COMs ( $(\text{CH}_2\text{OH})_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ , entre otras) asociándola principalmente al disco de acreción. En cambio, en Palau et al. (2017) se encontró emisión de COMs tanto proveniente del disco como del flujo molecular con abundancias comparables o incluso mayores en el flujo (por ejemplo, para el  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ).

Para el caso de estrellas de masa baja se han detectado algunas COMs en el disco, por ejemplo  $\text{CH}_3\text{OH}$  y/o  $\text{CH}_3\text{CN}$ , que parece no provenir directamente del plano medio de

---

este seno de regiones a una mayor altura (Öberg et al. 2015; Walsh et al. 2016). Una forma de complementar las observaciones es mediante el desarrollo de modelos o simulaciones que podrían permitir obtener algunas predicciones sobre la composición química esperada en estos discos y flujos moleculares.

De esta manera, en Coutens et al. (2020) se desarrolló una simulación magnetohidrodinámica (MHD) en 3D para observar la evolución química desde la fase del núcleo frío hasta la formación de un joven disco protoplanetario, encontrando que durante la formación de este último se alcanzan valores altos en las abundancias de algunas COMs. Mientras en Panoglou et al. (2012) mediante un modelo MHD aplicado a un disco con vientos encuentran que estos vientos al ser lanzados más allá de una distancia entre 0.2-1 AU pueden producir *jets*/vientos moleculares con velocidades mayores a  $\simeq 100$  km/s en estrellas jóvenes de masa baja, siendo  $\simeq 0.2$  AU para los objetos de Clase 0,  $\simeq 1$  AU para los de Clase I y  $>1$  AU para los de Clase II, en donde, las abundancias para el H<sub>2</sub> y CO pueden incrementar conforme la fuente evoluciona en acuerdo a observaciones recientes. Sin embargo, el trabajo para modelos que incluyan MHD con química compleja ha sido poco.

Otro estudio importante es el de Aikawa et al. (2012), que modeló la evolución de las abundancias de algunas COMs desde la fase pre-estelar hasta la protoestelar, incluyendo también la dependencia radial de las abundancias en el disco protoestelar. En este trabajo se encontró que se espera que moléculas como el OCS y el CH<sub>3</sub>CHO sean más extendidas, llegando hasta radios de centenares de AU, mientras que otras moléculas como el CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>OH y HCOOCH<sub>3</sub> sean más compactas, llegando hasta radios por debajo de las 100 AU.

#### **1.2.4. Escasez: ¿sesgos observacionales o condiciones físicas?**

Hasta la fecha solo una docena de *hot corinos* se han reportado en la literatura (ver De Simone et al. (2020) y las referencias ahí citadas) presentando así un impedimento en la comprensión de la formación de las estrellas de masa baja. Por un lado, una posible explicación para su escasez podría deberse a efectos instrumentales referida a la falta de sensibilidad de los instrumentos utilizados para su búsqueda. Por otro lado, la escasez de *hot corinos* podría tener una explicación física, por ejemplo, podría corresponder a una etapa muy corta del proceso de formación estelar, o bien podría estar relacionado con unas condiciones iniciales de la nube madre especialmente favorables para la formación de las moléculas complejas.

Un sesgo observacional se encuentra en la opacidad del polvo. Esta opacidad es una medida de cuánta radiación permiten los granos de polvo atravesar en una región y depende de la frecuencia  $\nu$  y de las propiedades físicas propias del polvo como su composición, masa y tamaño (Chacón-Tanarro et al. 2019). Esta opacidad del polvo puede ser alta en las regiones donde se encuentren objetos de Clase 0/I debido a sus

---

altas densidades columnares (Galván-Madrid et al. 2018). De esta forma, la opacidad del polvo en los *hot corinos* podría provocar una alta absorción de la emisión de las COMs, haciendo que las abundancias calculadas hayan sido subestimadas y/o que la riqueza química observada no sea propia de los objetos estudiados (De Simone et al. 2020).

De entre los estudios sobre *hot corinos* que se encuentran en la literatura es importante mencionar el estudio del sistema binario NGC 1333 IRAS 4A localizado en la nube de Perseo. Este es un sistema previamente estudiado a longitudes de onda milimétricas donde se había identificado únicamente a la fuente IRAS 4A1 como un *hot corino* mientras que su compañero no parecía serlo, es decir, aparentaban tener una complejidad molecular distinta. Ahora, De Simone et al. (2020) presenta observaciones en longitudes centimétricas usando el VLA (por sus siglas en inglés: *Very Large Array*) para disminuir el problema de la opacidad y tratar de responder por qué es tan difícil encontrar *hot corinos* y por qué algunos sistemas binarios parecen ser químicamente diferentes. En este estudio se concluye que el problema de la escasez podría ser debido a que la mayoría de las observaciones hacia estos objetos se han hecho en longitudes de onda (sub)milimétricas donde la absorción del polvo es significativa, proponiendo el realizar observaciones de manera complementaria a longitudes más largas (centimétricas) dado que el objeto IRAS 4A2 también demostró ser un *hot corino* y la opacidad del polvo en la región no permitía su identificación correcta.

Al igual que en De Simone et al. (2020), en Beltrán & Rivilla (2018) se mencionan las ventajas que se tiene al hacer observaciones tanto milimétricas como centimétricas de las regiones de formación estelar de masa alta y baja en busca de núcleos calientes. En este trabajo se advierte que con observaciones milimétricas podrían presentarse los siguientes problemas:

- la mezcla con otras líneas (más si los anchos de las líneas son afectados por ejemplo por turbulencia),
- el límite de confusión no permitiría la adecuada identificación de las líneas observadas y además,
- la opacidad tan alta absorbería algunas de las líneas.

Algunos de estos problemas podrían solucionarse con las observaciones centimétricas. Por ejemplo, la mezcla de las líneas y la opacidad, dado que a estas longitudes la emisión es ópticamente delgada. Estas observaciones además son importantes para detectar COMs cada vez más complejas (o pesadas) ya que, por ejemplo, las moléculas con más de 8 átomos tienen transiciones a frecuencias menores de 50 GHz; además, son importantes para el estudio de los discos circunstelares en especial en aquellas donde aún no se ha confirmado que presenten discos de acreción. También mencionan la importancia de la sensibilidad en las observaciones dado que nos



---

permitirá la identificación de nuevas especies, mientras que la resolución nos permitirá conocer la distribución espacial y conocer si la emisión proviene de la misma región. Así, las observaciones centimétricas y milimétricas son complementarias entre sí para tener un escenario completo de la emisión de las moléculas orgánicas complejas.

## 1.3. Motivación y Objetivos

### Motivación

Tal como se ha explicado en las secciones anteriores, los modelos químicos que explican la formación de las moléculas complejas en los *hot cores* y *hot corinos* consideran tres fases: una primera fase fría, una segunda fase de calentamiento por la que las moléculas son evaporadas de los granos, y una tercera fase donde tienen lugar reacciones posteriores en fase gaseosa. En principio estas tres fases se dan todas durante las primeras etapas de formación de una estrella, con lo cual sería de esperar que todos los objetos estelares jóvenes pasaran por una fase de *hot core* o *hot corino*.

Para tener una estimación del tiempo de vida en la fase de *hot core/corino* es necesario hacer observaciones ciegas de muestras de objetos estelares jóvenes para determinar su tasa de detección de *hot corinos*. En cambio, tal como se ha mencionado anteriormente, tan solo se conocen una docena de *hot corinos*, y todavía no está claro hoy en día cuál es la razón de dicha escasez. Si dicha escasez fuera directamente el producto de un tiempo de vida muy corto este sería tremendamente pequeño, lo cual nos debería llevar probablemente a revisar los modelos químicos.

Antes de empezar a pensar en una posible explicación física, es importante asegurarse de que esta escasez no sea debida a sesgos observacionales. Entre los sesgos observacionales más destacados están el efecto de la opacidad del polvo y la falta de sensibilidad. Muchos de los estudios hechos hasta la fecha en busca de *hot cores* y *hot corinos*, sobre todo los estudios ciegos que abarcan grandes muestras de fuentes, se han llevado a cabo con antenas únicas. Pero una antena única observando una fuente mucho más pequeña que su haz diluirá la emisión en un factor igual al factor de llenado  $\sim$  tamaño fuente/(tamaño fuente + tamaño haz) con lo cual dicho factor puede llegar a ser muy pequeño haciendo así muy pequeña la temperatura medida en la antena. Este sería un sesgo observacional por falta de sensibilidad.

Una forma clara de solucionar este problema es la observación interferométrica, que permite obtener resoluciones angulares mucho más pequeñas que las que se consiguen con las antenas únicas y obtener factores de llenado cercanos a la unidad. El problema es que el tiempo de observación con un interferómetro suele ser muy caro y prácticamente no se han llevado a cabo búsquedas ciegas de *hot corinos* con interferómetros, salvo en el trabajo publicado muy recientemente de Yang et al. (2021)

---

donde se lleva a cabo una búsqueda ciega de *hot corinos* en la nube de Perseo con ALMA.

En Yang et al. (2021) reportan una tasa de detección de *hot corinos* en Perseo del 58 %. Pero como este trabajo es la única búsqueda ciega de *hot corinos* hecha con interferómetros hasta la fecha, es muy importante ampliar este tipo de estudios en otras regiones de formación estelar para evaluar si esta tasa de detección encontrada en Perseo es una excepción o es la tasa habitual en la Vía Láctea.

## Objetivos

Los objetivos a lograr del presente trabajo son:

1. Realizar una búsqueda ciega de moléculas complejas en las 21 fuentes de continuo con alta resolución y alta sensibilidad de *hot corinos* en una región de formación estelar muy joven donde se han descubierto decenas de núcleos densos en el continuo milimétrico.
2. Determinar las condiciones físicas del gas y polvo donde los *hot corinos* se están formando.
3. Estudiar la cinemática y morfología asociada a los *hot corinos* y su posible relación con discos protoestelares o flujos moleculares.

Para lograr estos objetivos se han utilizado observaciones milimétricas hechas con ALMA en la banda 6 (211.0-275.0 GHz) hacia la región sur de la nube molecular de Orión 1 (OMC-1S), donde se han detectado 31 fuentes milimétricas compactas con masas que cubren un rango de  $0.02 M_{\odot}$  hasta  $1.54 M_{\odot}$ , que forman parte de 19 núcleos densos (Palau et al. 2018). Aunque los datos de ALMA no son a longitudes de onda centimétricas (con lo cual la profundidad óptica del polvo puede ser no despreciable) la sensibilidad que provee ALMA mejora por mucho la obtenida con los interferómetros anteriores, por lo que este conjunto de datos es ideal para comenzar a abordar los objetivos aquí mencionados.



# Capítulo 2

## Observaciones/ Metodología

### 2.1. Observaciones

#### 2.1.1. ALMA: *Atacama Large Millimeter/submillimeter Array*

El *Atacama Large Millimeter/submillimeter Array* o ALMA, es un arreglo de antenas que funcionan en conjunto mediante la técnica de interferometría. Fue un proyecto que inició desde 1980. Tras un trabajo exhaustivo de construcción finalmente comenzó operaciones dos años antes de su oficial inauguración en 2013. Es un proyecto en colaboración con la ESO, el NRAO, el NAO y la república de Chile, donde esta última es la ubicación del arreglo, a 5000 metros de altura en el norte del desierto de Atacama, ver figura 2.1.



Figura 2.1: *Atacama Large Millimeter Array (ALMA) en el plano de Chajnantor en Chile.*

ALMA está compuesto en total por 54 antenas de 12 metros de diámetro y 12 antenas de 7 metros. Su distribución es tal que, 50 antenas de 12 metros pueden formar una línea de base (distancia entre dos antenas) de 150 metros hasta  $\sim 16$  kilómetros, mientras que un arreglo más compacto es usado para observar objetos con emisión más extendida y débil, conocido como ACA (por sus siglas en inglés, *Atacama Compact Array*). Este arreglo, renombrado como "Morita", está compuesto por 12 antenas de 7 metros que son

usadas como un interferómetro con líneas de base desde 8.5 metros hasta 33 metros, y 4 antenas de 12 metros son usadas para observaciones como antenas únicas, ver figuras 2.2.



(a) Antenas en el arreglo compacto

(b) Distribución del arreglo compacto

Figura 2.2: Atacama Compact Array, ACA

Cada antena de ALMA cuenta con receptores que pueden observar a diferentes rangos de frecuencia cada uno. Estos son referidos de acuerdo a la banda que estén cubriendo y fueron diseñados de acuerdo a las ventanas de transmisión de la atmósfera, ver figuras 2.3 y 2.4. En la tabla 2.1 podemos ver cada banda que cubre ALMA así como el rango correspondiente en frecuencia y longitud de onda en que observan.

Los datos recopilados por estos receptores son entregados al usuario como cubos de datos que pueden almacenar hasta 7680 canales de frecuencia. Los anchos que cubren estos canales tienen un rango entre 3.8 kHz y 15.6 MHz.



(a) Banda 5

(b) Banda 9

Figura 2.3: Receptores de ALMA

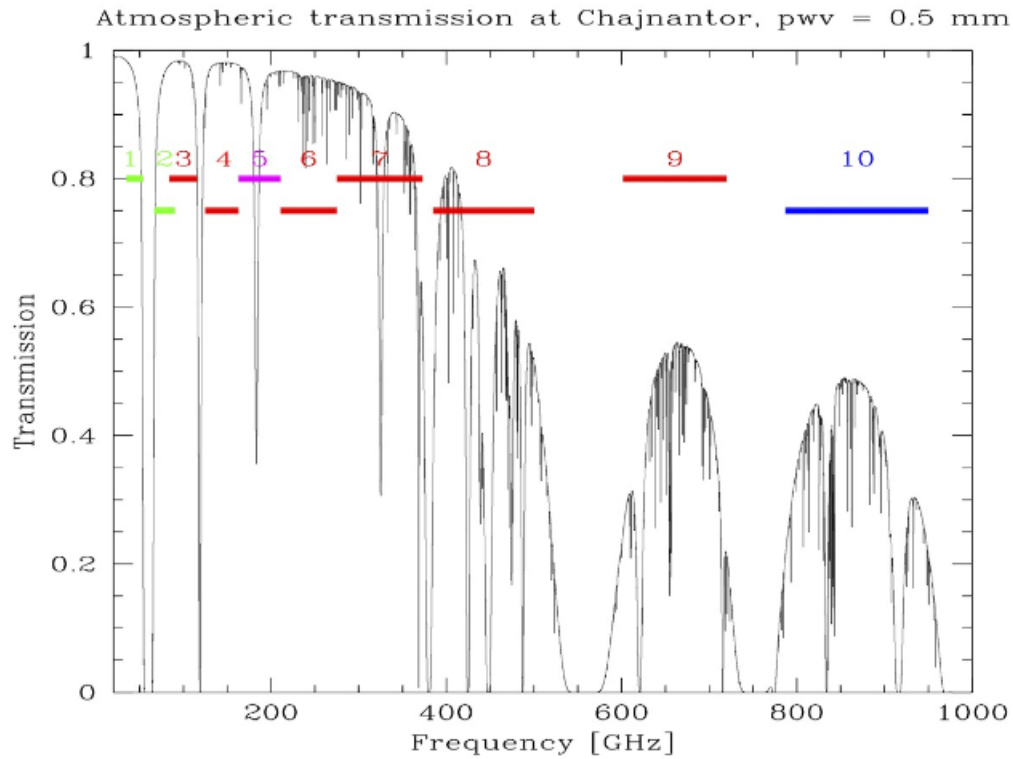


Figura 2.4: Bandas que cubre ALMA superpuestas a la transmisión atmosférica en función de la frecuencia.

Banda	Longitud de onda (mm)	Rango de frecuencia (GHz)	Primera luz (año)
3	2.6 - 3.6	84 - 116	2009
4	1.8 - 2.4	125 - 163	2013
5	1.4 - 1.8	163 - 211	2016
6	1.1 - 1.4	211 - 275	2009
7	0.8 - 1.1	275 - 373	2009
8	0.6 - 0.8	385 - 500	2013
9	0.4 - 0.5	602 - 720	2013
10	0.3 - 0.4	787 - 950	2012

Tabla 2.1: Bandas receptoras de ALMA

Los datos obtenidos por ALMA deben ser calibrados o corregidos por diferentes efectos que afectan la señal de la fuente astronómica observada. En primer lugar debe haber una corrección debido a la atmósfera la cual puede absorber parte de la señal astronómica. Para esto ALMA cuenta con diferentes modelos climáticos que monitorean la región y además, cada antena de ALMA cuenta con radiómetros que

---

miden la cantidad de vapor de agua (PWV, por sus siglas en inglés *Precipitable Water Vapour*) en la línea de visión que afectan la fase de la señal. En el llano de Chajnantor el valor del PWV es normalmente de 1.0 mm.

Posterior a esto, es importante calibrar la fase y amplitud de la señal como función del tiempo y la frecuencia. Para esto, se usa un calibrador de fase que debe ser una fuente puntual cercana a la fuente estudiada y un calibrador de pasabanda que debe ser una fuente muy brillante. Además necesitaremos un calibrador de flujo para convertir la amplitud de la señal a las unidades usadas en radioastronomía, el Jansky. Para esto se necesita una fuente con flujo constante y muy bien conocido. ALMA cuenta con un catálogo de  $\sim 3000$  fuentes que son usadas como fuentes de calibración, en su mayoría cuásares en el régimen milimétrico y sub-milimétrico.

### 2.1.2. Nube Molecular de Orión 1 Sur (OMC-1S)

En el presente trabajo se estudiará la riqueza química en la región de formación estelar de masa baja e intermedia en la nube molecular de Orión 1 Sur, OMC-1S (por sus siglas en inglés, *Orion Molecular Cloud*).

La nube molecular de Orión es un complejo de formación estelar localizado a  $388 \pm 5$  pársecs (Kounkel et al. 2017) que ha sido ampliamente estudiado a diferentes longitudes de onda. Alberga tres de las regiones más importantes de formación estelar: el Trapecio, el complejo de Orión BN-KL y la región OMC-1S. Particularmente, OMC-1S se encuentra en el filamento integral de Orión a  $\sim 1'$  al suroeste del cúmulo del Trapecio y  $100''$  al sur de Orión KL, ver figura 2.5.

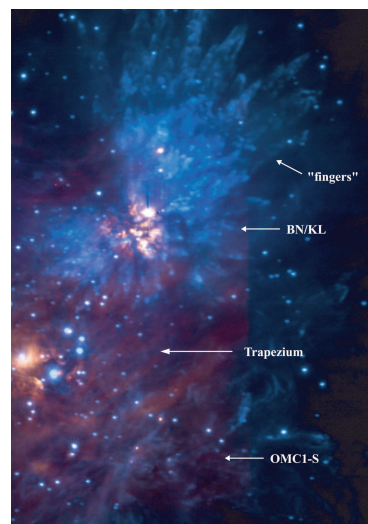


Figura 2.5: Imagen compuesta en el infrarrojo de la Nube de Orión donde se puede ver la distribución espacial de OMC-1S, el Trapecio y Orión BN-KL. Imagen tomada de O'dell et al. (2008)



OMC-1S es una región que ha llamado la atención de la comunidad científica desde la primera detección de una fuente en el lejano infrarrojo por Keene et al. (1982). Cuenta con una luminosidad de  $\sim 10^4 L_{\odot}$  y una masa de  $\sim 100 M_{\odot}$  (Mezger et al. 1990). Presenta diversos fenómenos astrofísicos como: máseres de agua (Gaume et al. 1998), flujos moleculares y objetos Herbig-Haro (HH) (Ziurys et al. 1990; Zapata et al. 2004; Smith et al. 2004).

Se cree que esta región es la más joven y activa. Incluso compartiendo similitudes con Orión BN-KL se cree que es una región menos evolucionada y los flujos moleculares y los objetos HH dan evidencia de un cúmulo estelar embebido en la región (Zapata et al. 2007; Bachiller 1996)

La región de OMC-1S además ha presentado la emisión de algunas moléculas complejas. En Ikeda et al. (2007) han hecho un mapeo de toda la nube molecular de Orión A, encontrando que una de las fuentes estudiadas (identificada con el número 112) en la nube OMC-1 tiene emisión de  $H^{13}CO^+$ . Por otro lado, Zapata et al. (2007) han encontrado que dos fuentes en OMC-1S, identificadas como 139-409 y 134-411, presentan emisión de  $CH_3CN$  (ver figura 2.6). Estas dos fuentes, coinciden con las fuentes SF6b y SF3b de Palau et al. (2018).

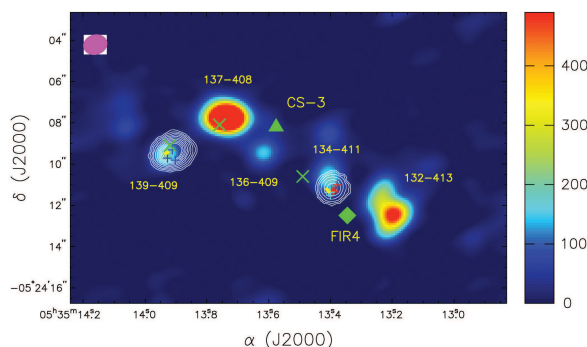


Figura 2.6: Imagen compuesta con los datos obtenidos con el SMA a 1.3 mm y los datos de la emisión integrada de  $CH_3CN[12_4-11_4]$  (contornos blancos) de los núcleos moleculares 139-411 y 134-411. Imagen tomada de Zapata et al. (2007)

### 2.1.3. Nuestras observaciones

La región fue estudiada por Palau et al. (2018) en el continuo a 7 y 1.3 mm con VLA + ALMA con una resolución angular y sensibilidad sin precedentes. En este artículo se presenta la región OMC-1S en diferentes rangos del espectro electromagnético, mostrando que varios de los núcleos ahí detectados a 1.3 mm también muestran emisión a 1.3 cm, en el infrarrojo y en rayos-x. En este estudio se presentaron 31 fuentes con un haz de observación de  $0.28'' \times 0.22''$ .



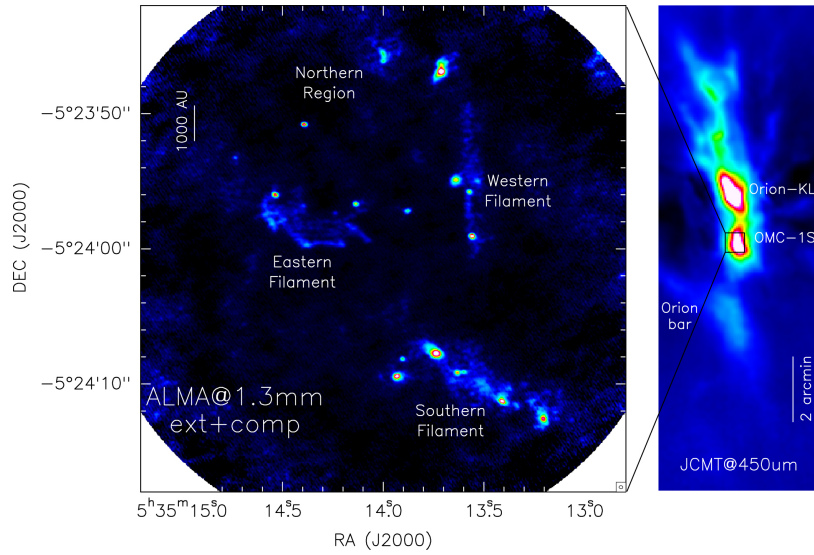


Figura 2.7: Izquierda: Emisión del continuo a 1.3 mm obtenida con ALMA para la región OMC-1S. Derecha: Datos del James Clerk Maxwell Telescope a 450  $\mu$ m. El recuadro negro indica el campo de visión de los datos de ALMA a la izquierda. Imagen tomada de Palau et al. (2018)

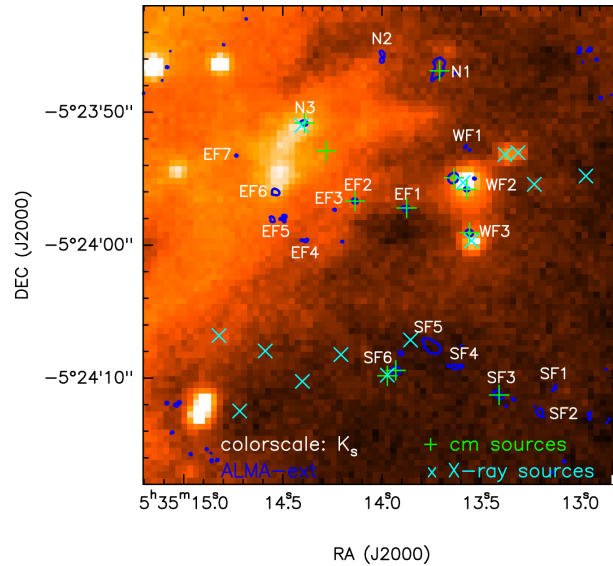


Figura 2.8: La escala de colores representan los datos de la banda  $K_s$  en el cercano infrarrojo tomados del archivo del telescopio CAHA; los contornos azules se corresponden con los datos de la emisión del continuo a 1.3 mm. Las cruces verdes son los datos a 1.3 cm de Zapata et al. 2004 mientras las cruces turquesas son datos en rayos X tomados de Rivilla et al. 2013. Imagen tomada de Palau et al. (2018)

Fuente	Emisión					Clase de objeto <sup>f</sup>	Asociación <sup>g</sup>
	IR <sup>a</sup>	Rayos-X <sup>b</sup>	cm <sup>c</sup>	Flujos <sup>d</sup>	HMC <sup>e</sup>		
SF6		✓	✓	maser	✓	0/I	139-409
SF4				maser		0/I	
SF3			✓		✓	0/I	134-411
EF1				SiO*		0/I	139-357
EF2			✓	SiO*		0/I	141-357
WF2	✓	✓	✓	SiO		I	136-355
WF3	✓	✓	✓	CO		I	136-329
N1			✓	SiO		0/I	137-347

Tabla 2.2: *Emisión en los diferentes rangos espectrales por parte de las fuentes presentes en OMC-1S. Tomados de Palau et al. (2018).*

<sup>a</sup> Tomado de Smith et al. (2004) y Palau et al. (2018).

<sup>b</sup> Tomado de Rivilla et al. (2013).

<sup>c</sup> Tomado de Zapata et al. (2004).

<sup>d</sup> Se da el trazador en caso de la detección del flujo: CO (Zapata et al. 2005), SiO (Zapata et al. 2006), emisión maser (Zapata et al. 2007).

<sup>e</sup> Tomado de Zapata et al. (2007), Fuente et al. (2014), Orozco-Aguilera et al. (2019).

<sup>f</sup> Tomado de Palau et al. (2018).

<sup>g</sup> Otros nombres que se encuentran en la literatura: Smith et al. (2004), Zapata et al. (2005).

En el presente trabajo se han utilizado las mismas observaciones de ALMA en la banda 6 (211.0 - 275.0 GHz) de Palau et al. (2018) que corresponden al programa 2013.1.01037.S del Ciclo 2. El rango de las líneas de base proyectadas cubre de 16 a 1230 k $\lambda$ , ver tabla 2.3. El tiempo de integración sobre la fuente fue de 8 minutos en cada observación.

Fecha	Núm. de antenas (diámetro, m)	Línea de base (m)
19/05/2015	38(12)	21 - 555
18/08/2015	37(12)	43 - 1600

Tabla 2.3: *Información sobre las observaciones en la banda 6 con ALMA que se han utilizado en el presente trabajo.*

El centro de fase fue el mismo para ambas observaciones,  $\alpha(\text{J2000}) = 05^{\text{h}}35^{\text{m}}14.^{\text{s}}0$  y  $\delta(\text{J2000}) = -05^{\circ}24'00''$ . El vapor de agua promedio (PWV) fue de 0.8 mm (ver figura 2.9) y la temperatura promedio del sistema fue de 60 K. Para reducir el ruido de fase atmosférico se observó simultáneamente la línea de agua a 183 GHz con radiómetros de vapor de agua. Para calibrar el paso de banda, la escala de flujo, la atmósfera y las fluctuaciones de ganancias se usaron los cuásares J0541-0541, J0522-364 y J0750+1231.

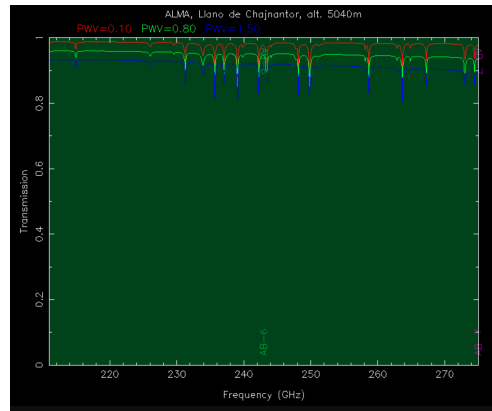


Figura 2.9: Transmisión atmosférica en el rango de frecuencias de la banda 6 de ALMA para tres diferentes valores de PWV, entre ellos el valor de 0.8 (color verde) correspondiente al PWV durante las observaciones aquí presentadas.

Con CASA (por sus siglas en inglés, *Common Astronomy Software Applications*) versión 4.7 se calibraron los datos recopilados para cada día de observación. La combinación de las dos épocas fue hecha con la tarea CONCAT y las imágenes se construyeron con la tarea CLEAN, dando lugar a un haz de  $0.88'' \times 0.54''$  con un ángulo de posición, AP, de  $-70.4^\circ$ .

La configuración espectral de la observación incluye 4 ventanas espectrales, todas con un ancho de banda total de 1.87 GHz. Dos de las 4 ventanas espectrales se dedicaron al continuo y se les asignó una resolución espectral de  $\sim 40$  km/s. Las otras dos ventanas se dedicaron a la observación de líneas, asignadas con los nombres “spw1” y “spw2”. Estas tienen una resolución espectral de 1.3 km/s, pero para construir las imágenes se usó un ancho de canal de 1.5 MHz o 1.95 km/s. En este trabajo nos hemos enfocado en el estudio de la ventana espectral 1, “spw1”.

Para poder comenzar a identificar las líneas espectrales observadas en la región OMC-1S es importante determinar el ruido de las observaciones. Una buena aproximación es tomar el valor RMS del cubo de datos de la ventana espectral “spw1” en una región sin emisión en CASA. Al inspeccionar el cubo de datos se encontró un valor del RMS igual a:  $\sigma = 2.4$  mJy/haz para los canales libres de línea.

## 2.2. Metodología

### 2.2.1. Ejemplos de identificación de líneas

De acuerdo a Ceccarelli (2004), el método a seguir para la identificación de *hot corinos* es la observación de diferentes líneas rotacionales (y/o incluso vibracionales) de una misma molécula con diferentes energías en el nivel superior. A continuación se

---

presentan algunos ejemplos de *hot corinos* identificados en diferentes regiones de formación estelar.

En Martín-Doménech et al. (2019) se presenta un estudio hacia la nube molecular *Serpens*, específicamente de la fuente Ser-emb 1 de Clase 0 ubicado a una distancia de  $436 \pm 9$  pc (Ortiz-León et al. 2018). Su estudio se basa en observaciones hechas con ALMA en la banda 6 con el propósito de estudiar la estructura de la fuente y su riqueza química. Con ayuda del software *CASA* y ajustes a la línea con *python* y tomando un umbral de  $4\sigma$ , presentan la detección de 10 especies químicas con emisión hacia el objeto central, entre ellas algunas precursoras a COMs:  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$  y las COMs:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  y el  $\text{CH}_3\text{OCHO}$ , siendo estas últimas detectadas en una región compacta ( $\sim 100$  UA). Haciendo uso de cuatro transiciones del metanol, obtienen una temperatura rotacional de  $261 \pm 46$  K. Todo esto apunta que en la fuente *Ser-emb 1* existe un *hot corino*. Finalmente, la coincidencia espacial de este *hot corino* y el disco proto-estelar encontrado por Enoch et al. (2011) sugieren que el *hot corino* puede ser realmente un disco tibio.

En Bouvier et al. (2020) hacen un estudio hacia el filamento OMC-2/3 en la nube molecular A de Orión con la emisión de las moléculas:  $\text{CH}_3\text{OH}$  y CCH, las cuales son características de los *hot corinos* y fuentes WCCC (fuentes ricas químicamente en cadenas de carbono). Hacen uso de observaciones de antena única con IRAM-30 m y Nobeyama-45 m. Se han basado en un cociente de abundancias  $[\text{CCH}]/[\text{CH}_3\text{OH}]$  para determinar la naturaleza química de su muestra proto-estelar, encontrando que la emisión de estas moléculas no proviene de las protoestrellas centrales sino de regiones adyacentes, recomendando tener cuidado al usar este cociente en observaciones de antena única.

En Codella et al. (2016) han hecho observaciones con ALMA en un ancho de banda de 8 GHz para estudiar, por primera vez, la emisión del  $\text{CH}_3\text{CHO}$  y HDO en la región interna ( $\simeq 100$  UA) de HH212-MM1, una protoestrella que se encuentra en Orión que muestra un microjet y un disco en rotación (Codella et al. 2014). Han usado el software de *CASA* para obtener el espectro y la base de datos de JPL (por sus siglas en inglés, *Jet Propulsion Laboratory*) para la identificación de las líneas, mientras que el análisis de los datos lo han hecho con GILDAS. Utilizando 20 transiciones de  $\text{CH}_3\text{CHO}$  y una transición del HDO, se ha hecho un diagrama rotacional que les ha proporcionado una temperatura de  $87 \pm 47$  K y una densidad columnar de  $2 \pm 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ , lo cual ha supuesto la primera detección de un *hot corino* en Orión.

### 2.2.2. Generación de espectros sintéticos

Uno de los objetivos a cumplir en el presente trabajo es llevar a cabo una búsqueda ciega de *hot corinos* en la región OMC-1S donde existe un cúmulo de protoestrellas en formación de masa baja e intermedia. Para esto se requiere identificar las moléculas

---

presentes en las fuentes detectadas en continuo en la banda 6 de ALMA.

A continuación se explicará el procedimiento realizado para la identificación de la línea más intensa observada en cada fuente de OMC-1S, sin embargo, este es esencialmente el mismo para cada línea observada en cada fuente donde se detectó emisión molecular. Para la nomenclatura de las fuentes se ha seguido a Palau et al. (2018):

1. **Obtener los espectros de cada fuente observada en la región OMC-1S.** Los espectros de las diferentes fuentes fueron obtenidos con ayuda de CASA donde se seleccionó una región igual al contorno de  $4\sigma$  para la línea más intensa. Para estos espectros la línea de base ya está en cero aproximadamente.
2. **Determinación del ancho de las líneas.** Para tener el mínimo de parámetros libres en la generación de los espectros sintéticos se buscó fijar para cada una de las fuentes tanto el ancho de la línea,  $\Delta v$  (debido principalmente a un ensanchamiento Doppler) como el desplazamiento en frecuencia de la línea observada,  $\Delta \nu$  (que corresponde a la velocidad respecto al sistema local de referencia, LSR (por sus siglas en inglés, *Local Standar of Rest*)). Para esto se ajustó una gaussiana a la línea más intensa dentro de la ventana espectral estudiada como se explica más abajo.

Para todas las fuentes la transición que se usó para determinar  $\Delta v$  y  $\Delta \nu$ , corresponde a la frecuencia  $\sim 231.067$  GHz (excepto EF2, donde se usó la línea a  $\sim 231.288$  GHz). Esta transición no está mezclada con ninguna otra línea, lo cual nos permite ajustarla correctamente con una sola gaussiana (ajuste que se realizo con CASA). En la figura 2.10 se muestra como ejemplo el ajuste que se obtuvo para la fuente SF4. Los valores así obtenidos de  $\Delta v$  para cada fuente se muestran en la tabla 3.1. El valor del centro de la línea también obtenido con este ajuste nos es útil durante la determinación del desplazamiento de las líneas, ver punto 5.

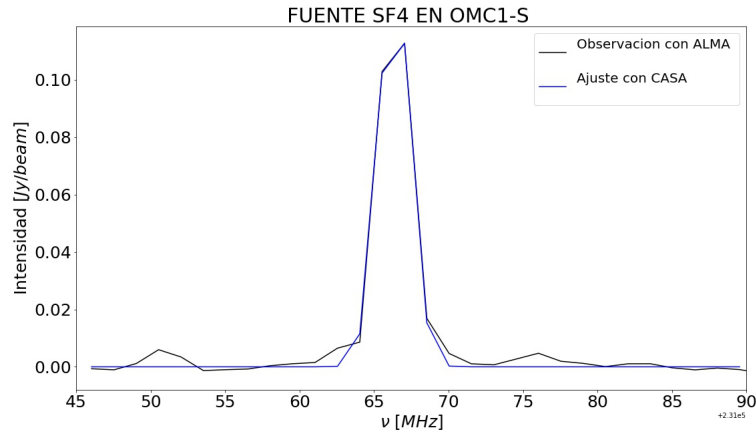


Figura 2.10: Ajuste gaussiano obtenido con CASA para la línea observada a  $\nu \sim 231.067$  GHz. La línea negra es nuestra línea más intensa en el espectro observado en la fuente SF4 mientras la línea azul es la gaussiana ajustada por CASA.

3. **Sustracción de la línea de base.** Aunque los espectros obtenidos con CASA en promedio tienen la línea de base en cero, se procedió a un refinamiento de la línea de base para que las líneas más débiles no se vieran afectadas por pequeñas desviaciones de la línea de base. Los datos de frecuencia e intensidad obtenidos con CASA para crear los espectros en el punto 1 fueron usados dentro del paquete *CLASS* del software *GILDAS* para la sustracción de la línea de base. Este procedimiento nos determina un ruido del espectro y aquí se adoptó un umbral de  $3\sigma$  para considerar como significativas las líneas observadas. Los valores de  $\sigma$  obtenidos para cada fuente se muestran en la tabla 3.1 como  $\sigma_{espec}$ .
4. **Identificación preliminar con *Splatalogue* de las líneas más intensas observadas.** En primer lugar se ha de identificar la línea más intensa del espectro de cada fuente (que nos ayuda a determinar  $\Delta\nu$  y  $\Delta\nu$ ).

Para la identificación de la línea más intensa se consideró un rango de  $\pm 10$  MHz respecto a la frecuencia medida, para así poder determinar  $\Delta\nu$ . Este rango se usó como entrada en la base de datos de *Splatalogue* para buscar posibles moléculas responsables de esta línea. Para delimitar la búsqueda se pueden especificar ciertos parámetros físicos característicos de los *hot corinos*, por ejemplo, que el rango de energía en el nivel superior (en Kelvin) sea de 0 a 300 y con una intensidad de la línea no menor a -5. Además se restringe la búsqueda solo a las bases de datos de CDMS y JPL (por sus siglas en inglés: *Cologne Database for Molecular Spectroscopy* y *Jet Propulsion Laboratory*), eligiendo preferentemente la de CDMS.

Para la línea centrada en  $\nu \sim 231.067$  GHz la molécula con mayor probabilidad se corresponde al sulfuro de carbonilo, OCS(19-18), mientras que para la línea centrada  $\nu \sim 231.288$  GHz la molécula con mayor probabilidad se corresponde con el metanol, CH<sub>3</sub>OH. Los parámetros moleculares mostrados por *splatalogue* se dan en la tabla 2.4.

	<i>Sulfuro de Carbonilo</i>	<i>Metanol</i>
Frecuencia en reposo[MHz]	231060.9934	231281.111
Intensidad de la línea	-4.44633	-4.22
$E_{sup}$ [K]	110.89923	165.34719

Tabla 2.4: Parámetros obtenidos de *Splatalogue* para la molécula del sulfuro de carbonilo, OCS(19-18).

5. **Determinación del desplazamiento de las líneas.** Considerando que la molécula en la frecuencia observada es OCS(19-18) (o en su caso, el CH<sub>3</sub>OH(10-9)) se retoma el valor en frecuencia del centro de la línea que CASA otorgó. Si tomamos la frecuencia de referencia de la observación con ALMA (231415.5407 MHz) y si se considera además que el primer canal de la ventana espectral 1 corresponde a la velocidad 0.650269 km/s (como se ve de la cabecera del cubo de datos), se resta este al valor del centro de la línea que da el ajuste (en km/s) y usando la ecuación 2.1 se tiene el centro de la línea en frecuencia.

$$\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = -\frac{v_r}{c} \quad (2.1)$$

Usando este valor y restando la frecuencia en reposo de la molécula OCS(19-18) (o en su caso, el CH<sub>3</sub>OH(10-9)) se encuentra el valor buscado para el desplazamiento,  $\Delta\nu$ , valor que se toma para la generación de los espectros sintéticos de cada fuente respectivamente. Sin embargo, estamos conscientes de que, estrictamente hablando, estos parámetros podrían estar variando entre las diferentes moléculas pero dado que nuestro objetivo principal es la identificación de las líneas hemos generado todos los espectros basándonos en estos únicos valores de  $\Delta\nu$  y  $\Delta\nu$  obtenidos con la línea más intensa. Los valores obtenidos para cada fuente se muestran igualmente en la tabla 3.1.

6. Una vez  $\Delta\nu$  está determinado con la línea más intensa, se aplicó  $\Delta\nu$  a las frecuencias medidas de las otras líneas más débiles y se buscó las posibles líneas en un rango más estrecho de  $\pm 5$  MHz.
7. **Generación de los espectros sintéticos.** Una vez definidos los valores de  $\Delta\nu$  y  $\Delta\nu$  para cada fuente (a partir de la línea más intensa) se comienza con la

---

identificación de cada una de las líneas observadas mediante la generación de un espectro sintético, lo cual nos ayuda a comprobar que la línea observada se corresponde con aquella que *Splatalogue* nos sugiere. La base de datos de CDMS nos proporciona las diferentes transiciones disponibles para las moléculas identificadas con *Splatalogue* en el rango correspondiente a la banda 6 de ALMA (211.0 - 275.0 GHz). Sin embargo, antes de iniciar con la generación del espectro sintético se necesita conocer el tamaño de la emisión integrada de la molécula, lo cual es posible mediante la obtención de su momento cero.

→ **Tamaño de la emisión.** Para conocer el tamaño de la emisión se hace uso de la tarea de CASA: *immoments*, para la cual es importante identificar del cubo de datos los canales donde se encuentra la emisión de OCS(19-18) (o cualquier otra molécula) y definir un valor  $>2\sigma$  para los valores en que CASA buscará en los pixeles de los datos. Se pueden encontrar los momento cero para diferentes canales (o moléculas) en toda la región OMC-1S en el apéndice A. CASA permite aplicar un ajuste gaussiano (*gaussfit*) a una región seleccionada basándose en la tarea *imfit* del mismo programa, en nuestro caso se define la región alrededor de la emisión integrada de la molécula OCS(19-18) (o cualquier otra molécula). De esta forma, obtenemos el tamaño de la emisión deconvolucionada del haz y el ángulo de posición, lo que nos permite calcular el factor de llenado para cada emisión observada en cada espectro. Los tamaños deconvolucionados de cada molécula en cada fuente se muestran en la tabla 3.1.

→ **Obtención de los datos moleculares con CDMS.** Definido el factor de llenado de la emisión y bajo la suposición de que la línea observada se corresponde con la molécula del sulfuro de carbonilo (o cualquier otra molécula) se procede a la obtención de sus parámetros moleculares con la base de datos de CDMS (o en su defecto, JPL) la cual permite buscar diferentes transiciones de una misma molécula en un rango de frecuencias.

CDMS es un catálogo de líneas espectrales que provee los datos intrínsecos de cada molécula, cubre un rango de frecuencias entre 0 y 10,000 GHz, y es usada para la identificación y análisis de las líneas espectrales observadas en el medio interestelar. Con este catálogo, es posible restringir la búsqueda de acuerdo a las intensidades de la línea y se puede elegir que muestre la información de los coeficientes de Einstein, la intensidad intrínseca de la línea multiplicada por su momento dipolar al cuadrado,  $S\mu^2$ , o la intensidad integrada a temperaturas entre 300 K y 9.375 K.

Elijiendo una búsqueda sobre el rango de frecuencias entre 230.5



---

GHz-232.5 GHz, CDMS otorga un fichero con información de la molécula consultada como es: su frecuencia en reposo en MHz y su incertidumbre, el logaritmo base 10 de la intensidad integrada a 300 K en  $\text{nm}^2\text{MHz}$ , los grados de libertad en la función de partición rotacional, el valor de la energía en el nivel inferior con unidades de  $\text{cm}^{-1}$ , el valor de degeneración en el estado superior ( $g_{up}$ ). Además, CDMS también arroja una etiqueta de la molécula que consiste en el peso molecular en unidades de masa atómica, nos dice la codificación de los números cuánticos y finalmente los números cuánticos.

Para generar los espectros sintéticos extraemos únicamente la información de la frecuencia (Hz), la intensidad integrada ( $\text{cm}^{-2}\text{Hz}$ ) y la energía en el nivel inferior (ergs); todos estos valores se deben cambiar a las unidades de CGS. Con esta información se procede a calcular tanto  $S\mu^2$  (a partir de las ecuaciones en Pickett et al. 1998) y con este la temperatura de haz principal, para finalmente obtener la intensidad en Jy/haz (a partir de las ecuaciones en Rohlfs & Wilson 2013). Todo esto bajo la suposición de que la emisión es ópticamente delgada.

→ **Espectros sintéticos.** Se ha creado un código para este trabajo (ver apéndice C) donde se leen los ficheros correspondientes y se definen las ecuaciones necesarias para la generación de las gaussianas en las frecuencias donde el OCS(19-18) emite (o cualquier otra molécula que se esté considerando) para el rango de frecuencias en 230.3 - 232.5 MHz.

Los resultados de los espectros sintéticos generados se muestran en el capítulo 3 en donde los parámetros de densidad, temperatura de excitación, ancho de la línea pueden verse en el recuadro en la parte superior derecha, mientras que datos como el ID de la molécula en la base de datos, el tamaño del haz encontrado con el ajuste del momento cero y el desplazamiento calculado se encuentran en la parte superior de la figura, así como el valor de  $\sigma_{spec}$  encontrado durante la sustracción de la línea de base.

8. **Identificación de la emisión molecular observada.** Con la generación de los espectros sintéticos se debe considerar que la molécula emita en más de una transición en el rango observado y que estas visualmente se ajusten correctamente a las líneas observadas en cada fuente, usando el ancho y el desplazamiento obtenido directamente con CASA.
9. **Diagramas rotacionales y espectros finales** Una vez identificadas las diferentes moléculas que se corresponden con los espectros observados con ALMA se han determinado las temperaturas rotacionales para cada fuente (ver

capítulo 4) y se han generado nuevamente los espectros sintéticos con estas temperaturas obtenidas. Los espectros finales son los que se muestran en el capítulo 3. De esta forma, el único parámetro libre que se tiene es la densidad columnar, valores que se muestran en la tabla 4.2.

### 2.2.3. Determinación de la temperatura

Un paso importante en el análisis de nuestros datos es definir las condiciones físicas de la región, como densidad columnar y temperatura. Para poder conocer la temperatura que caracteriza a nuestra región haremos uso de un método implementado en Goldsmith & Langer (1999) denominado: *diagrama rotacional*. Para su uso, comúnmente se tiene emisión ópticamente delgada por parte de varias transiciones de una misma molécula con las cuales es posible realizar un ajuste lineal a las energías del nivel superior contra la densidad columnar por peso estadístico en el nivel superior de cada una de las transiciones; la pendiente de este ajuste es inversamente proporcional a lo que se denomina: *temperatura rotacional*. Cuando todos los niveles de una molécula están *termalizados*, la temperatura rotacional nos estará dando la temperatura cinética. De manera más general, si la emisión es ópticamente gruesa, en el mismo artículo se propone una modificación a su método para poder seguir usándolo, añadiendo un término nuevo a la ecuación que se presenta al final de esta sección (ecuación 2.25). Para más detalle, ver sección 4 de Goldsmith & Langer (1999).

#### Ecuaciones importantes para la generación de los diagramas rotacionales

Para implementar este método se necesitan conocer algunos parámetros sobre las diferentes transiciones de la molécula a estudiar. Lo que nosotros podemos obtener de manera directa con las observaciones es la intensidad integrada de la línea en K km/s, que se relaciona con la temperatura del haz principal,  $T_{MB}$ , mediante:

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} T_{MB} dv \quad (2.2)$$

Haciendo las consideraciones correspondientes, es decir:

- Las líneas son ópticamente delgadas ( $\tau \ll 1$ ).
- Los niveles de población están caracterizados por una única temperatura de excitación ( $T_{exc}=T_{rot}$ ), es decir, hay un equilibrio termodinámico local. Esta  $T_{exc}$  es la temperatura tal que la función fuente es igual a un cuerpo negro a  $T=T_{exc}$ .  
→ De esto, recordemos que los niveles de población se relacionan a través de

la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{n_u}{n_l} = \frac{g_u}{g_l} \exp \left[ -\frac{h\nu}{kT_{exc}} \right] \quad (2.3)$$

→ Además, cuando un gas cuyas velocidades están determinadas por colisiones elásticas, se dice que estas están termalizadas y entonces, el gas está en equilibrio térmico a una cierta temperatura cinética,  $T_{kin}$ .

- La fuente es homogénea, por tanto en la ecuación de transporte radiativo la función fuente será:  $S_\nu = \text{constante}$ .
- El perfil de la línea es aproximadamente la ecuación 2.11, y se considera que  $\Delta\nu$  es mucho más pequeño que  $\nu_{ul}$ .

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu} \quad (2.4)$$

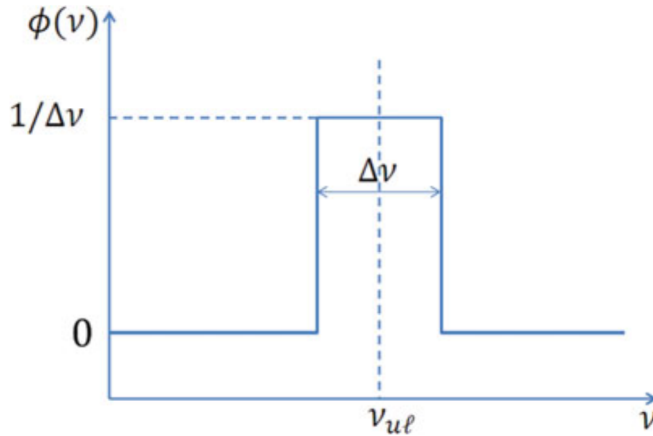


Figura 2.11: Función del perfil de línea empleado por simplicidad. La frecuencia central de la línea es  $\nu_{ul}$  y el ancho de la línea es  $\Delta\nu$ . Imagen tomada de Yamamoto (2017).

Considerando a todos los niveles de población, se puede hacer la suma correspondiente:

$$N = \sum_i N_i \quad (2.5)$$

El número total de moléculas por unidad de área,  $N$ , puede ser inferido a partir del número de moléculas en el nivel  $u$  por unidad de área:

$$N = \frac{N_u}{g_u} Q(T_{exc}) \exp(E_u/kT_{exc}) \quad (2.6)$$

donde  $Q(T_{exc})$  es la función de partición y se ha supuesto que la población de los niveles sigue una distribución de Boltzmann:

$$Q(T_{exc}) = \sum_i g_i \exp\left(-\frac{E_i}{KT_{exc}}\right) \quad (2.7)$$

Además se puede obtener (con las consideraciones ya listadas) la expresión necesaria para la profundidad óptica:

$$\tau_\nu = \frac{c^2}{8\pi\nu_{ul}^2} A_{ul} N_u (e^{h\nu_{ul}/kT} - 1) \phi(\nu). \quad (2.8)$$

Para tener la profundidad óptica en función de la velocidad consideramos que:

$$\int \tau_\nu d\nu = \frac{\nu_{ul}}{c} \int \tau dv \quad (2.9)$$

Dado que el ancho de línea se conoce comúnmente en términos de velocidad, y no en frecuencia, entonces se define el ancho en velocidad como:

$$\Delta v = \frac{\Delta\nu}{\nu_{ul}} c \quad (2.10)$$

Así, el perfil de la línea normalizado y en función de la velocidad será:

$$\int \phi(v) \left(\frac{\nu_{ul}}{c}\right) dv = 1 \quad (2.11)$$

De esta forma:

$$\tau_\nu dv = \frac{c^3}{8\pi\nu_{ul}^3} A_{ul} N_u (e^{h\nu_{ul}/kT_{exc}} - 1) \quad (2.12)$$

Considerando el coeficiente de emisión espontánea de Einstein:

$$A_{ul} = \frac{64\pi^4 \nu_{ul}^3 |\mu_{ul}|^2}{3hc^3} \quad (2.13)$$

Podemos reescribir a la ecuación 2.12 como:

$$N_u = \frac{3h \int \tau_\nu dv}{8\pi^3 |\mu|^2 (e^{h\nu_{ul}/kT} - 1)} \quad (2.14)$$

Necesitamos escribir la ecuación anterior en términos de la información que podemos extraer de las observaciones. Cuando se analizan líneas espectrales se sustrae la contribución del continuo y su diferencia nos dará el valor real de la intensidad de la línea:

$$\Delta I_\nu \equiv I_\nu - I_\nu(0) = [B_\nu(T_{exc}) - B_\nu(T_f)][1 - e^{-\tau}] \quad (2.15)$$

Es posible expresar la intensidad que una fuente emite en unidades de temperatura mediante la ecuación 2.16. De esta forma ahora tenemos una temperatura de la línea,  $T_L$ , que también es una temperatura de radiación.

$$J_\nu(T_B) \equiv \frac{h\nu/k}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (2.16)$$

Mientras que la temperatura del haz principal es posible conocerla mediante:

$$T_{MB} = \left( \frac{\Omega_f}{\Omega_f + \Omega_{MB}} \right) T_L \quad (2.17)$$

El término entre parentésis es conocido como el factor de llenado,  $f$ , y es una medida de la fracción de la emisión que llena el haz.

Usando la ecuación 2.16 y reescribiendo la ecuación 2.15, considerando que  $h\nu \ll kT$  y que la radiación de fondo es despreciable, entonces:

$$T_L = T_{exc} [1 - e^{-\tau}] \quad (2.18)$$

Por conveniencia multiplicamos por  $\tau/\tau$  a la ecuación 2.16 e integramos a la ecuación 2.17 sobre todas las velocidades, encontrando que:

$$\begin{aligned} \int T_{MB} dv &= \int \left( \frac{\Omega_f}{\Omega_f + \Omega_{MB}} T_L dv \right) \\ &= f T_{exc} \left( \frac{1 - e^{-\tau_\nu}}{\tau_\nu} \right) \int \tau_\nu dv \end{aligned} \quad (2.19)$$

Recordando que  $\tau \ll 1$ , despejamos para obtener:

$$\int \tau_\nu dv = \frac{\int T_{MB} dv}{f T_{exc}} \quad (2.20)$$

Tomando 2.20 y sustituyendo en 2.14 obtenemos:

$$N_u = \frac{3h}{8\pi^3 |\mu|^2} \frac{kT_{exc}}{h\nu} \left( \frac{\int T_{MB} dv}{f T_{exc}} \right) \quad (2.21)$$

Suponiendo un factor de llenado igual a 1 y reduciendo la ecuación anterior, se tiene que la densidad columnar en el nivel superior en términos de la cantidad observada  $T_{MB}$  es:

$$\boxed{N_u = \frac{3k}{8\pi^3 \nu |\mu|^2} \int T_{MB} dv} \quad (2.22)$$

Donde  $|\mu|^2 = S\mu^2$ , siendo  $S$  la intensidad intrínseca de la línea y  $\mu$  el momento dipolar permanente. Las unidades para  $N_u$  son  $\text{cm}^{-2}$ .

---

Es común tomar la integral sobre todas las velocidades en la intensidad integrada de la línea (ecuación 2.2), de esta forma se tiene que, si la línea es gaussiana:

$$W = T_{MB} \Delta v \quad (2.23)$$

### El diagrama rotacional

Para relacionar  $N_u$  con  $N$  se debe estar en ETL, es decir, para todos los niveles debe existir una única temperatura de excitación que los relacione. Entonces, será posible usar la ecuación 2.6, de la cual podemos obtener la expresión para la densidad columnar en el nivel superior:

$$N_u = \frac{N}{Q(T_{exc})} g_u \exp(-E_u/kT_{exc}) \quad (2.24)$$

O aplicando el logaritmo natural a ambos lados se obtiene:

$$\ln\left(\frac{N_u}{g_u}\right) = \ln\left(\frac{N}{Q(T)}\right) - \frac{E_u}{kT} \quad (2.25)$$

Si es posible obtener los parámetros moleculares de diferentes transiciones en nuestras observaciones, entonces al graficar  $E_u/k$  contra  $\ln(N_u/g_u)$  (donde  $N_u$  estará dada por la ecuación 2.22) lo que observaremos es una línea recta con una pendiente igual a  $1/T$ , de acuerdo a la ecuación 2.25, donde  $T$  es denominada *temperatura rotacional*; mientras que de la intercepción con el eje  $y$  se obtendrá  $\ln(N/Q(T))$ .



## Capítulo 3

# Identificación de líneas moleculares y su morfología

Siguiendo el formalismo descrito en la sección 2.2.2 y 2.2.3 se obtuvieron los espectros sintéticos de diferentes moléculas para las 8 fuentes detectadas. Durante este capítulo nos hemos centrado en determinar los parámetros que se dejan fijos para generar los espectros sintéticos de cada fuente como: desplazamiento en frecuencia y ancho de las líneas (ambos obtenidos de acuerdo a la línea más intensa y aislada vista en cada espectro de cada fuente) y tamaño deconvolucionado de cada molécula obtenido (a partir de la emisión integrada).

De esta forma, en la tabla 3.1 se presentan los datos obtenidos, así mismo, se muestra el valor de  $\sigma_{spec}$  obtenido tras la sustracción de la línea de base con GILDAS y, finalmente, las moléculas detectadas en cada fuente junto con sus respectivas frecuencias. Es importante mencionar que en ciertos casos no fue posible deconvolucionar la fuente del haz por lo que se han considerado como *fuentes puntuales* y se ha tomado la media geométrica del tamaño del haz lo que corresponde a un factor de llenado de 0.5.

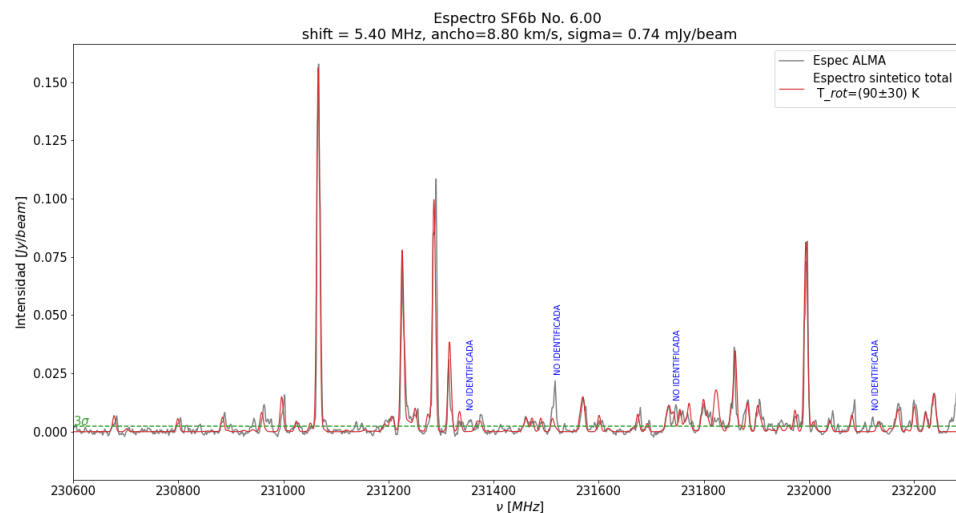
La suma de la contribución de las diferentes moléculas identificadas para cada fuente se muestran en las siguientes figuras, recordar que la nomenclatura es de acuerdo a Palau et al. (2018). Los parámetros de desplazamiento y ancho de la línea calculado se encuentran en la parte superior de la figura, así como el valor de  $\sigma_{spec}$  encontrado durante la sustracción de la línea de base. Para estos espectros mostrados ya se ha considerado la temperatura rotacional obtenida con los diagramas rotacionales, ver capítulo 4.



Fuente:	Filamento del Sur			Filamento del Este			Filamento del Oeste			Región Norte	
	SF6b	SF4	SF3	EF1	EF2	WF2c	WF3	WF3	WF3	N1b	N1b
$\sigma_{espec}$ [mly/haz]:	0.74	1.004	0.6485	1.169	1.517	1.299	1.568	1.299	1.568	1.749	1.749
Ancho de línea [km/s]:	5.4	3.13	5.985	5.70	8.5	5.16	3.00	5.16	3.00	2.89	2.89
Desplazamiento [km/s]:	7.0	7.1	7.4	7.1	5.4	7.3	7.3	7.3	7.3	6.5	6.5
Frecuencia [GHz]	Tamaño deconvolucionado										
CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH	0.470×0.391(126)	baja S/N	<i>fuente puntual</i>	0.63×0.21(no)	0.59×0.52(no)	baja S/N	baja S/N	baja S/N	baja S/N	baja S/N	baja S/N
CH <sub>3</sub> <sup>13</sup> CHO	-	0.734×0.478(129)	0.89×90.814(155)	1.3×0.42(70)	0.570×0.257(83)	0.372×0.242(173)	0.971×0.480(106)	0.971×0.480(106)	0.971×0.480(106)	1.0×0.24(no)	1.0×0.24(no)
OCS	0.89×0.65(87.4)	0.904×0.756(29)	1.19×0.96(148)	0.301×0.234(88)	0.961×0.334(89)	1.12×0.84(79)	0.8×0.27(no)	0.8×0.27(no)	0.8×0.27(no)	no calculado	no calculado
<sup>13</sup> CS	0.91×0.56(87)	-	<i>no calculado</i>	-	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>	<i>no calculado</i>
C <sub>1</sub> H <sub>2</sub> *	232126.319	0.64×0.55(71)	0.616×0.557(123)	0.303×0.244(55)	0.447×0.272(86)	0.669×0.345(120)	1.42×0.25(79.6)	1.42×0.25(79.6)	1.42×0.25(79.6)	1.82×1.21(28)	1.82×1.21(28)
CH <sub>2</sub> OH	231281.111	-	-	<i>fuente puntual</i>	-	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	-	-
C <sub>2</sub> H	231511.650	-	-	<i>fuente puntual</i>	0.389×0.287(64)	0.878×0.723(8)	-	-	-	-	-
CH <sub>3</sub> CHO	231510.465	0.33×0.24(30)	<i>fuente puntual</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
g-Ga-(CH <sub>2</sub> OH) <sub>2</sub>	231564.319	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	231565.20	0.31×0.1(no)	<i>fuente puntual</i>	1.48×1.41(51)	-	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	-	-
HCONHD*	231729.036	0.46×0.36(24)	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CH <sub>3</sub> NCO*	231795.913	0.42×0.25(56)	0.48×0.2(no)	<i>fuente puntual</i>	-	1.33×0.56(127)	-	0.42×0.25(56)	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>
CH <sub>3</sub> OH	231801.466	-	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	-	-	-	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>
HC <sub>3</sub> N *	231877.427	0.23×0.44(29)	-	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	-	-	-	-	-	-
<sup>33</sup> SO <sub>2</sub> *	231901.540	0.57×0.28(86)	0.456×0.377(61)	-	-	-	-	-	-	-	-
CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	231987.858	0.89×0.54(89.8)	0.716×0.598(18)	0.308×0.209(31)	0.54×0.16(no)	1.07×0.44(145)	0.5×0.15(no)	0.5×0.15(no)	0.5×0.15(no)	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN	231990.409	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
HCOOCH <sub>3</sub>	232160.193	0.578×0.292(84)	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	0.389×0.287(64)	1.17×0.89(25)	1.3×0.42(no)	1.3×0.42(no)	1.3×0.42(no)	1.18×0.16(27)	1.18×0.16(27)
<sup>13</sup> CH <sub>2</sub> CN	232234.188	0.69×0.30(104.6)	<i>fuente puntual</i>	1.42×0.84(29)	<i>fuente puntual</i>	1.47×0.29(131.4)	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	<i>fuente puntual</i>	1.7×0.57(no)	1.7×0.57(no)

Tabla 3.1: Parámetros usados para la creación de los espectros sintéticos.

### 3.1. Fuente SF6b



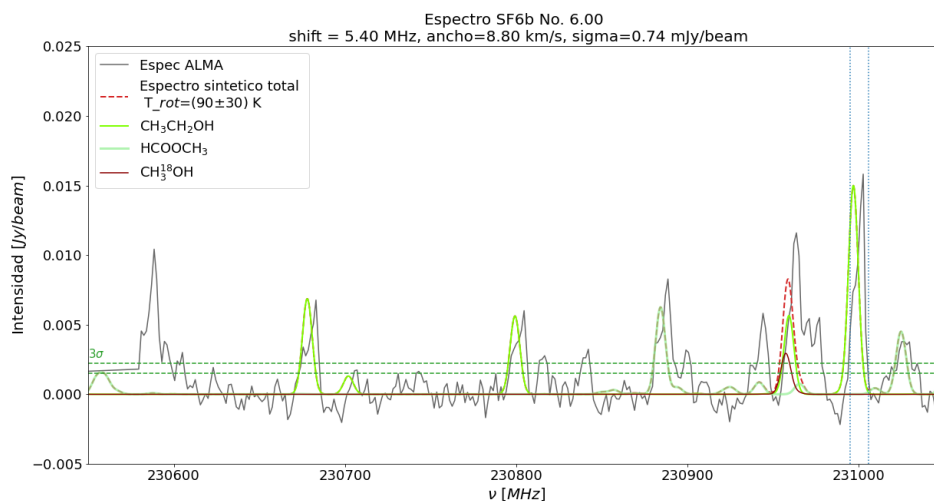
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.1: Espectro de la fuente SF6b observado con ALMA (color negro) donde se le ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.1a para una mejor observación del mismo. En estos acercamientos se han colocado líneas verticales en color azul de acuerdo al rango de frecuencias en que se obtuvieron los diferentes momento cero. En la figura 3.2e se agregó una línea vertical amarilla para indicar la posición del etilenglicol,  $g^{\prime}\text{Ga}-(\text{CH}_2\text{OH})_2$  y poder evaluar una posible contaminación de esta molécula en la creación de los diagramas rotacionales del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  (sección 4.1).

Para muchas de las transiciones identificadas en SF6b se puede apreciar que la línea tiene dos componentes de velocidad, siendo la corrida al azul (más alta frecuencia) más intensa. Esta característica podría estar relacionada con material en caída y requiere de observaciones con mayor resolución espectral para poderla comprender mejor. Este efecto se ve muy claro en las líneas del  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  (figura 3.2a) y la línea del  $\text{CH}_3\text{OH}$  (figura 3.2b). Por ejemplo, en el caso del  $\text{CH}_3\text{OH}$  las dos componentes de velocidad están separadas  $\sim 3.9$  km/s. Esta diferencia de velocidades podría corresponder a un movimiento ligado gravitacionalmente, ya que de ser así la masa del objeto central sería, en primer orden de magnitud, de  $v^2R/G \sim 0.5 M_{\odot}$ , que es muy consistente con la masa estimada para SF6b a partir de gradientes de velocidad detectados en trabajos anteriores (ej., Zapata et al. (2007)).



(a) zoom 230.55-231.04 GHz

Figura 3.2: Acercamientos al espectro para la banda 6 de ALMA en la fuente SF6b de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

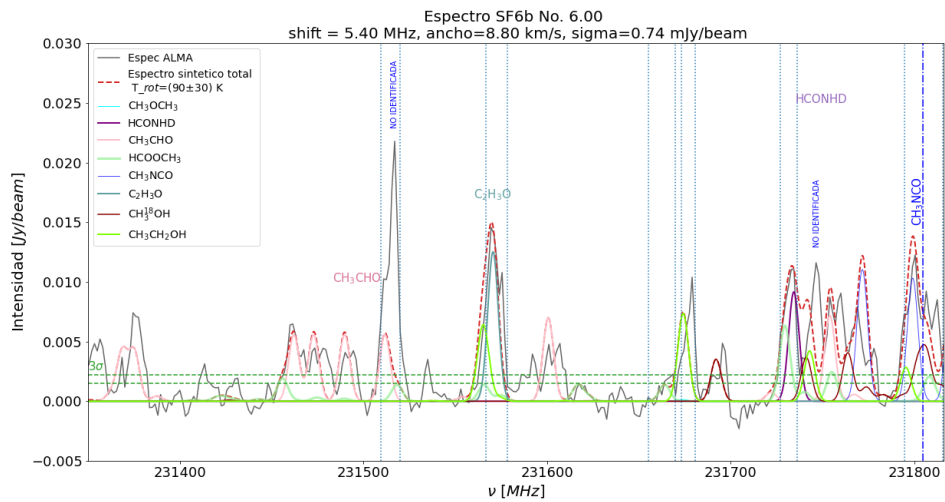
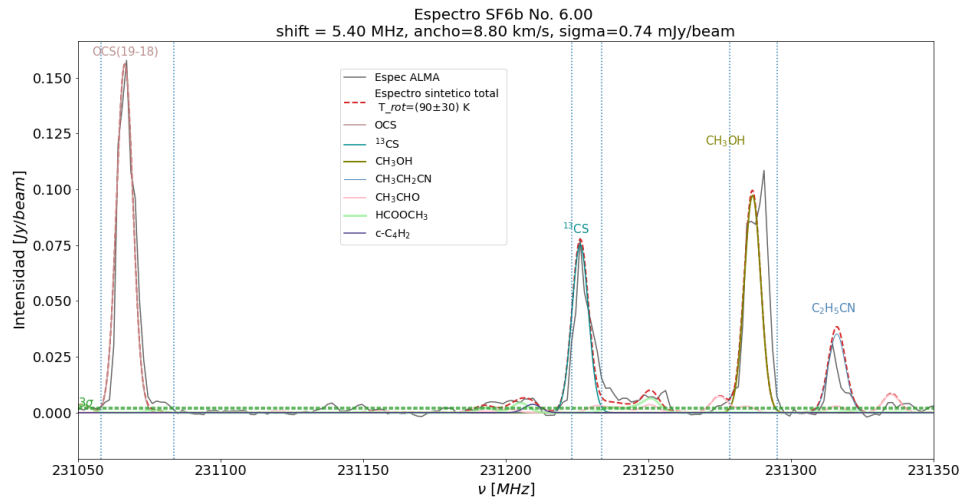
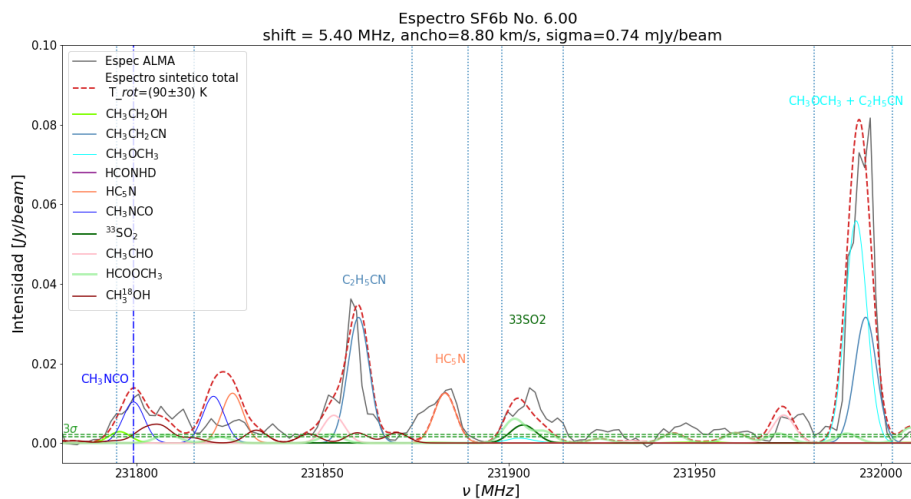
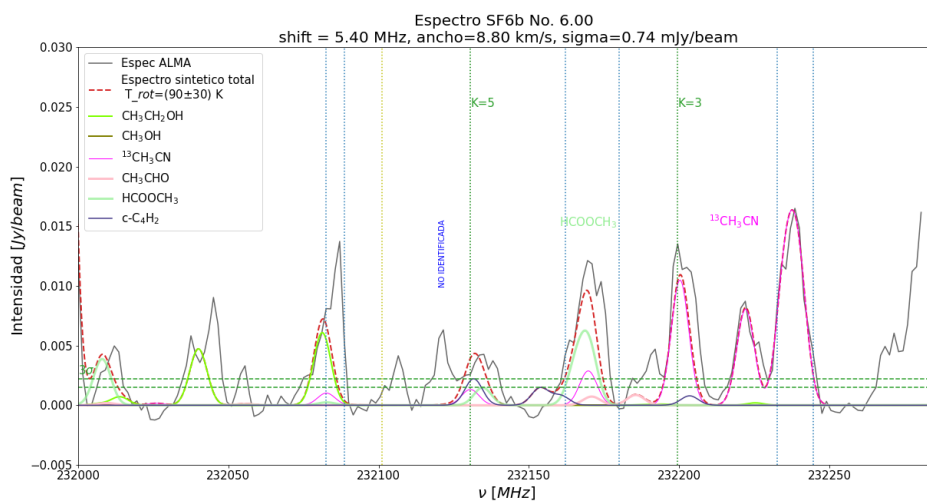


Figura 3.2: *Continuación.*



(d) zoom 231.8 - 232.02 GHz



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.2: *Continuación.*

## Emisión integrada en SF6b (por molécula)

A continuación se presenta la emisión integrada para las líneas más intensas observadas en el espectro de SF6b (figura 3.1). Se muestran los resultados de aquellas que se observó estuvieran mayormente aisladas de la emisión de otras moléculas. En cada figura se pueden ver los canales usados para obtener tal emisión integrada y en cada uno se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm.

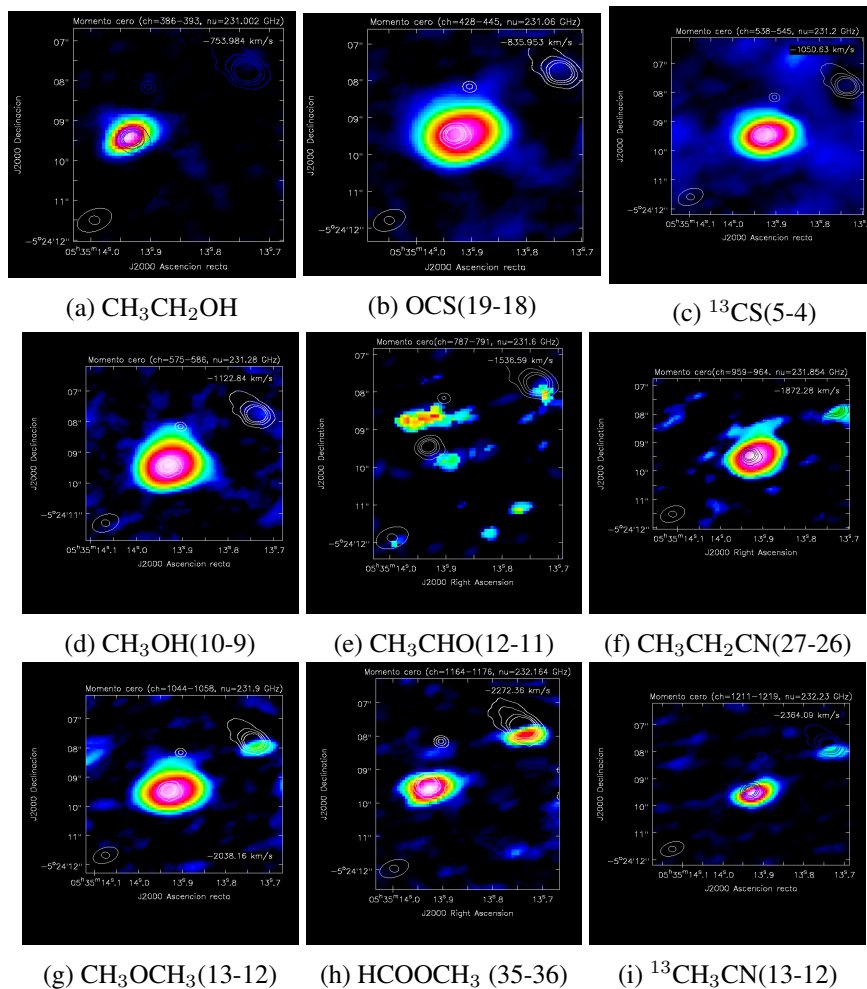
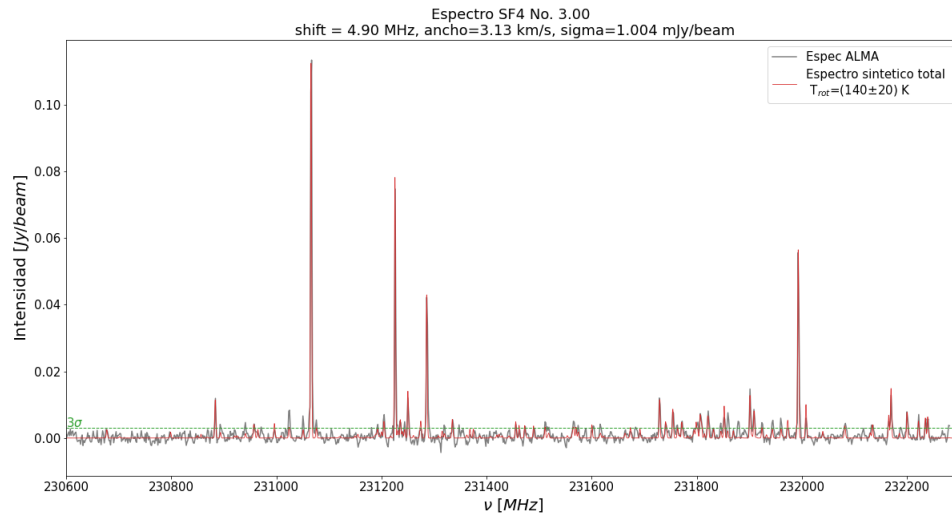


Figura 3.3: Momento cero para la fuente SF6b en la region OMC-1S. SF6b es la fuente cercana al centro de cada panel. La fuente del continuo que se ve al noroeste es SF5 y tienen emisión de  $\text{HCOOCH}_3$ .

## 3.2. Fuente SF4



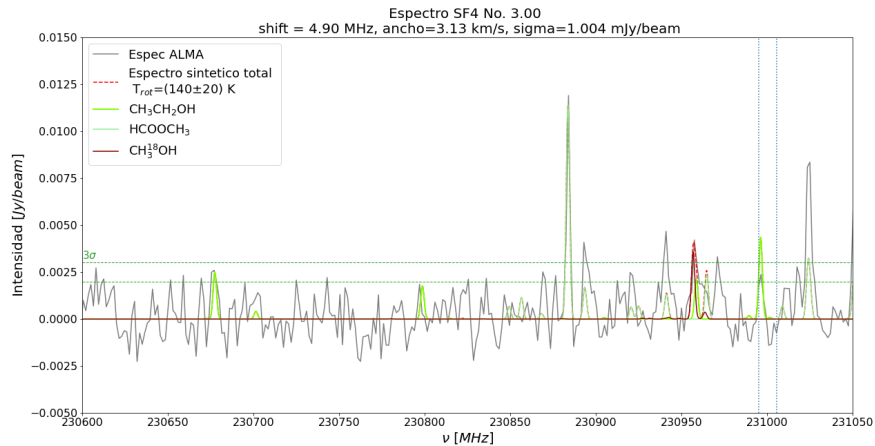
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.4: Espectro de la fuente SF4 observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

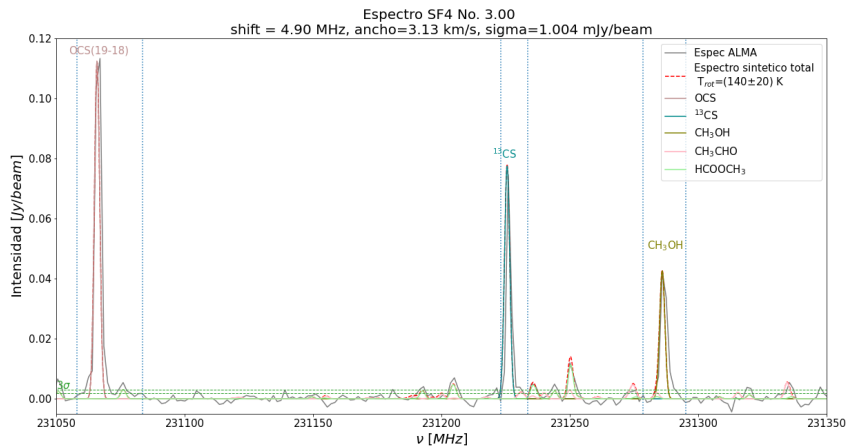
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.4a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

En este caso, la mayoría de las líneas tienen un perfil aproximadamente gaussiano.



(a) zoom 230.55-231.04 GHz



(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.5: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente SF4 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.



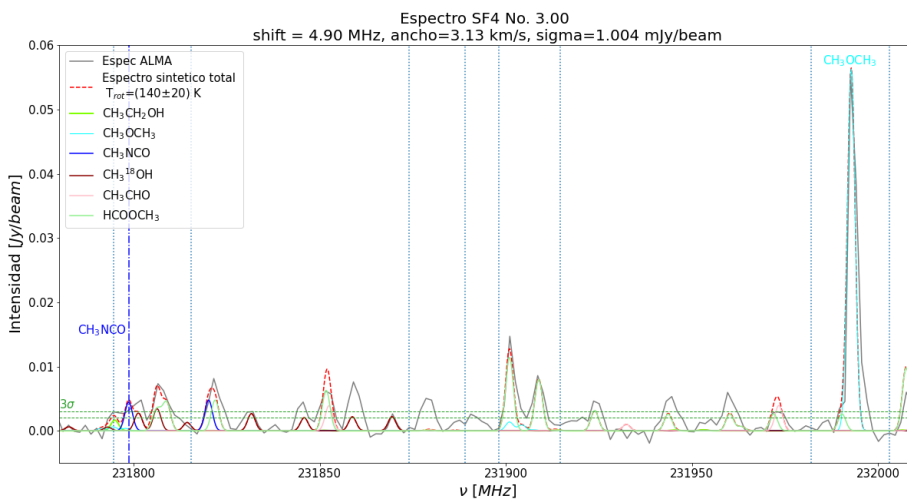
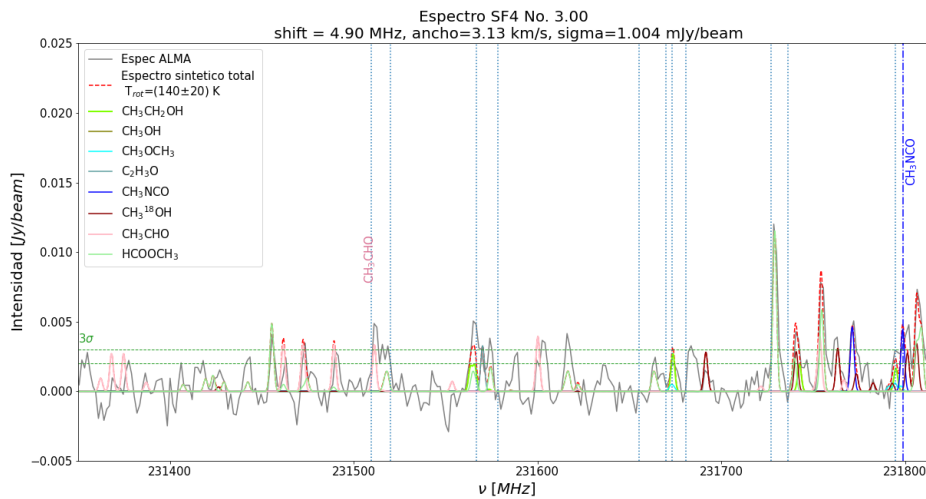
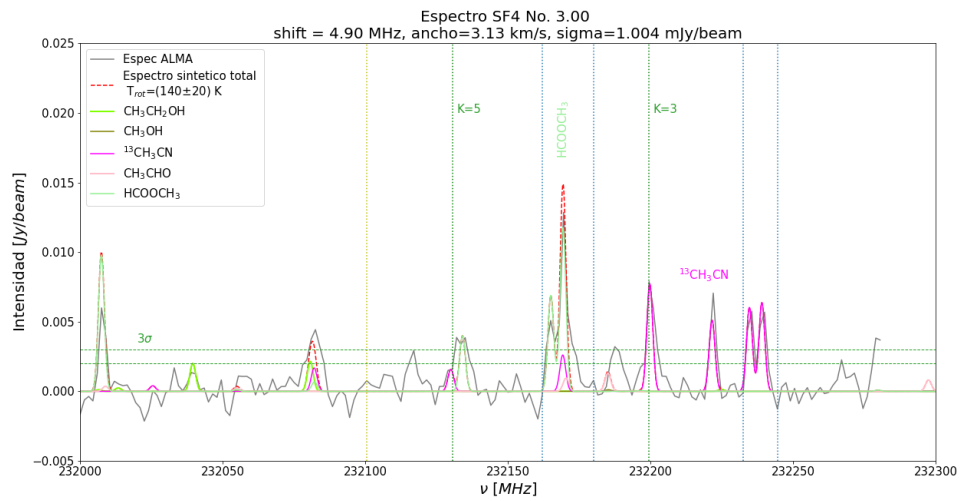


Figura 3.5: *Continuación.*



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.5: *Continuación.*

## Emisión integrada en SF4 (por molécula)

Al igual que para SF6b, para conocer el tamaño de la emisión de cada molécula a estudiar se han calculado los momento cero de cada una, los cuales se muestran a continuación en la figura 3.6. En estas imágenes se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada una de ellas se han especificado los canales con los que fueron obtenido los momento cero.

Para algunas transiciones se puede apreciar, además de la emisión asociada a SF4 (en el centro de cada panel) emisión al noreste asociada con la fuente SF5 pero claramente desplazada hacia el suroeste respecto al pico del continuo de SF5. Esto es especialmente prominente para la emisión del  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ ,  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ,  $\text{HCOOCH}_3$  y  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ .

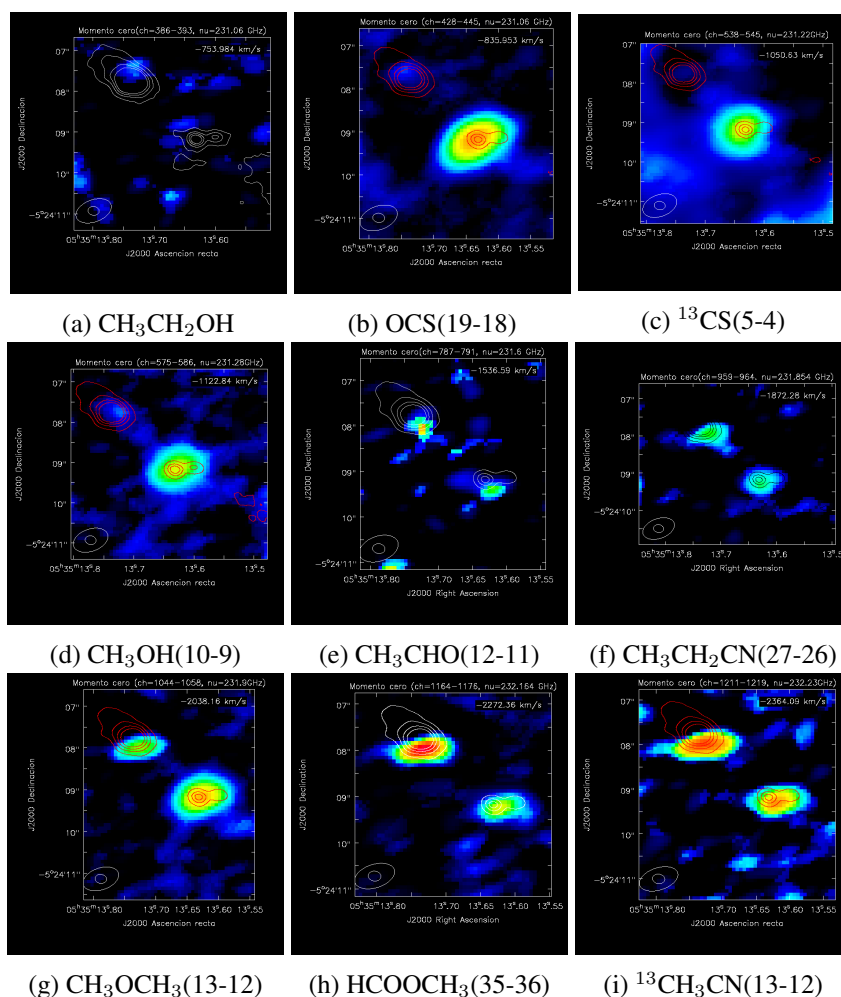
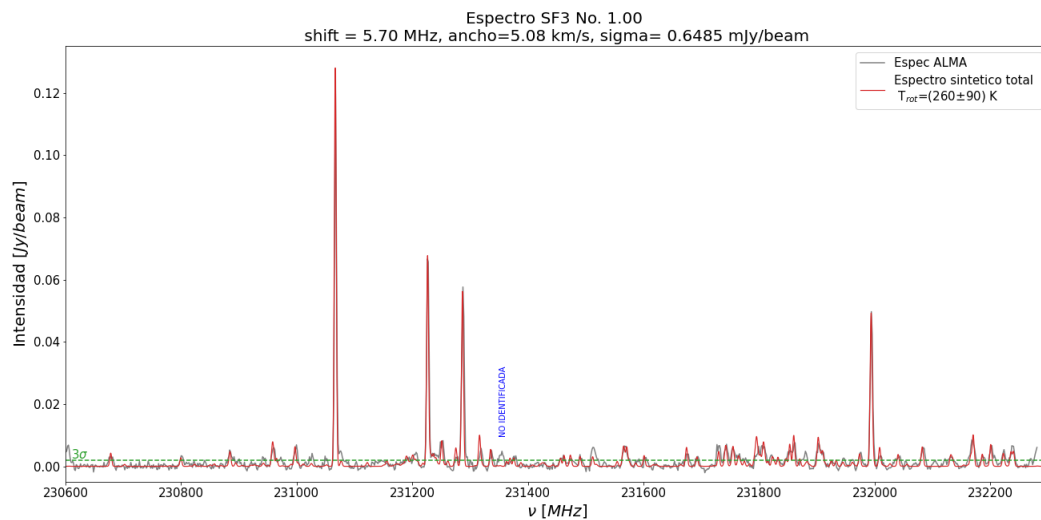


Figura 3.6: Momento cero para la fuente SF4 en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

### 3.3. Fuente SF3



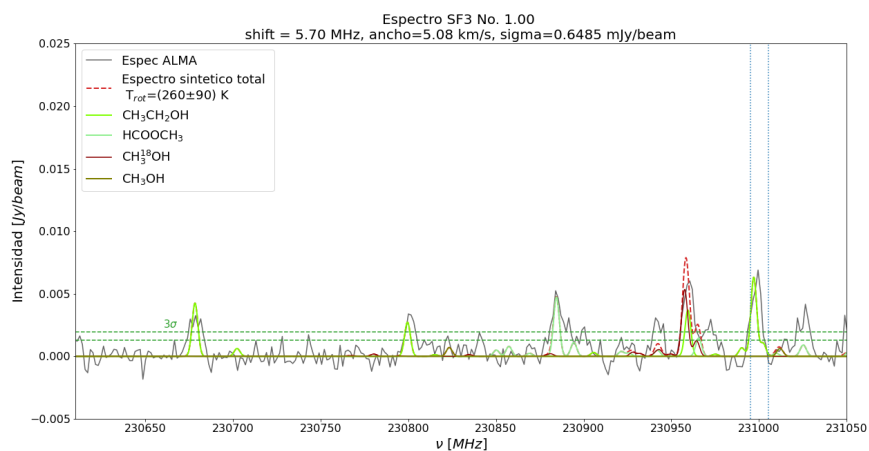
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.7: Espectro de la fuente SF3 observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

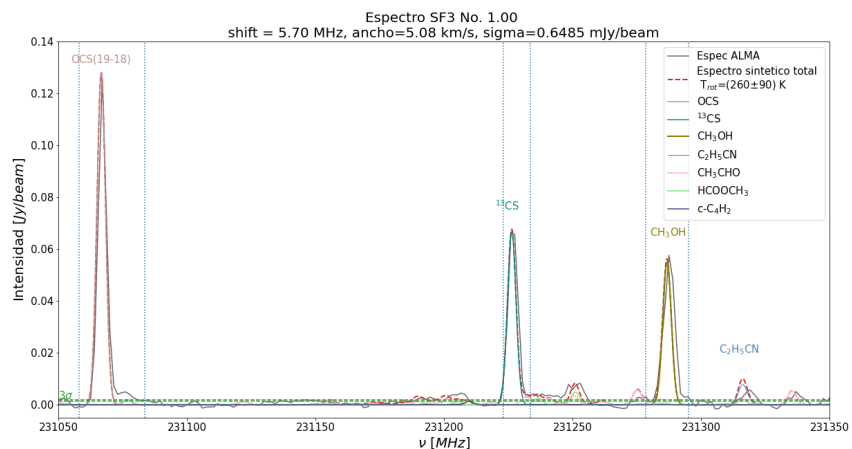
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.7a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

En este caso, las líneas que no están mezcladas parecen reproducirse bien con una gaussiana.



(a) zoom 230.55-231.04 GHz



(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.8: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente SF3 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

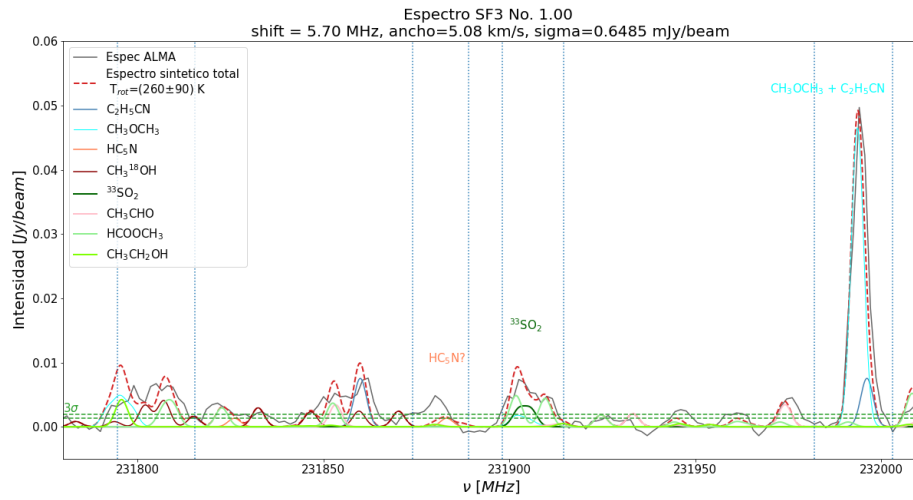
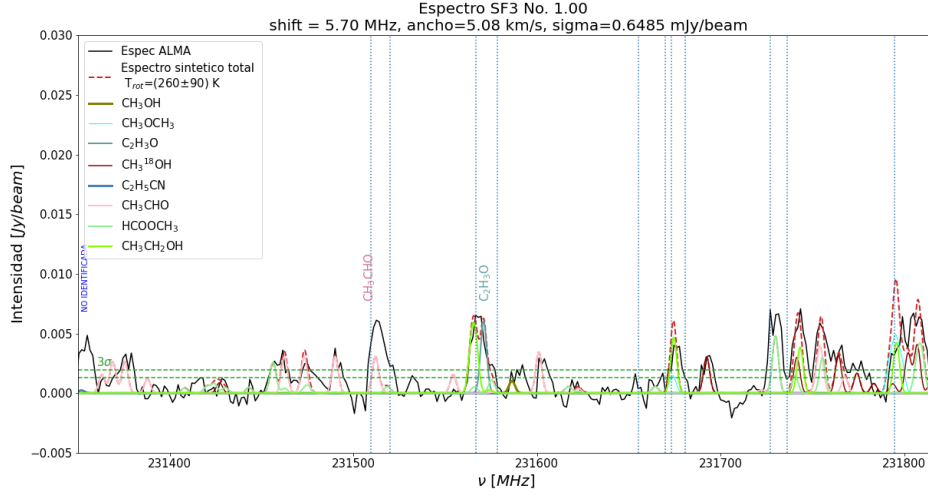
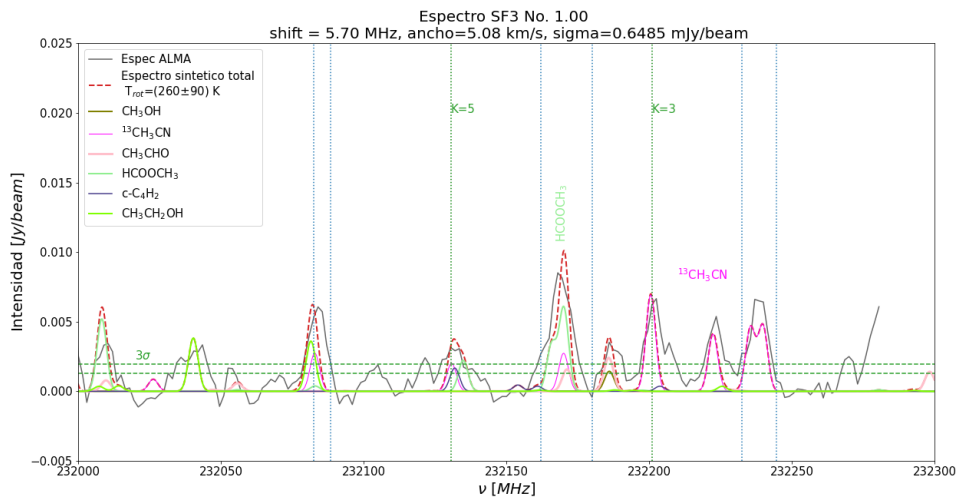


Figura 3.8: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente SF3 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.8: *Continuación.*

## Emisión integrada en SF3 (por molécula)

A continuación se muestran los momento cero obtenidos para cada molécula identificada. Los canales utilizados se muestran en la parte superior de las imágenes a las cuales se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm.

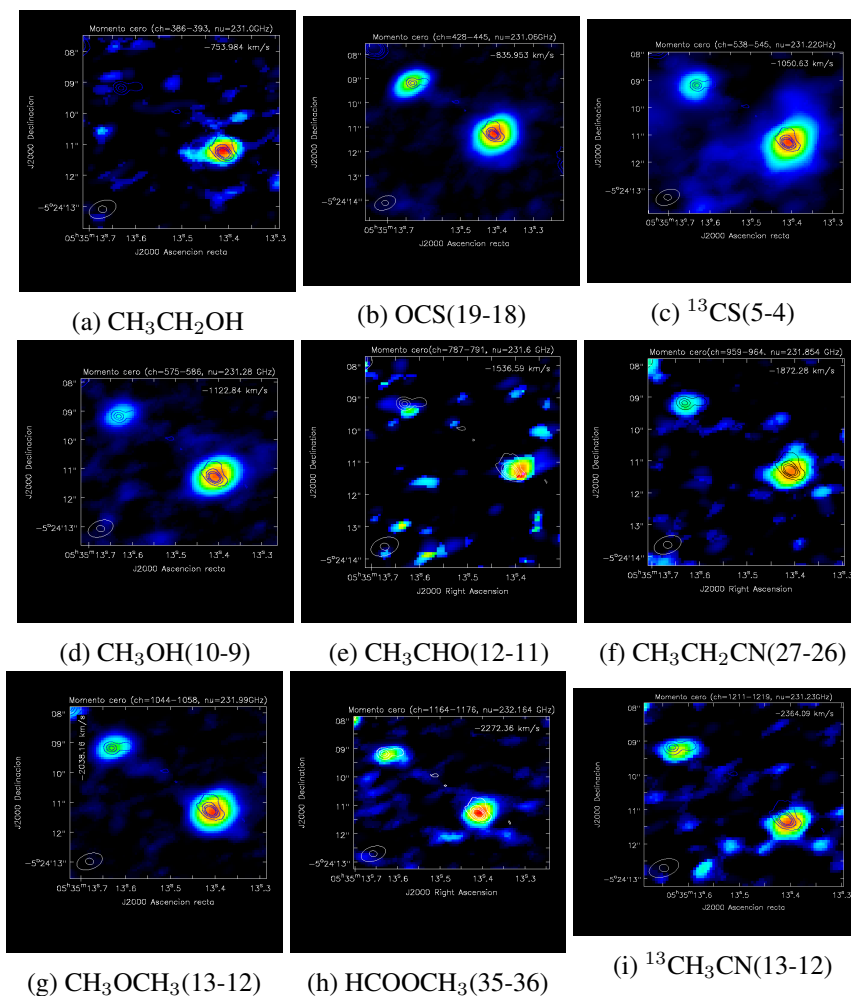
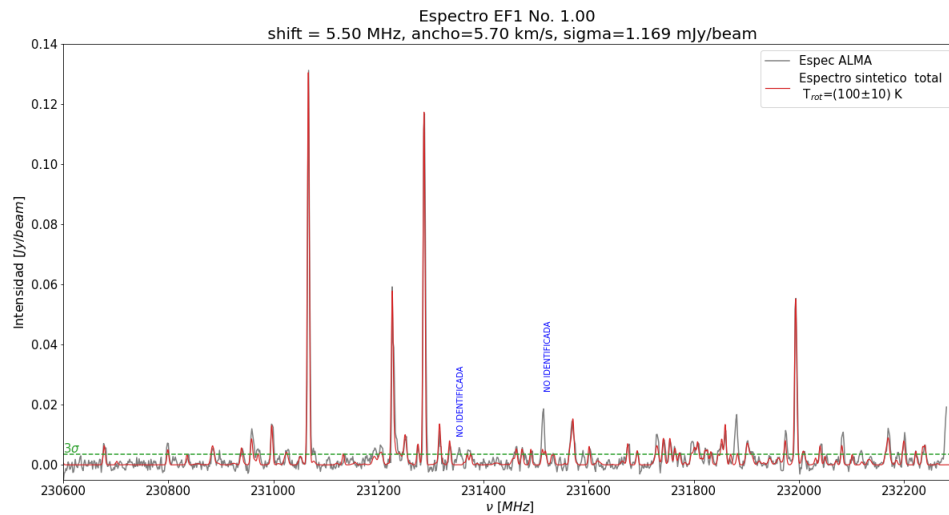


Figura 3.9: Momento cero para la fuente SF3 en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm. En todos los paneles la fuente más intensa corresponde a SF3 (al suroeste) y la fuente más débil corresponde a SF4.



### 3.4. Fuente EF1



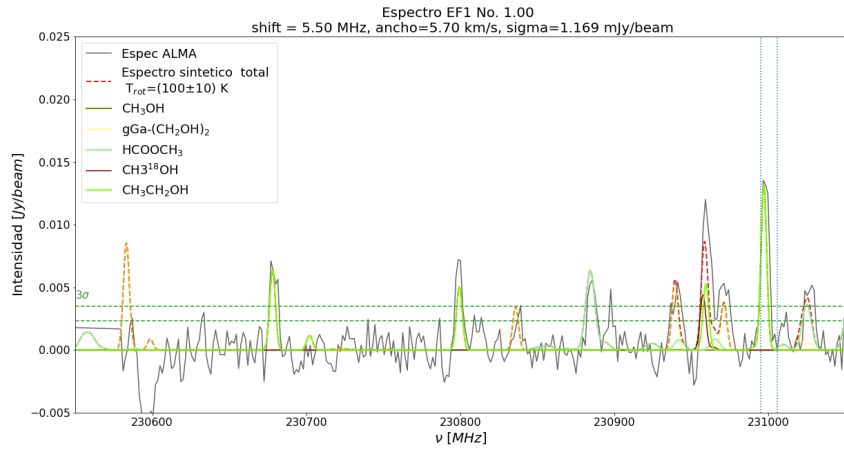
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.10: Espectro de la fuente *EF1* observado con *ALMA* (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

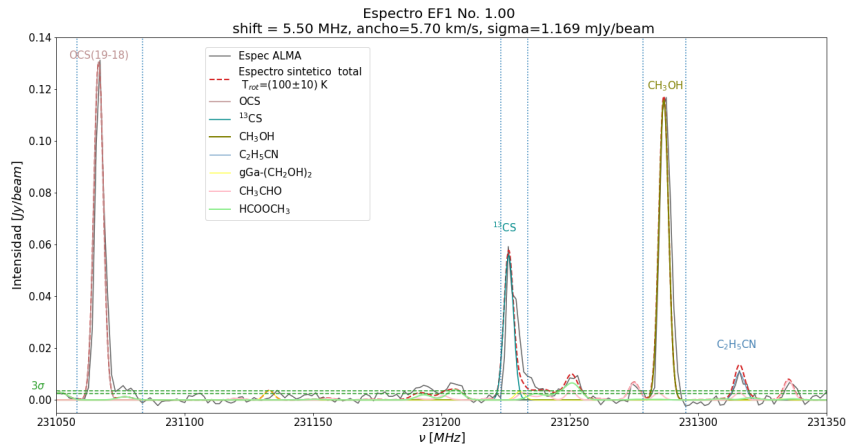
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.10a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

Para EF1 la mayoría de líneas se pueden ajustar razonablemente con una sola gaussiana, excepto para el  $^{13}\text{CS}$ , que presenta un claro exceso al azul, lo cual podría indicar que el material está en caída.

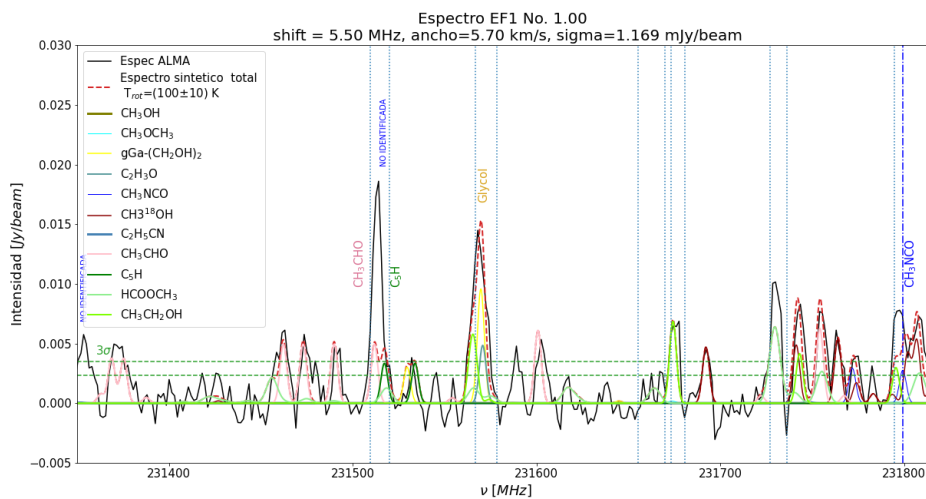


(a) zoom 230.55-231.04 GHz

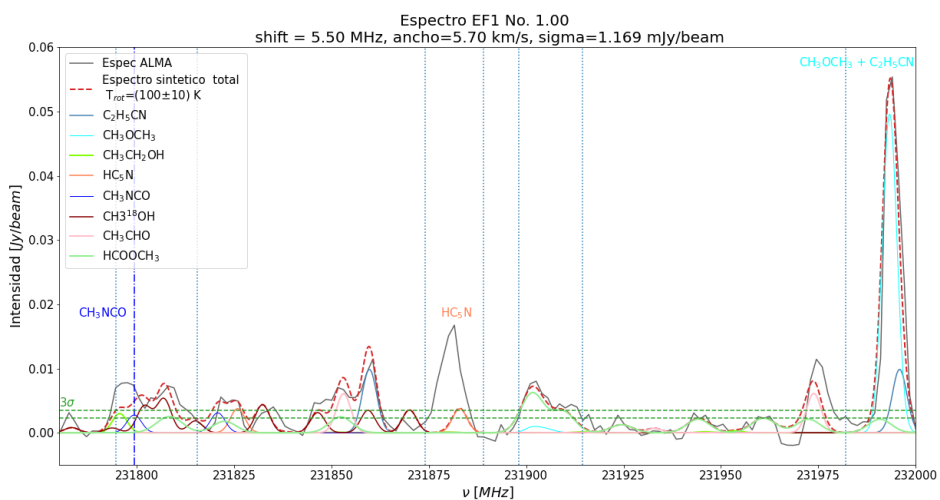


(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.11: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente EF1 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

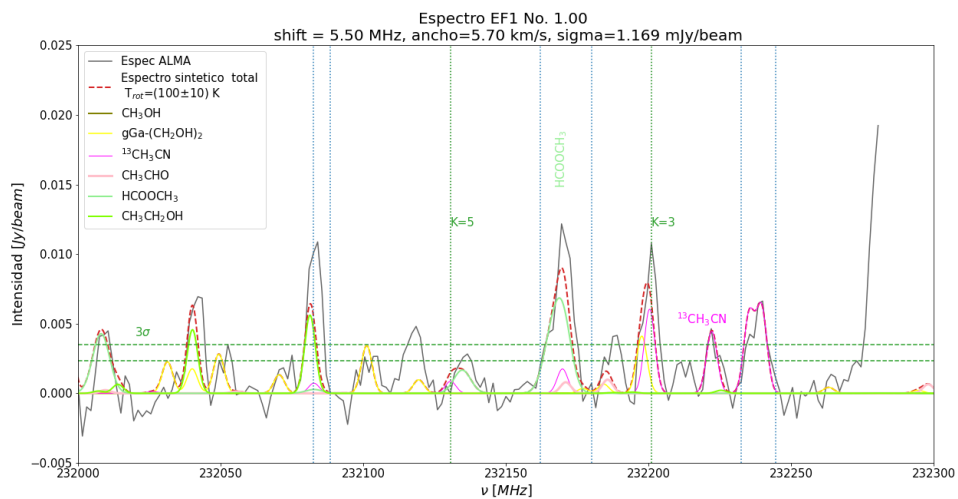


(c) Zoom 231.35 - 231.8 GHz



(d) zoom 231.8 - 232.02 GHz

Figura 3.11: *Continuación.*



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.11: *Continuación.*

## Emisión integrada en EF1 (por molécula)

Se muestran a continuación el momento cero de cada molécula en la fuente EF1. Se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada imagen se especifican los canales usados para su obtención.

Los momento cero muestran en algunos casos emisión hacia el suroeste de EF1. Esto se puede ver en  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$  y  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ . En el capítulo 5 se discute la posible relación con el flujo molecular de EF1.

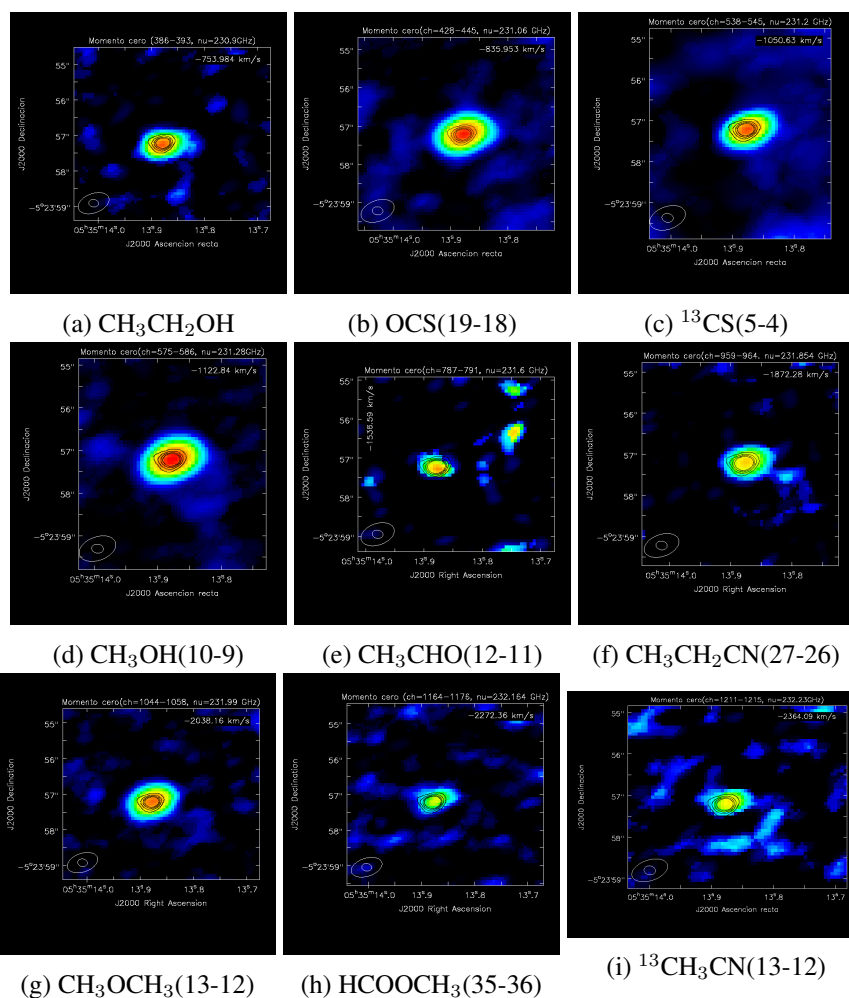
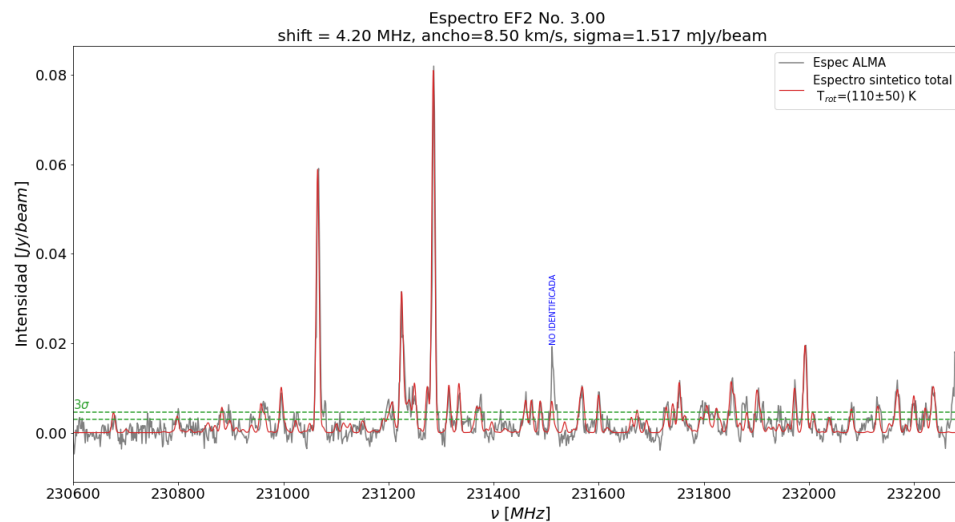


Figura 3.12: Momento cero para la fuente EF1 en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

### 3.5. Fuente EF2



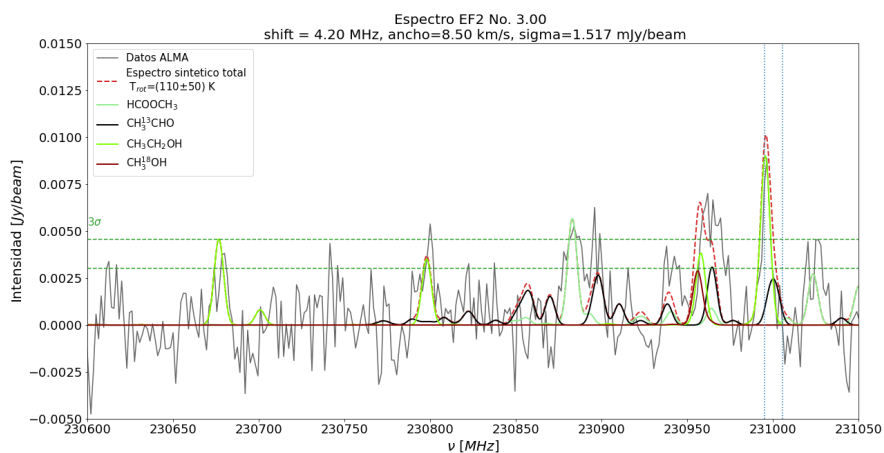
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.13: Espectro de la fuente EF2 observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

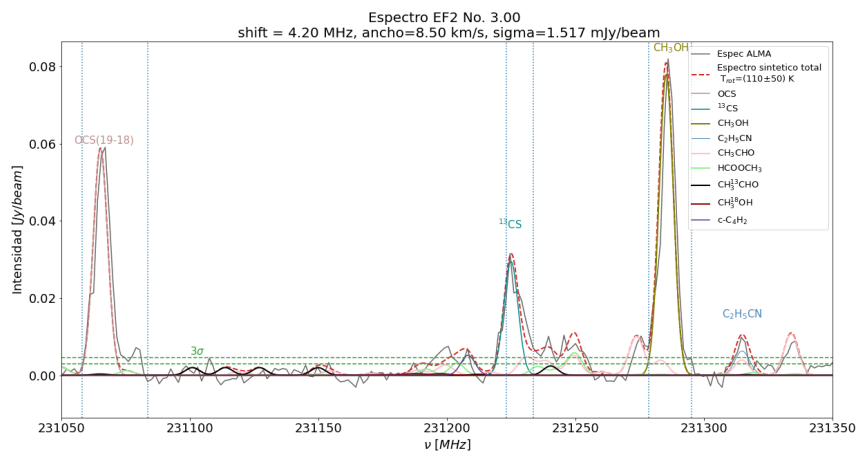
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.13a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

En este caso, algunas transiciones presentan un poco de exceso hacia el azul, siendo el  $^{13}\text{CS}(5-4)$  uno de los casos. Esto podría indicar que el material está en caída.



(a) zoom 230.55-231.04 GHz



(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.14: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente EF2 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

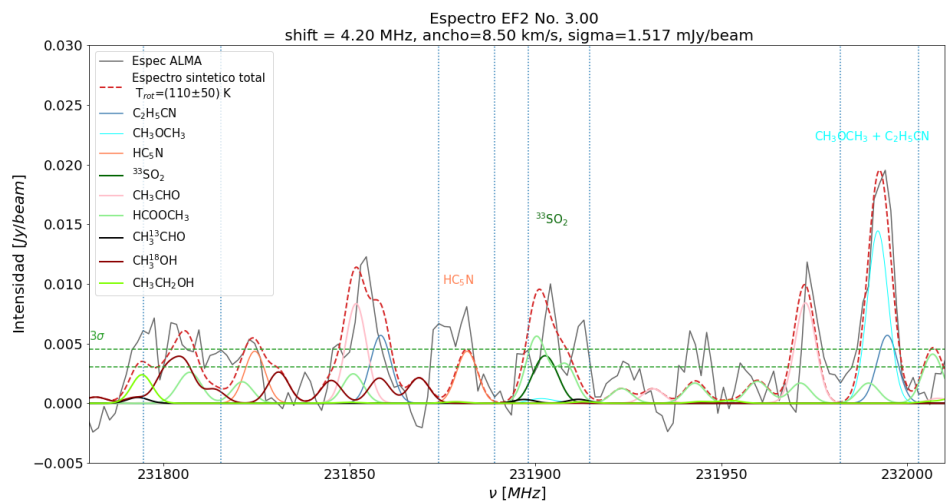
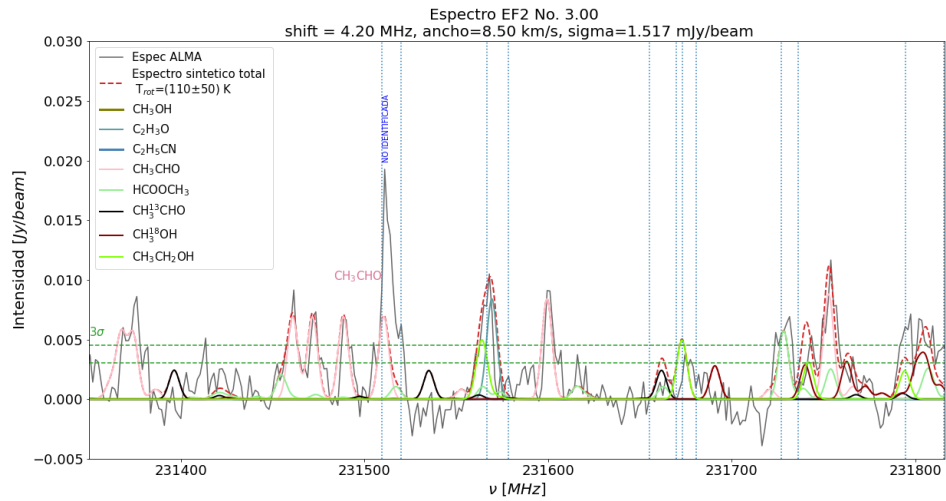
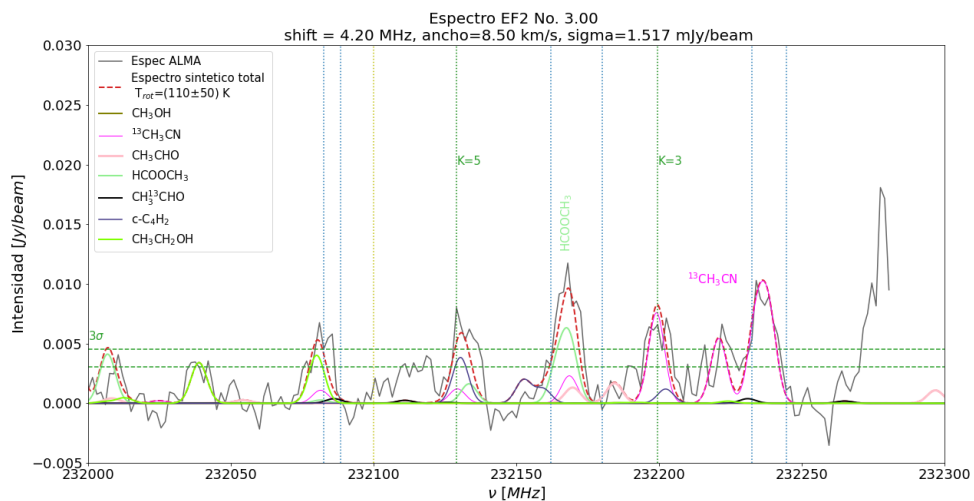


Figura 3.14: *Continuación.*





(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.14: *Continuación.*

## Emisión integrada en EF2 (por molécula)

Se muestran a continuación el momento cero de cada molécula en la fuente EF2. Se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada imagen se especifican los canales usados para su obtención.

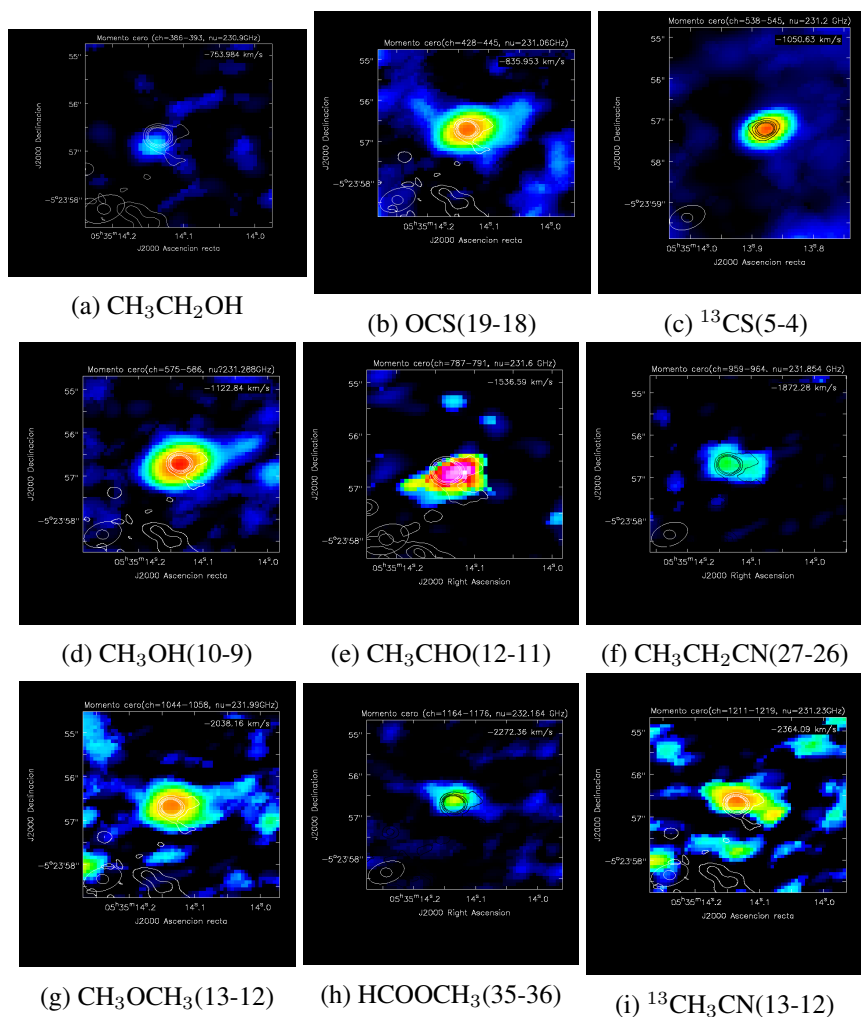
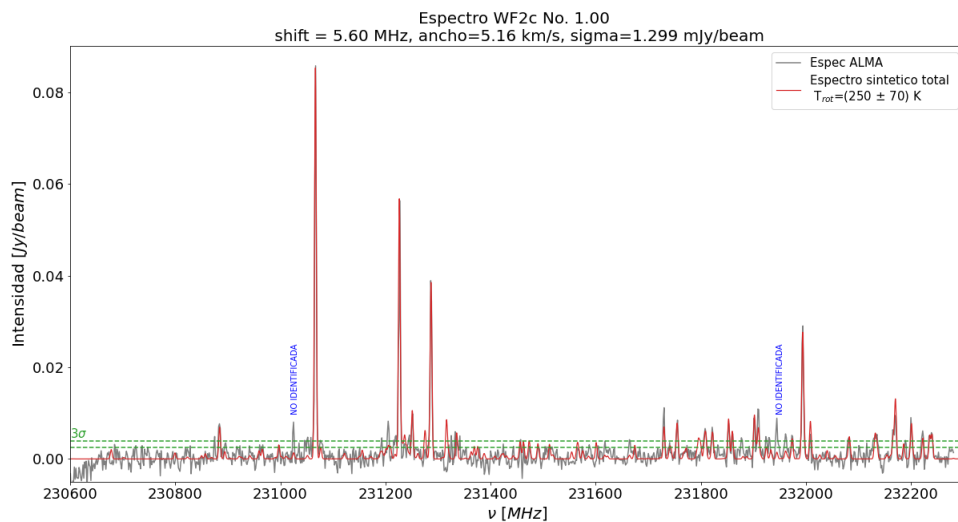


Figura 3.15: Momento cero para la fuente EF2 en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

### 3.6. Fuente WF2c



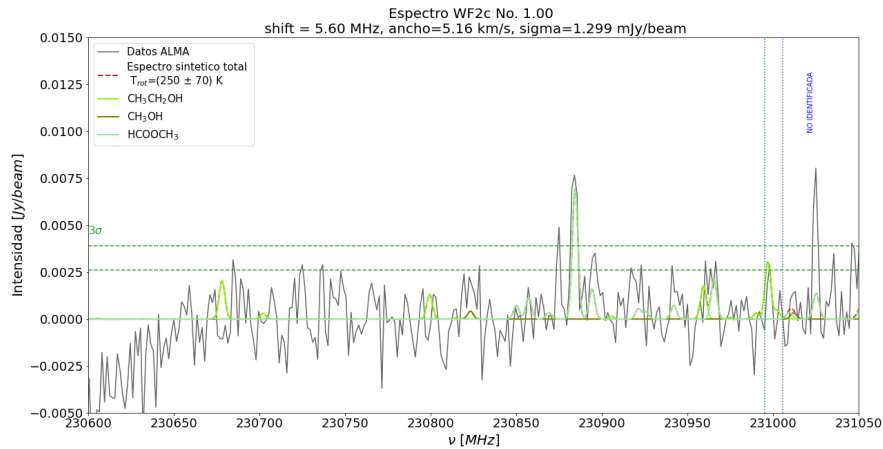
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.16: Espectro de la fuente WF2c observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

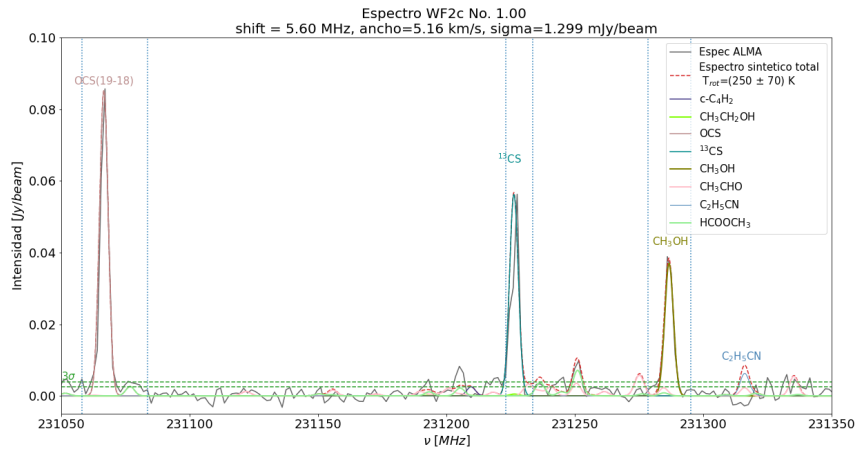
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.16a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

La mayoría de las líneas se pueden reproducir bien con una sola gaussiana. El  $^{13}\text{CS}(5-4)$  parece tener exceso al azul, lo que podría indicar material en caída.



(a) zoom 230.55-231.04 GHz



(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.17: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente WF2c de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

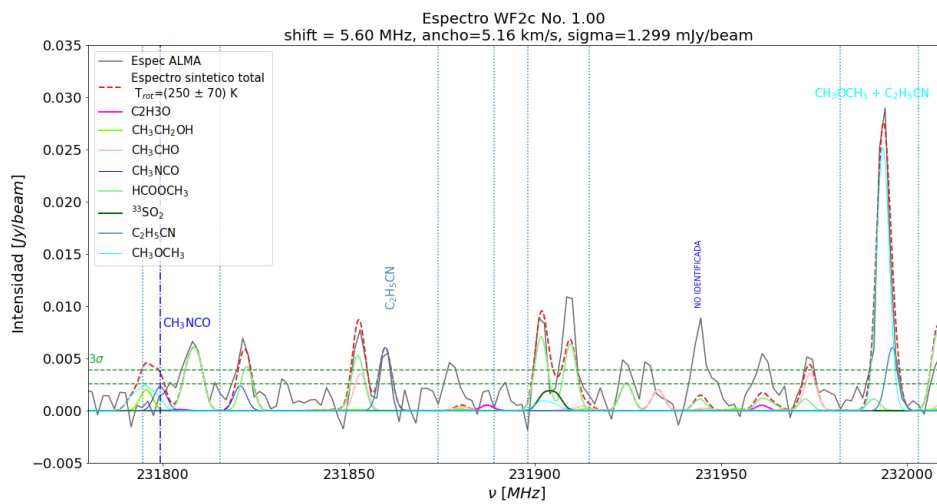
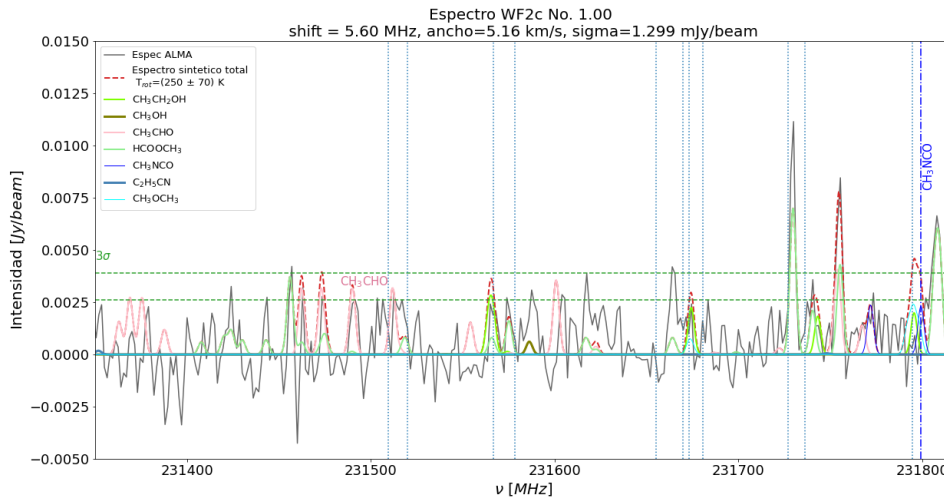
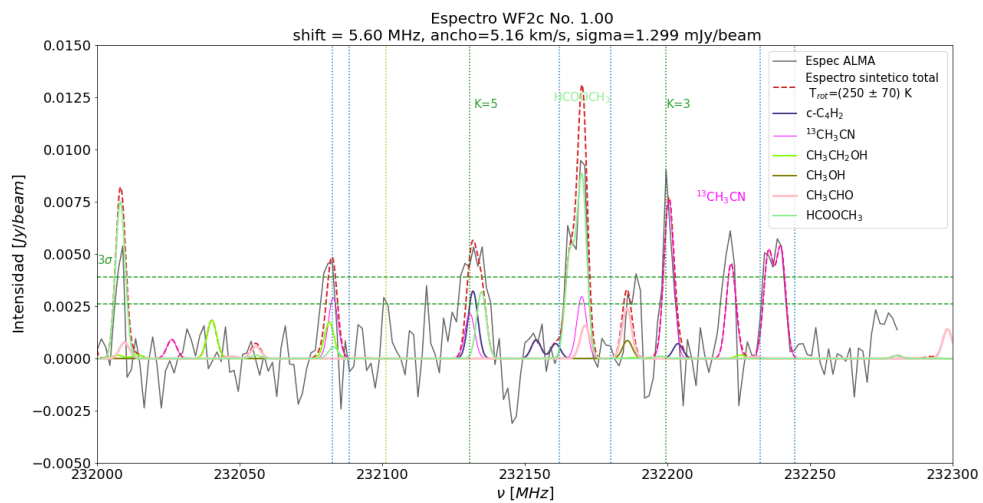


Figura 3.17: *Continuación.*



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.17: *Continuación.*

## Emisión integrada en WF2c (por molécula)

Se muestran a continuación el momento cero de cada molécula en la fuente WF2c. Se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada imagen se especifican los canales usados para su obtención.

Como se discute en el capítulo 5, WF2c parece ser la fuente impulsora de un flujo molecular en la dirección este-oeste. Es importante notar que encontramos moléculas complejas claramente asociadas a la cavidad del flujo, como son el  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ,  $\text{HCOOCH}_3$ ,  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  e incluso el  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ . También el  $^{13}\text{CS}$  parece trazar la cavidad de este.

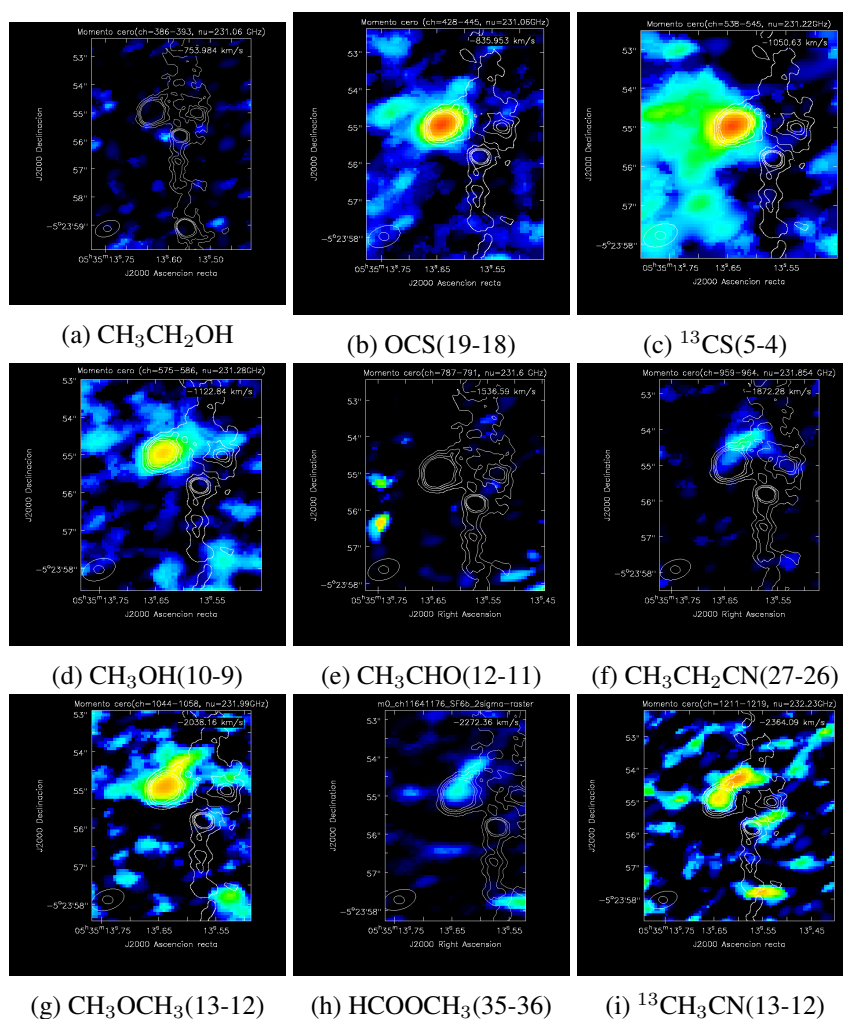
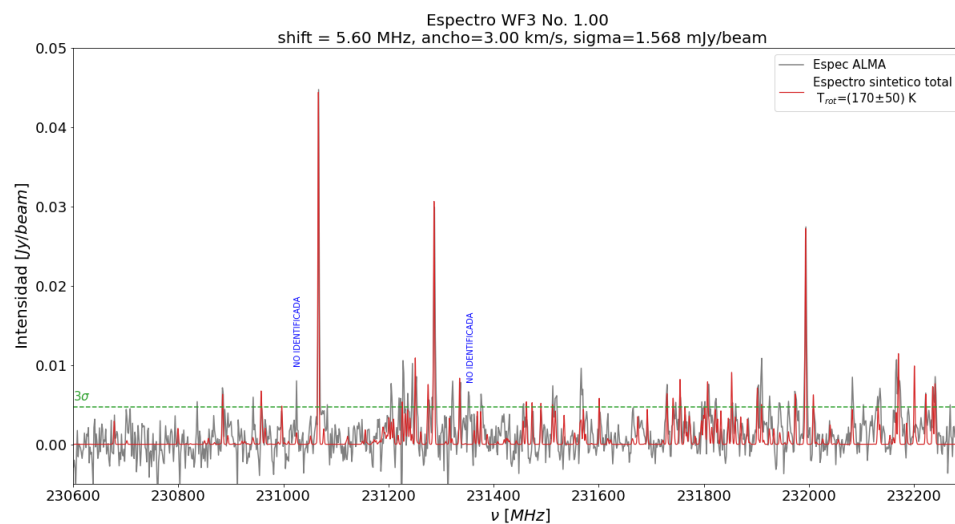


Figura 3.18: Momento cero para la fuente WF2c en la región OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

### 3.7. Fuente WF3



(a) Espectros sintéticos sumados

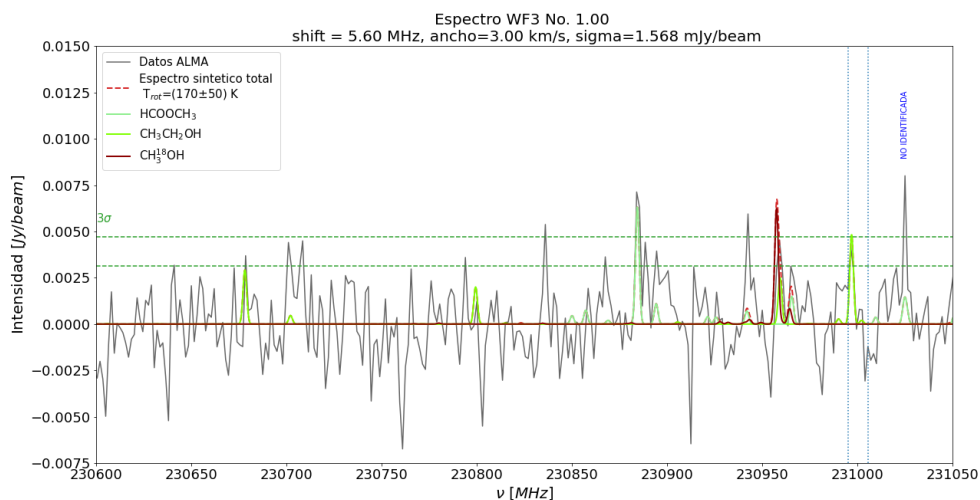
Figura 3.19: Espectro de la fuente WF3 observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.



## Acercamientos

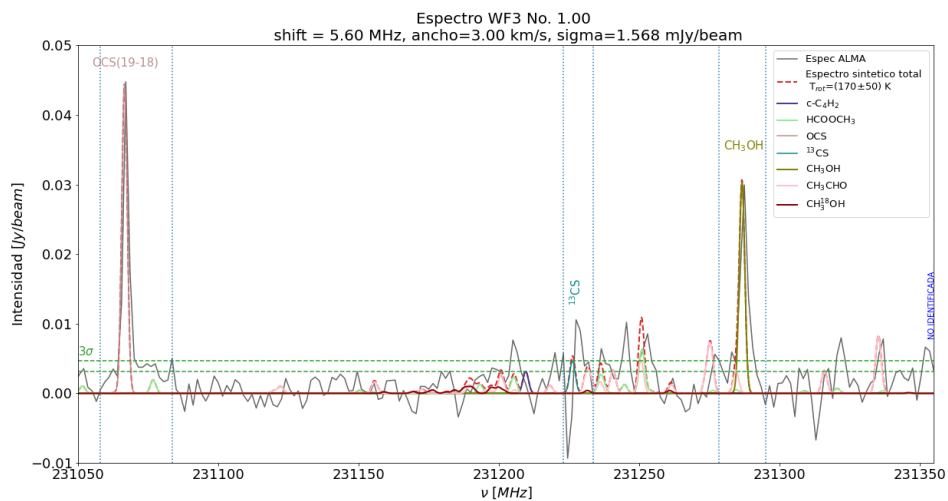
A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.19a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

Para este caso, algunas transiciones se ajustan razonablemente bien con una sola gaussiana como el OCS(19-18)(19-18), mientras otras presentan un exceso de emisión en el azul, como el CH<sub>3</sub>OH(10-9). Por otro lado, el <sup>13</sup>CS(5-4) (figura 3.20b) presenta absorción en el rojo y emisión en el azul, lo cual se conoce en la literatura como un perfil P-Cygni inverso y es un indicador del material en caída. En el *hot corino* IRAS 16293B se encontró también este tipo de perfil en una transición del HCOOCH<sub>3</sub>(Pineda et al. (2012)).

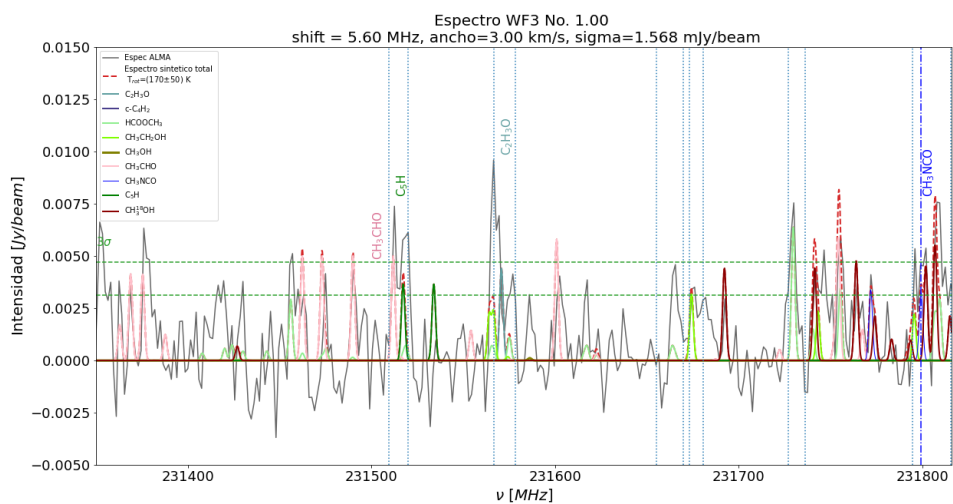


(a) zoom 230.55-231.04 GHz

Figura 3.20: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente WF3 de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

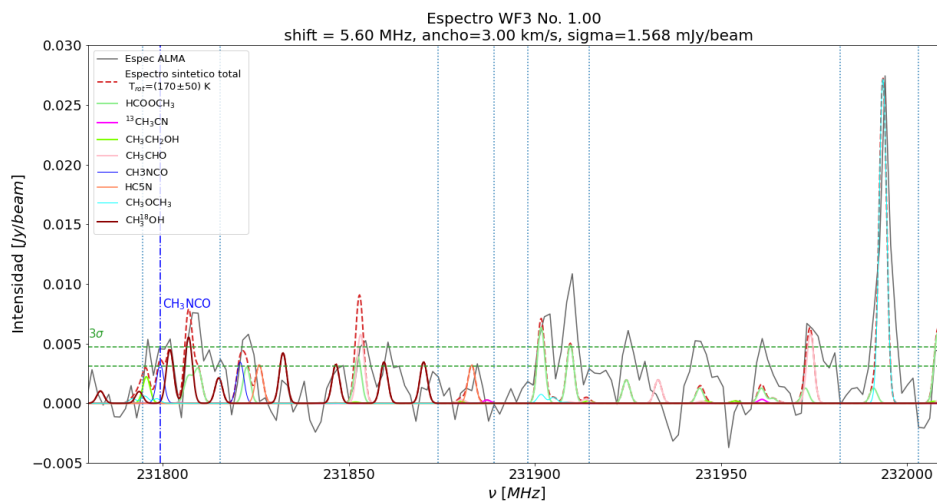


(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

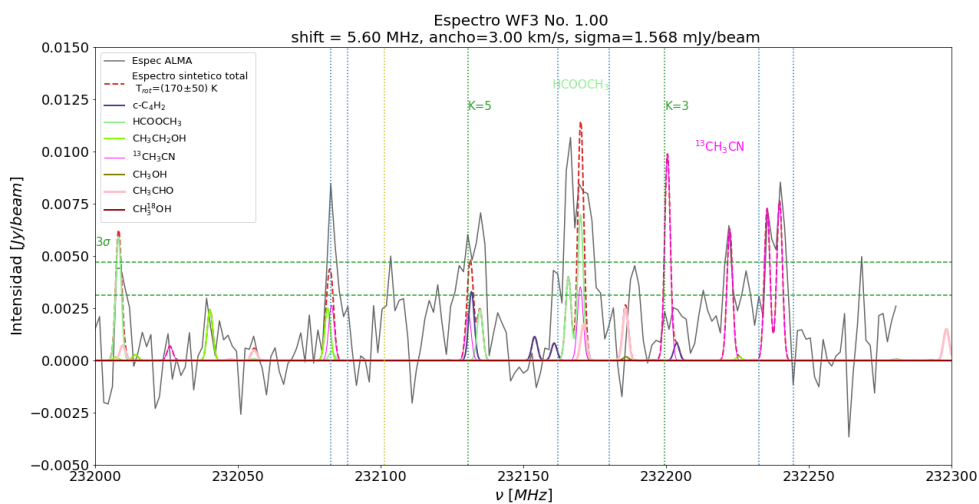


(c) Zoom 231.35 - 231.8 GHz

Figura 3.20: *Continuación.*



(d) zoom 231.8 - 232.02 GHz



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.20: *Continuación.*

## Emisión integrada en WF3 (por molécula)

Se muestran a continuación el momento cero de cada molécula en la fuente WF2c. Se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada imagen se especifican los canales usados para su obtención.

Mientras que el OCS(19-18)(19-18) y el CH<sub>3</sub>OH presentan estructuras alargadas, el CH<sub>3</sub>CHO, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, HCOOCH<sub>3</sub> y el CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN tienen el pico de la emisión desplazado hacia el oeste, como en la dirección de la cavidad creada por el flujo molecular más energético de OMC-1S (Zapata et al. 2005, 2006 y capítulo 5).

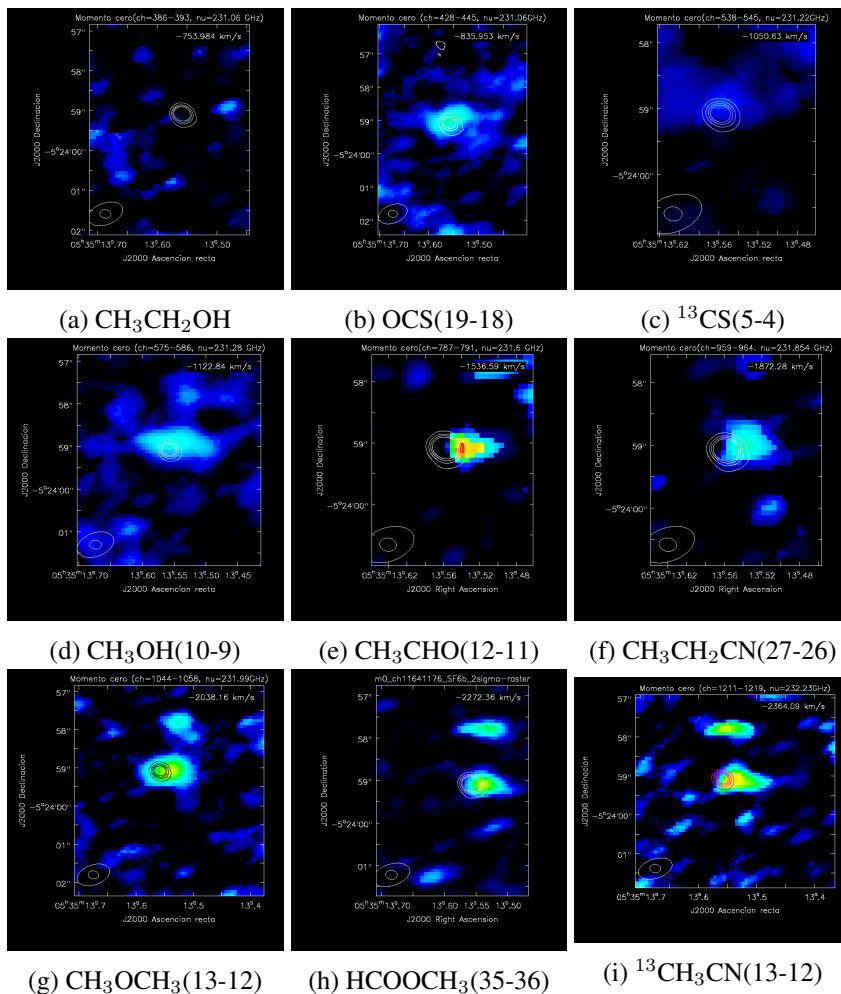
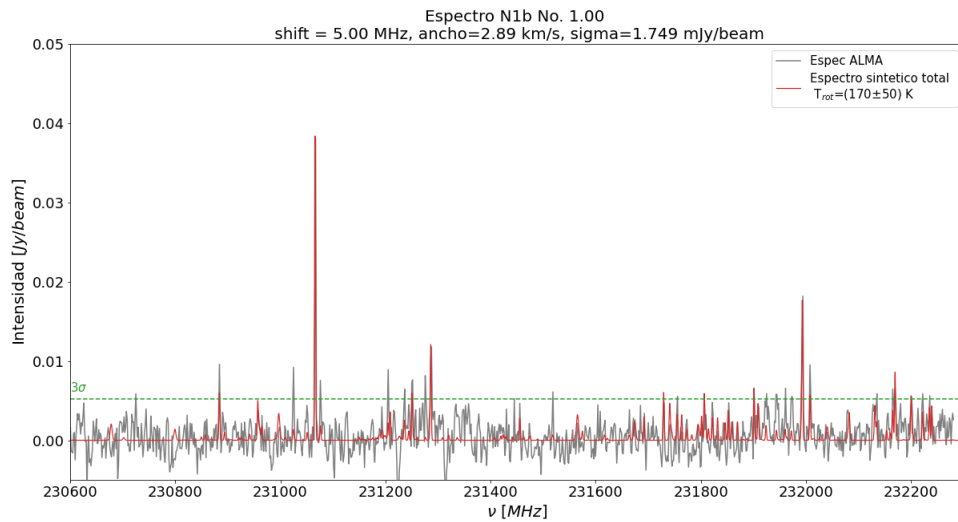


Figura 3.21: Momento cero para la fuente WF3 en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

### 3.8. Fuente N1b



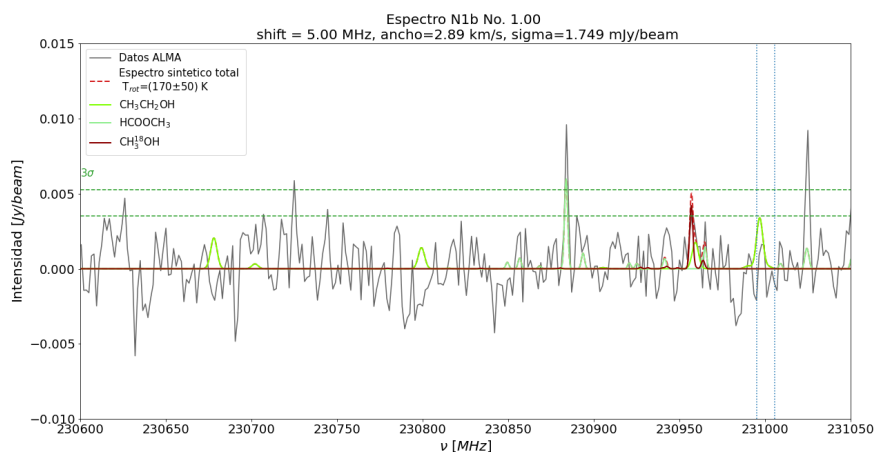
(a) Espectros sintéticos sumados

Figura 3.22: Espectro de la fuente N1b observado con ALMA (color negro) donde se la ha sobrepuesto la contribución de todas las moléculas identificadas.

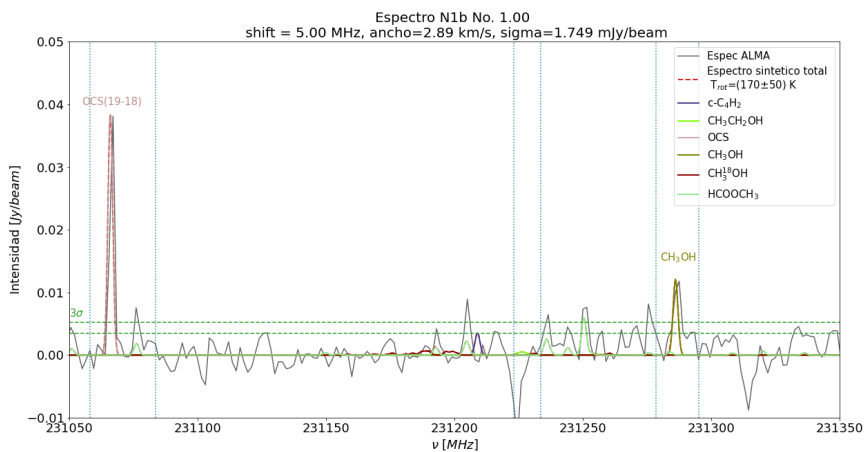
## Acercamientos

A continuación se hace un acercamiento a la figura 3.22a para una mejor observación del mismo. Las líneas verticales azules y la amarilla tienen el mismo significado que el explicado para los acercamientos de la fuente SF6b (sección 3.1).

Para N1b se puede ver en la figura 3.23b que el  $^{13}\text{CS}$  en  $\nu_0=231220.6852$  está en absorción.



(a) zoom 230.55-231.04 GHz



(b) Zoom 231.04 - 231.35 GHz

Figura 3.23: Acercamientos al espectro para toda la banda 6 de ALMA en la fuente N1b de OMC-1S. En cada figura se indican con colores la emisión de las diferentes moléculas identificadas.

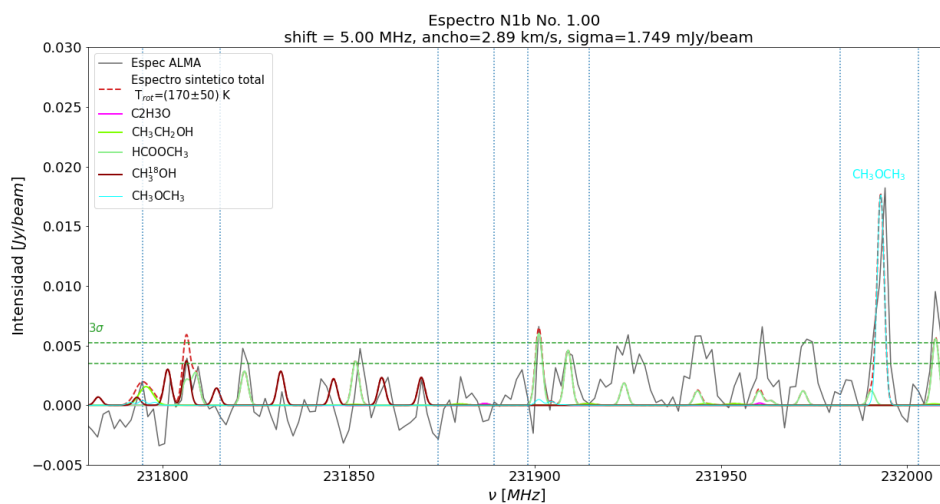
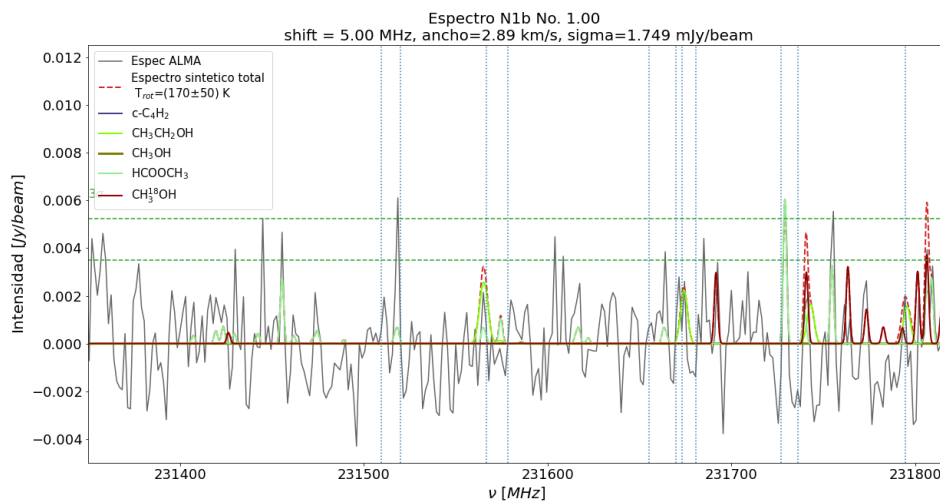
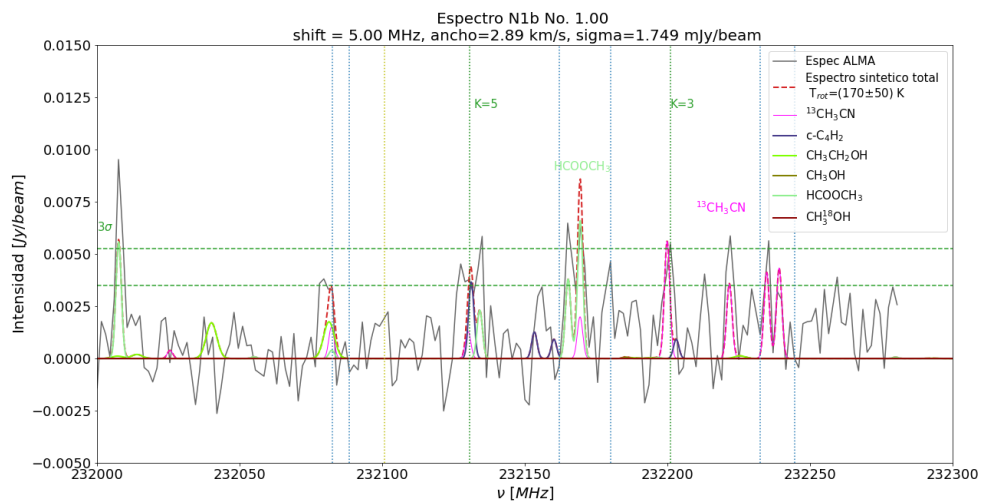


Figura 3.23: *Continuación.*



(e) zoom 232.02 - 232.3 GHz

Figura 3.23: *Continuación.*



## Emisión integrada en N1b (por molécula)

Se muestran a continuación el momento cero de cada molécula en la fuente N1b, se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm y en cada imagen se especifican los canales usados para su obtención.

Mientras que el OCS(19-18) y CH<sub>3</sub>OH tienen el pico corrido hacia el sur respecto la fuente del continuo, el CH<sub>3</sub>CHO, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, HCOOCH<sub>3</sub> y <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN presentan unas condensaciones al noreste que parecen conectar con la emisión intensa cercana a la fuente del continuo.

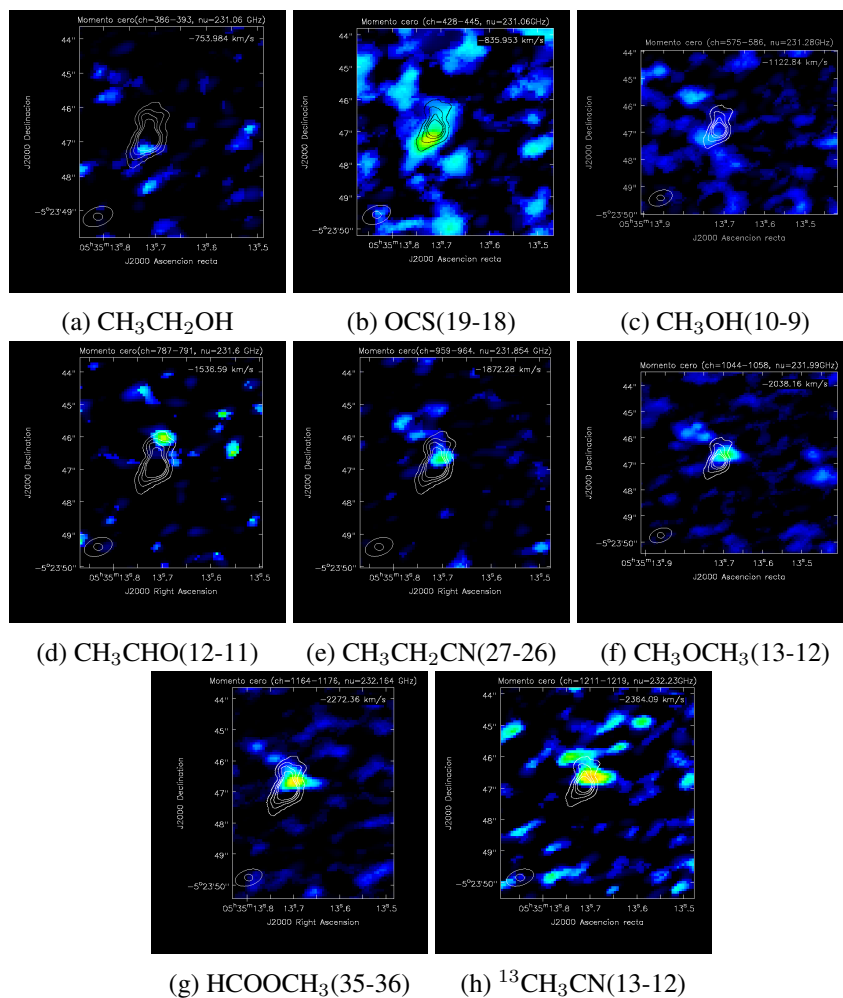


Figura 3.24: Momento cero para la fuente N1b en la region OMC-1S. En cada imagen se le ha sobrepuesto la emisión del continuo a 1.3 mm

# Capítulo 4

## Análisis

Como se explicó en el capítulo 2, el método del diagrama rotacional propuesto por Goldsmith & Langer (1999) permite relacionar la densidad columnar en el nivel superior,  $N_u$ , con la energía en el nivel superior,  $E_{up}$ , de una transición mediante las ecuaciones 2.22 y la ecuación 2.25 que a continuación se reescriben:

$$\ln\left(\frac{N_u}{g_u}\right) = \ln\left(\frac{N}{Q(T)}\right) - \frac{E_u}{kT}; \quad N_u = \frac{3k}{8\pi^3\nu S\mu^2} T_{MB} \Delta v$$

Podemos notar que para conocer  $N_u$  se deben tener los valores de frecuencia, intensidad intrínseca de la línea multiplicada por el momento dipolar al cuadrado ( $S\mu^2$ ) así como de la temperatura del haz principal de la transición y el ancho de la línea. Lo más importante para generar y ajustar un diagrama rotacional es tener varias transiciones de una misma molécula.

En el capítulo 3 se han mostrado las diferentes moléculas identificadas para cada fuente y se puede notar que la molécula que tiene varias transiciones, y la mayoría bien detectadas, es el cianuro de metilo,  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}(13-12)$ .

El  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  es una molécula del tipo top-simétrico, con lo cual para caracterizar sus niveles de energía se necesita el número cuántico correspondiente al momento angular total,  $J$ , y el número cuántico que corresponde a la proyección del momento angular sobre el eje de simetría de la molécula,  $K$ . Por tanto, a una misma transición de un nivel  $J \rightarrow J-1$  le corresponde una serie de transiciones con diferentes valores de  $K$ , lo que se conoce como la escalera de  $K$ .

En nuestro caso, la base de datos que se ha usado para generar el espectro sintético del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}(13-12)$  nos permite conocer los siguientes parámetros que se necesitan para los diagramas rotacionales:

- Frecuencia,  $\nu$  [Hz]

- Energía en el nivel superior,  $E_u$  [K]
- Intensidad intrínseca de la línea multiplicada por el momento dipolar,  $S\mu^2$

Mientras que el ancho de la línea, el cual se ha considerado el mismo para todas las transiciones de acuerdo a cada fuente estudiada, se ha derivado en el capítulo 3, la temperatura del haz principal se ha medido directamente en el espectro observado por ALMA.

En todas las fuentes que hemos estudiado se detectan las transiciones del metil formato correspondiente a  $K=0, 1, 2, 3$  siendo estas las que se observan claramente y, en algunos casos, la  $K=5$ . En todas las fuentes la  $K=4$  esta dominada por el metil formato,  $\text{HCOOCH}_3$ , por lo cual no se ha considerado para hacer el diagrama rotacional, además de que esta línea ha sido la que se ha usado para ajustar la densidad columnar del metil formato.

Como se vio en el capítulo 3, específicamente en las figuras 3.2e, 3.5e, 3.8e, 3.11e, 3.14e, 3.17e, 3.20e y 3.23e cuyo rango en frecuencia cubren 232.02-232.3 GHz, varias transiciones de otras moléculas podrían estar mezclándose con las transiciones  $K=3$  y  $K=5$ , por lo que se han hecho las siguientes consideraciones:

- La transición  $K=3$  puede estar mezclada en algunas fuentes con una transición débil de etilenglicol,  $g'\text{Ga}-(\text{CH}_2\text{OH})_2$ . Para estos casos, se ha tomado el criterio de considerar la contribución del etilenglicol cuando se han detectado al menos 3 transiciones por arriba de  $3\sigma$  en la zona de baja frecuencia de los espectros (230.55-231.04 GHz) donde se observan las líneas del  $g'\text{Ga}-(\text{CH}_2\text{OH})_2$  que están aisladas.

En este caso (fuente EF1, ver sección 4.1.1), se ha ajustado la intensidad del etilenglicol con la línea de mayor intensidad dentro del rango de baja frecuencia, específicamente, la línea que se encuentra en  $\nu \sim 230.933$  GHz. De esta forma, como primera aproximación, la intensidad de la transición del etilenglicol que se mezcla con la transición  $K=3$  queda determinada usando en el espectro sintético una temperatura característica de *hot corinos* que aquí tomamos de 200 K, que es el promedio de las temperaturas que obtiene Orozco-Aguilera et al. (2019) para SF6b y SF3 usando  $\text{CH}_3\text{CN}$ . Se obtiene la temperatura del diagrama rotacional y se vuelve a sumar en el espectro sintético del  $g'\text{Ga}-(\text{CH}_2\text{OH})_2$  con esta nueva temperatura rotacional, y se vuelve a hacer el diagrama rotacional. Este proceso iterativo se ha repetido 2 o 3 veces hasta que converge.

- Para la  $K=5$  en algunas fuentes (SF6b, SF4 y SF3, ver sección 4.1.2) su intensidad se puede explicar como proveniente toda del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  y en estos casos se ha tomado directamente la intensidad medida en el espectro observado.

En cambio, en otras fuentes (EF1, EF2, WF3 y N1b, ver sección 4.1.3) se detectó un exceso considerable de emisión que, si se toma todo como proveniente de la  $K=5$  da una temperatura no realista (negativa) en el diagrama rotacional. En estos casos se buscó una posible transición que pudiera estar mezclándose y se encontraron tres posibles moléculas: OS<sup>17</sup>O, HCOOD y c-C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>. Se hicieron los espectros sintéticos para cada una y la única que parece no ser descartable es la butadina, c-C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>.

La butadina presenta dos transiciones detectables en nuestro rango de frecuencia observado total, y de hecho, la transición de baja frecuencia ( $\nu_0=231203.9912$ ) parece haber sido detectada en SF6b y WF2c. En los casos claros de exceso de emisión en  $K=5$  pero donde no se ha detectado la transición de c-C<sub>4</sub>H<sub>2</sub> de baja frecuencia se ha tomado como criterio que la línea predicha por nuestro espectro sintético a baja frecuencia tenga una intensidad aproximada a  $2\sigma$  y, de esta forma quede determinada la intensidad para la transición que se mezcla con la  $K=5$ . Haciéndolo así, se reproduce de forma muy razonable el exceso de emisión que se encuentra en algunos casos en  $K=5$ . Por tanto, la intensidad de la  $K=5$  que se toma en estos casos es la que resulta de restar a la intensidad observada la contribución de c-C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>.

## 4.1. Diagramas rotacionales

A continuación se muestran los resultados de graficar el valor de la energía en el nivel superior de distintas transiciones de la molécula <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN(13-12) contra el valor obtenido de su densidad columnar. *Python* permite hacer un ajuste lineal a los datos con la herramienta *Polyfit* de la librería de *numpy*. Este ajuste directamente nos da el valor de la pendiente, con la que se obtiene la temperatura rotacional ( $T_{rot}$ ) así como también el valor de la intercepción del ajuste con el eje  $y$ , que aquí no vamos a usar.

En el apéndice D se encuentra un ejemplo del código utilizado para crear los diagramas rotacionales. Los parámetros que *Splatalogue* nos proporciona para cada transición del <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN(13-12) son:

Parámetro	$K=5$	$K=3$	$K=2$	$K=1$	$K=0$
$\nu$ (MHz)	232125.1297	232194.9056	232216.7263	232229.8223	232234.1883
$S\mu^2$ (D <sup>2</sup> )	340.77096	757.22218	390.43308	397.57222	399.88790
$E_u$ (K)	256.87423	142.42947	106.65121	85.18112	78.02380

Tabla 4.1: Parámetros moleculares para las cinco transiciones del <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN(13-12).

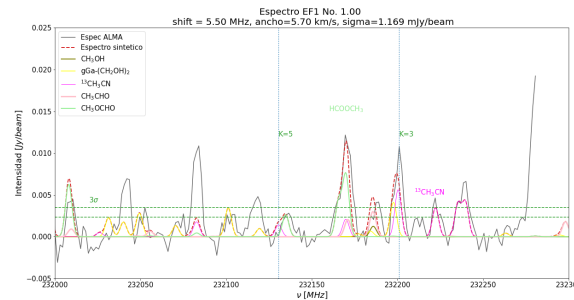
Para una mejor comprensión de los resultados obtenidos se han clasificado los diagramas rotacionales de las 8 fuentes en tres categorías:

- **Caso 1:** No hay emisión significativa en  $K=5$  del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ : EF1.
- **Caso 2:** La emisión en  $K=5$  se puede explicar toda como proveniente del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ : SF6b, SF4, SF3.
- **Caso 3:** La emisión en  $K=5$  presenta un claro exceso respecto al  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  y requiere de la contribución de otra molécula: EF1, EF2, WF3, N1b.

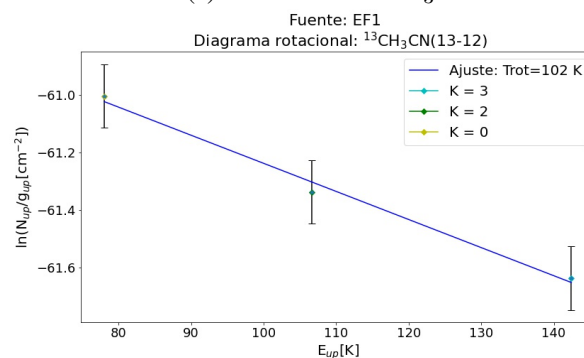
#### 4.1.1. Caso 1: $K=5$ no detectada

##### EF1

En esta fuente no se ha considerado la transición  $K=5$  del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  porque no se detecta (ver figura 4.1a). Por otro lado, EF1 es la única fuente que cumple con nuestro criterio para el etilenglicol, g'Ga-( $\text{CH}_2\text{OH}$ )<sub>2</sub> (ver figura 3.11a). En la figura 4.1a se muestra el espectro sintético del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  con la contribución del g'Ga-( $\text{CH}_2\text{OH}$ )<sub>2</sub> en  $K=3$ . En la figura 4.1b se muestra el diagrama rotacional obtenido tras la sustracción de la emisión del etilenglicol a la transición  $K=3$ .



(a) Transiciones  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$



(b) Diagrama rotacional

Figura 4.1: Espectro y diagrama rotacional para la fuente EF1. El error presentado es  $2\sigma_{\text{espec}}$ .

---

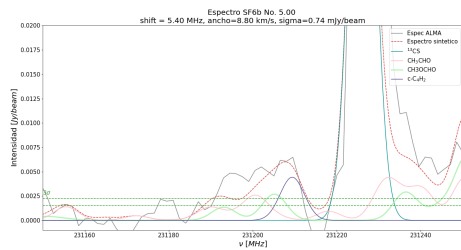
### 4.1.2. Caso 2: $K=5$ puede no estar mezclada con otra molécula

#### SF6b

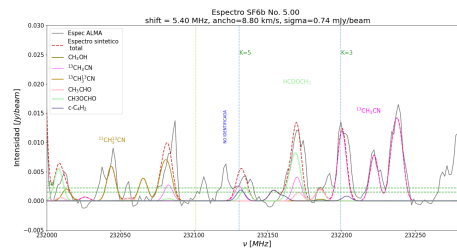
En SF6b no se aprecia emisión obvia de etilenglicol en el espectro observado (ver figura 3.2a), por lo que no se ha tenido en cuenta esta molécula como posible contribuyente a la emisión de  $K=3$  del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ .

Respecto a la transición  $K=5$ , la intensidad observada se puede explicar por la emisión de la misma molécula del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ . Suponiendo que toda la intensidad observada proviene de esta molécula se determina una temperatura de  $\sim 115$  K en el diagrama rotacional, figura 4.2c. Sin embargo, suponiendo que la emisión a la frecuencia de  $K=5$  puede estar mezclada con la emisión de la butadina,  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  y ajustando su línea de baja frecuencia,  $\nu_0=231203.9912$  (figura 4.2a) que sí parece detectable, se puede sustraer su contribución correspondiente a la frecuencia de  $K=5$ . De esta manera, el diagrama rotacional determina una temperatura de  $\sim 61$  K, figura 4.2d.

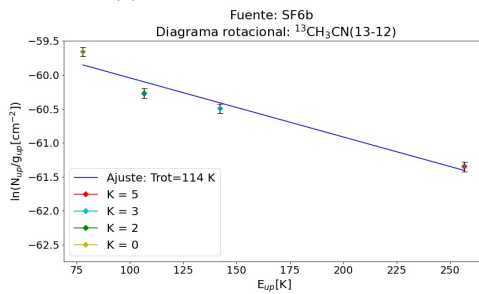
Como no sabemos a ciencia cierta si la transición a baja frecuencia del  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  realmente corresponde a esta molécula (porque no detectamos ninguna otra transición del  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en nuestro espectro), como temperatura rotacional de SF6b tomamos el promedio de los dos casos, obteniendo una  $T_{rot}=90\pm 30$  K. Esta  $T_{rot}$  es muy consistente con la que encuentra Orozco-Aguilera et al. (2019) para SF6b usando  $\text{CH}_3\text{CN}(12-11)$  con el SMA.



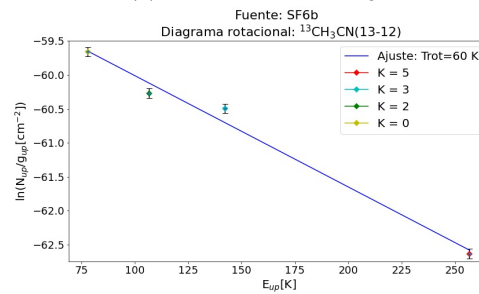
(a) Acercamiento en  $c\text{-C}_4\text{H}_2$ .



(b) Transiciones  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$



(c) Diagrama rotacional



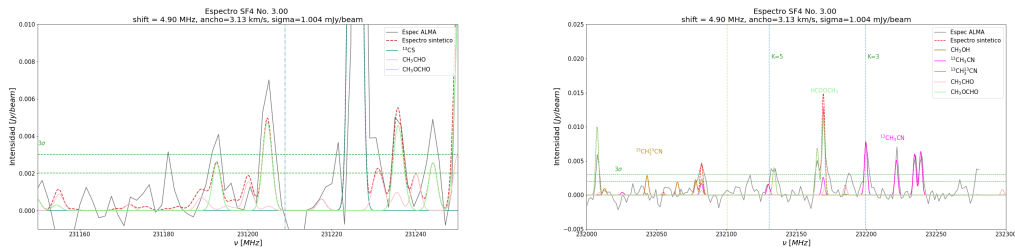
(d) Diagrama rotacional

Figura 4.2: Espectro y diagrama rotacional para la fuente SF6b. En la figura 4.2a se observa la contribución de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia, la cual se ha ajustado en conjunto con la emisión de las otras moléculas identificadas en el rango. En el diagrama rotacional de la figura 4.2c se ha considerado la línea en  $K=5$  únicamente proveniente del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  mientras que en la figura 4.2d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{\text{espec}}$ .

## SF4

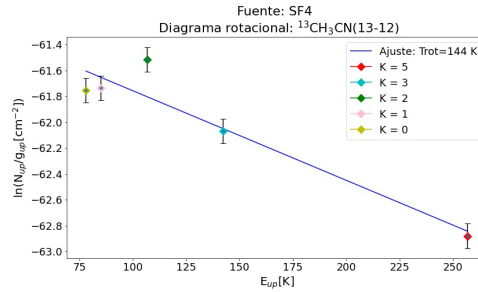
En este caso en el espectro observado no se ven indicios de emisión a las frecuencias donde emite el etilenglicol (ver figura 3.5a), por lo que se ha usado toda la intensidad observada a la frecuencia de  $K=3$  como proveniente del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  en el diagrama rotacional.

Por otro lado, la intensidad observada a la frecuencia de  $K=5$  se puede explicar por el mismo  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ , por lo que se ha usado toda la intensidad observada a esta frecuencia en el diagrama rotacional. Además, la posible molécula de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  que se podría estar mezclando con la  $K=5$  no presenta ninguna transición detectada a baja frecuencia (figura 4.3a). De esta manera, se ha encontrado una temperatura rotacional de 144 K en SF4.



(a) Acercamiento  $c\text{-C}_4\text{H}_2$

(b) Transiciones  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$



(c) Diagrama rotacional

Figura 4.3: Espectro y diagrama rotacional para la fuente SF4. En la figura 4.3a se ha agregado una línea vertical azul punteada indicando la posición de la línea a baja frecuencia de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$ , la cual en este caso no ha sido necesaria considerar. En la figura 4.3c se muestra el diagrama rotacional considerando  $K=3$  y  $K=5$  proveniente únicamente del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ . El error presentado es  $2\sigma_{\text{spec}}$ .



## SF3

SF3 no cumple el criterio descrito arriba para considerar al etilenglicol como detectado (ver figura 3.8a), por tanto, no se ha considerado como posible contribuyente sobre la línea en  $K=3$  del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ .

En cuanto a la  $K=5$ , si esta no se incluye en los diagramas se obtiene una temperatura rotacional de  $\sim 95$  K pero hay emisión claramente arriba de  $3\sigma$  en la frecuencia de  $K=5$ . Si consideramos a  $K=5$  proveniente únicamente de  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  se obtiene la figura 4.4c con una  $T_{rot}=348$  K. De todas formas, para considerar la posibilidad de que la  $K=5$  puede estar contaminada por el  $c\text{-C}_4\text{H}_2$ , se revisó si había emisión de butadina en la línea de baja frecuencia y no se encontró emisión clara. Considerando que hay  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  hasta  $2\sigma$  en la línea de baja frecuencia se obtiene un límite inferior para la intensidad de la línea de  $K=5$  (ver figura 4.4d) lo cual nos da una  $T_{rot}$  de 170 K.

Dado que con nuestros datos no podemos discernir cuál de los dos casos anteriores es el correcto, se ha adoptado como  $T_{rot}$  el promedio de estos dos casos, que es  $260 \pm 90$  K. De nuevo, muy consistente con Orozco-Aguilera et al. (2019) que determinó una  $T_{rot}$  de 315 K para SF3 usando datos del SMA de  $\text{CH}_3\text{CN}(12-11)$ .

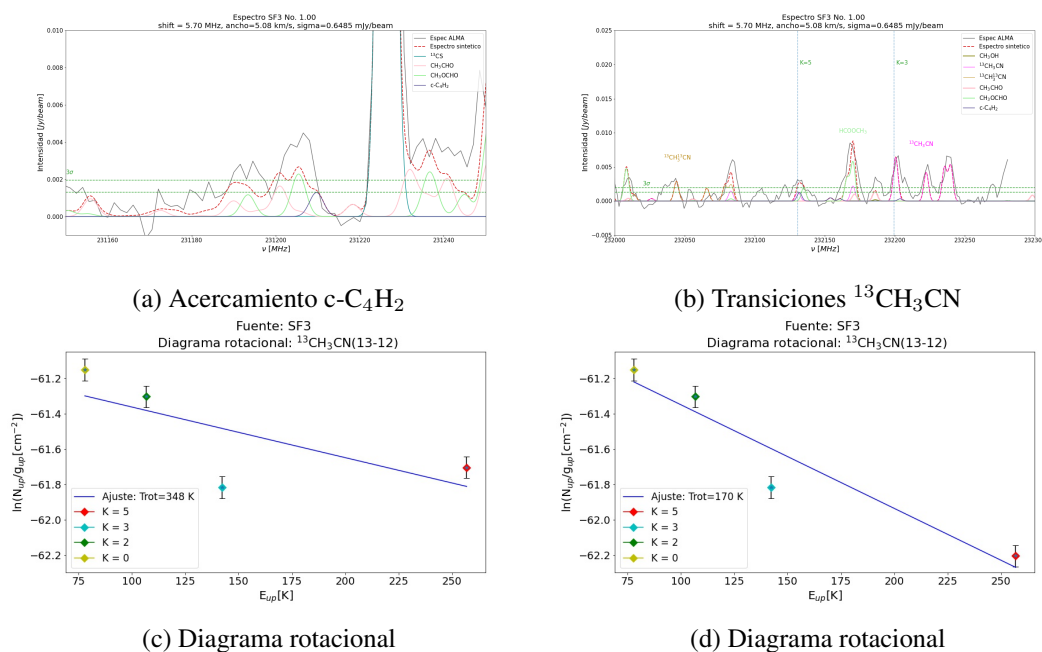


Figura 4.4: Espectro y diagrama rotacional para la fuente SF3. En la figura 4.4a se observa la contribución de  $2\sigma$  por parte de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia. En el diagrama rotacional de la figura 4.4c se ha considerado la línea en  $K=5$  únicamente proveniente del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  mientras que en la figura 4.4d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{espec}$ .

### 4.1.3. Caso 3: $K=5$ forzosamente mezclada con otra molécula

#### EF2

Esta fuente no cumple con el criterio para incluir al etilenglicol (ver figura 3.14a), mientras que la transición  $K=5$  del  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$  sí muestra exceso de emisión como se puede ver en la figura 4.5b, además de que la línea a baja frecuencia de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  muestra su posible emisión por arriba de  $2\sigma$ , por lo que en el diagrama rotacional mostrado en la figura 4.5d se ha sustraído la posible contribución de la butadina en  $K=5$ , mientras que en el diagrama de la figura 4.5c no se ha considerado la  $K=5$ . Como con nuestros datos no podemos distinguir entre estos dos casos, se ha tomado la  $T_{rot}$  como el promedio:  $110 \pm 50$  K.

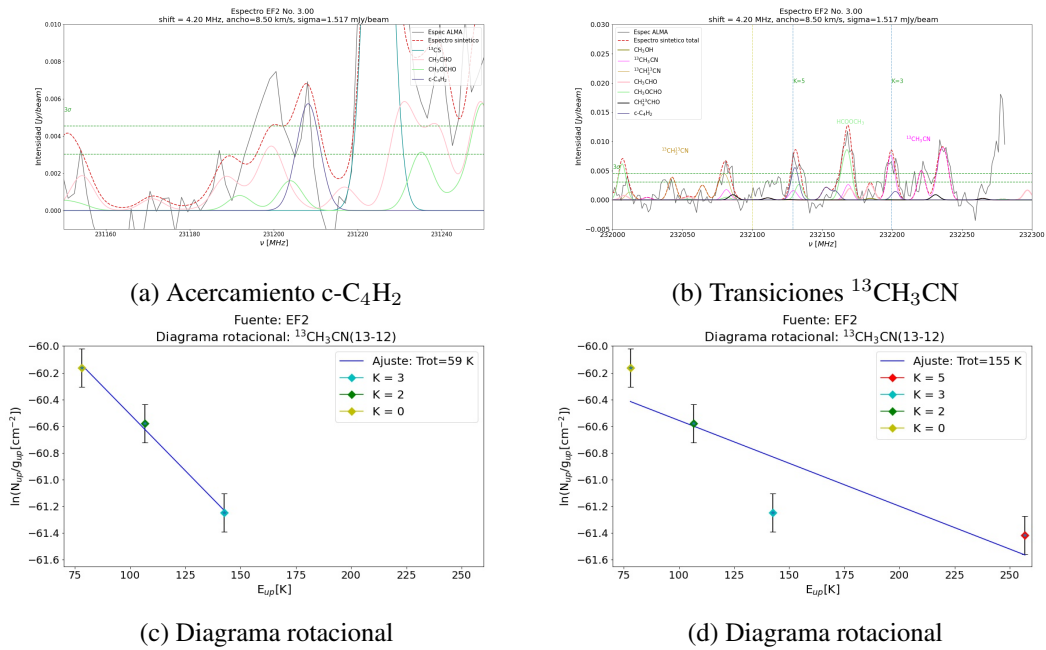


Figura 4.5: Espectro y diagrama rotacional para la fuente EF2. En la figura 4.5a se observa la contribución por arriba de  $3\sigma$  por parte de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia. En el diagrama rotacional de la figura 4.5c no se ha considerado la línea en  $K=5$  mientras que en la figura 4.5d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{spec}$ .

## WF2c

Esta fuente no cumple con el criterio para incluir al etilenglicol (ver figura 3.17a) mientras que la transición  $K=5$  sí muestra exceso de emisión. En el diagrama de la figura 4.6c no se ha considerado esta transición mientras que en el diagrama de la figura 4.6d se ha sustraído la posible contribución de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en  $K=5$  a un nivel de  $2\sigma$  (porque no está detectada la línea del  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  a baja frecuencia). Para el primer caso se obtiene una  $T_{rot}=327$  K y en el segundo caso se obtiene  $T_{rot}=176$  K. Se ha tomado  $T_{rot}$  como el promedio:  $250\pm 70$  K.

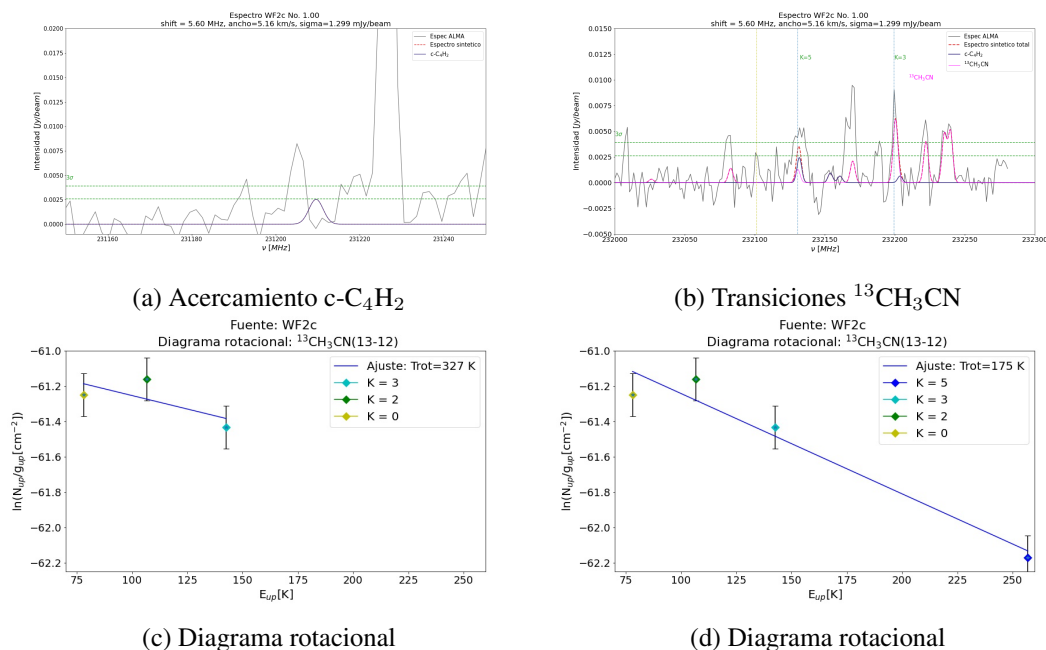


Figura 4.6: Espectro y diagrama rotacional para la fuente WF2c. En la figura 4.6a no se observa la emisión por parte de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia por lo que solo se ha ajustado a un valor de  $2\sigma$ . En el diagrama rotacional de la figura 4.6c no se ha considerado la línea en  $K=5$  mientras que en la figura 4.6d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{espec}$ .

## WF3

Esta fuente no cumple con el criterio para incluir al etilenglicol (ver figura 3.20a), sin embargo, la transición en  $K=3$  no se considera para la creación de los diagramas porque está suprimida y no la podemos reproducir con el espectro sintético.

En esta fuente la transición  $K=5$  sí muestra exceso de emisión. En el diagrama rotacional de la figura 4.7c no se considera esta transición mientras que en el diagrama de la figura 4.7d se ha sustraído la posible contribución de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en  $K=5$  considerando  $2\sigma$  para la línea de baja frecuencia. En el primer caso se obtiene una  $T_{rot}=127$  K y en el segundo se obtienen 221 K. Tomando el promedio de  $T_{rot}=170\pm 50$  K.

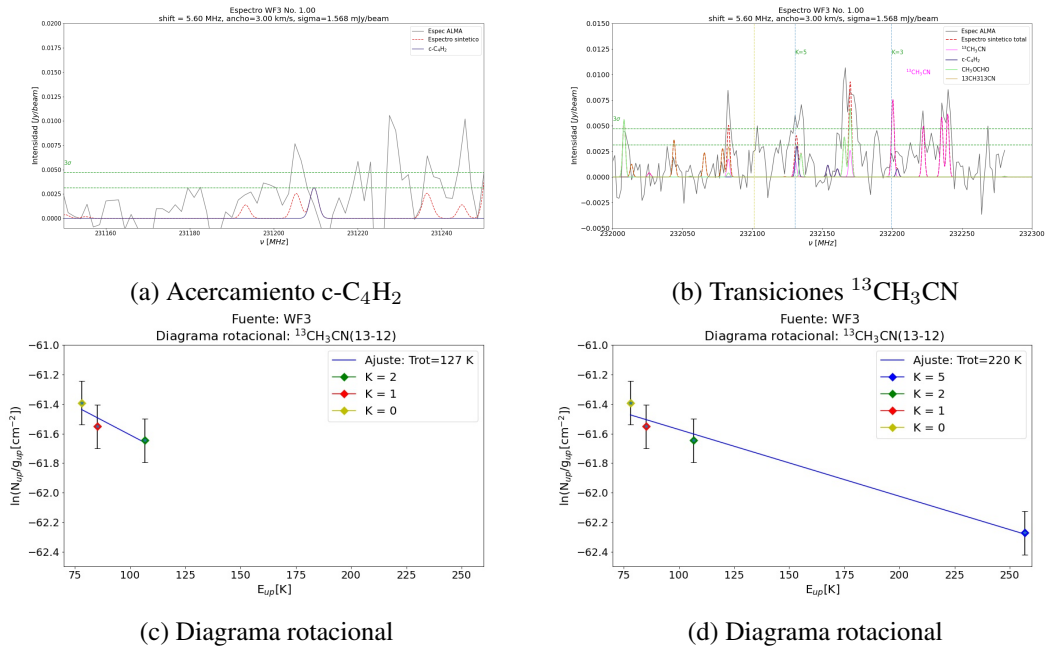


Figura 4.7: Espectro y diagrama rotacional para la fuente WF3. En la figura 4.7a no se observa la emisión por parte de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia por lo que solo se ha ajustado a un valor de  $2\sigma$ . En el diagrama rotacional de la figura 4.7c no se ha considerado la línea en  $K=5$  mientras que en la figura 4.7d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{espec}$ .

## N1b

Esta fuente no cumple con el criterio para incluir al etilenglicol (ver figura 3.23c) mientras la transición  $K=5$  sí muestra exceso de emisión. En el diagrama de la figura 4.8c no se considera esta transición mientras que en el diagrama de la figura 4.8d se ha sustraído la posible contribución de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  de  $2\sigma$  para la línea de baja frecuencia.

En este caso se intentó tomar por separado la  $K=0$  y 1 pero debido al alto ruido de este espectro no se veía una tendencia clara en el diagrama rotacional. Por ello, se promedió el área de la  $K=0$  y 1, y los resultados aquí mostrados corresponden a este caso. De todas formas, para el error se tomó un error que abarcara los valores de  $T_{rot}$  obtenidos cuando se consideran  $K=0$  y 1 por separado. Por tanto, la  $T_{rot}$  adoptada finalmente es de  $130 \pm 70$  K.

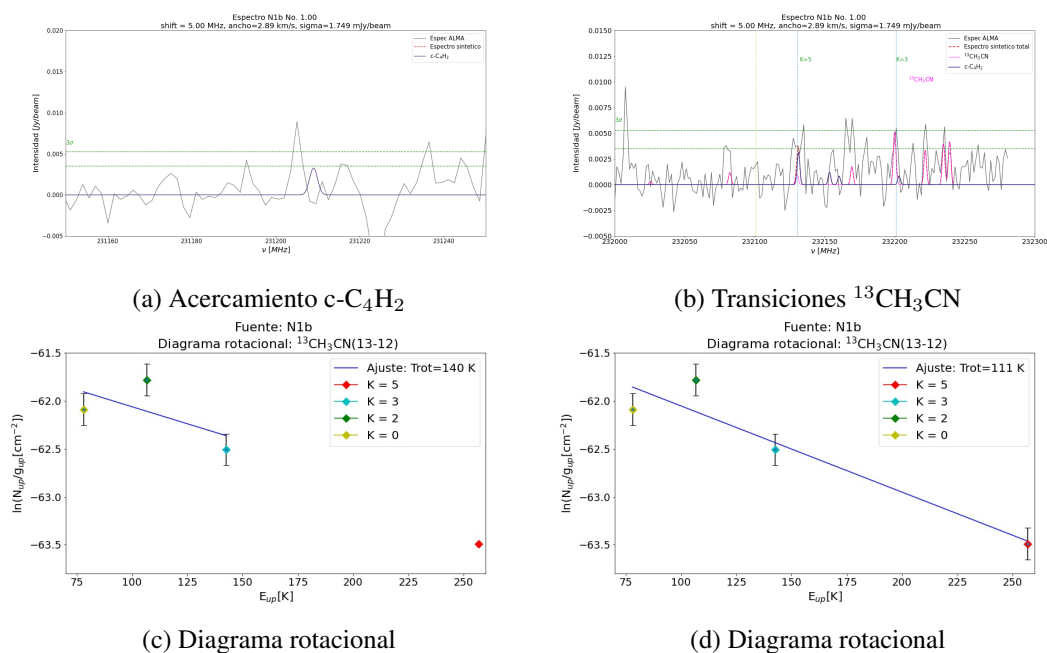


Figura 4.8: Espectro y diagrama rotacional para la fuente N1b. En la figura 4.8a no se observa la emisión por parte de  $c\text{-C}_4\text{H}_2$  en su línea de baja frecuencia por lo que solo se ha ajustado a un valor de  $2\sigma$ . En el diagrama rotacional de la figura 4.8c no se ha considerado la línea en  $K=5$  mientras que en la figura 4.8d se ha considerado la posible contribución de la butadina y se ha sustraído de  $K=5$ . El error presentado es  $2\sigma_{espec}$ .

## 4.2. Parámetros físicos

En la tabla 4.2 se muestran los parámetros físicos, como densidad columnar y temperatura rotacional, obtenidos para los 8 *hot corinos* observados en la región OMC-1S. La temperatura rotacional mostrada es la que se usó para la creación de los espectros sintéticos del presente trabajo mostrados en el capítulo 3. De esta forma, con la definición del respectivo ancho de la línea, desplazamiento en frecuencia, factor de llenado y temperatura rotacional para cada fuente con que se han generado los espectros sintéticos solo queda como parámetro libre la densidad columnar. En la tabla se muestra el valor determinado para cada molécula identificada.

Propiedad	SF6b	SF4	SF3	EF1	EF2	WF2c	WF3	N1b
$T_{rot}(K)$	90 ±30	140±30	260±90	100±50	110±50	250±70	170±50	130±70
$N_{CH_3^3CHO}(cm^{-2})$	-	-	-	-	$8.0 \times 10^{14}$	-	-	-
$N_{OCS}(cm^{-2})$	$97 \times 10^{14}$	$31.5 \times 10^{14}$	$52.0 \times 10^{14}$	$143.0 \times 10^{14}$	$78.0 \times 10^{14}$	$132.0 \times 10^{14} (cm^{-2})$	$10.7 \times 10^{14}$	$13.2 \times 10^{14}$
$N_{^{13}CS}(cm^{-2})$	$2.8 \times 10^{14}$	$1.2 \times 10^{14}$	$8.0 \times 10^{14}$	$5.6 \times 10^{14}$	$1.5 \times 10^{14}$	$2.0 \times 10^{14}$	$1.5 \times 10^{13} (cm^{-2})$	-
$N_{C_4H_2}(cm^{-2})$	$4.5 \times 10^{13}$	-	$1.3 \times 10^{13}$	-	$8 \times 10^{13}$	$2.5 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{13}$
$N_{CH_3OH}(cm^{-2})$	$18.0 \times 10^{16}$	$350.0 \times 10^{14}$	$1.15 \times 10^{17}$	$4.27 \times 10^{17}$	$2.89 \times 10^{17}$	$960.0 \times 10^{14}$	$230.0 \times 10^{14}$	$45.0 \times 10^{14}$
$N_{C_5H}(cm^{-2})$	-	-	-	$1.5 \times 10^{14}$	-	-	$0.3 \times 10^{14}$	-
$N_{CH_3CHO}(cm^{-2})$	$8.0 \times 10^{14}$	$2.4 \times 10^{14}$	$8.0 \times 10^{14}$	$5.0 \times 10^{14}$	$30 \times 10^{14}$	$7.0 \times 10^{14}$	$4.3 \times 10^{14}$	-
$N_{g^1Ga-(CH_2OH)_2}(cm^{-2})$	-	-	-	$12.5 \times 10^{14}$	-	-	-	-
$N_{C_2H_3O}(cm^{-2})$	$48.0 \times 10^{14}$	$5.0 \times 10^{13}$	$3.5 \times 10^{14}$	$1.5 \times 10^{14}$	$2.5 \times 10^{14}$	-	$1.0 \times 10^{14}$	-
$N_{HCOOCH_3}(cm^{-2})$	$300.0 \times 10^{14}$	$120.0 \times 10^{14}$	$90.0 \times 10^{14}$	$270.0 \times 10^{14}$	$550.0 \times 10^{14}$	$80.0 \times 10^{14}$	$60.0 \times 10^{14}$	$100.0 \times 10^{14}$
$N_{HCONHD}(cm^{-2})$	$3.0 \times 10^{14}$	-	-	-	-	-	-	-
$N_{CH_3NCO}(cm^{-2})$	$60.0 \times 10^{14}$	$12.0 \times 10^{14}$	-	$4.0 \times 10^{14}$	-	$7.0 \times 10^{14}$	$3.5 \times 10^{14}$	-
$N_{CH_3^18OH}(cm^{-2})$	$10.0 \times 10^{14}$	$15.0 \times 10^{14}$	$35.0 \times 10^{14}$	$10.0 \times 10^{14}$	$10.0 \times 10^{14}$	-	$10.0 \times 10^{14}$	$6.5 \times 10^{14}$
$N_{HC_5N}(cm^{-2})$	$6.0 \times 10^{19}$	-	$1.0 \times 10^{14}$	$150.0 \times 10^{15}$	$100.0 \times 10^{15}$	-	$10.0 \times 10^{14}$	-
$N_{^{33}SO_2}(cm^{-2})$	$10.0 \times 10^{14}$	-	$19.0 \times 10^{14}$	-	$10.0 \times 10^{14}$	$4.0 \times 10^{14}$	-	-
$N_{CH_3CH_2CN}(cm^{-2})$	$18.0 \times 10^{14}$	-	$4.0 \times 10^{14}$	$15.0 \times 10^{14}$	$10.0 \times 10^{14}$	$3.0 \times 10^{14}$	-	-
$N_{CH_3OCH_3}(cm^{-2})$	$130.0 \times 10^{14}$	$140.0 \times 10^{14}$	$310.0 \times 10^{14}$	$350.0 \times 10^{14}$	$130.0 \times 10^{14}$	$150.0 \times 10^{14} (cm^{-2})$	$170.0 \times 10^{14}$	$30.0 \times 10^{14}$
$N_{CH_3CH_2OH}(cm^{-2})$	$350.0 \times 10^{14}$	$30.0 \times 10^{14}$	$60.0 \times 10^{14}$	$197.0 \times 10^{14}$	$190.0 \times 10^{14}$	$30.0 \times 10^{14} (cm^{-2})$	$30.0 \times 10^{14}$	$40.0 \times 10^{14}$
$N_{^{13}CH_3CN}(cm^{-2})$	$12.0 \times 10^{13}$	$2.2 \times 10^{13}$	$5 \times 10^{13}$	$2.0 \times 10^{13}$	$5.5 \times 10^{13}$	$5.5 \times 10^{14}$	$3.0 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{13}$

Tabla 4.2:  $T_{rot}$  y  $N$  obtenidos tras ajustar los espectros sintéticos de cada molécula a las líneas espectrales observadas para los 8 *hot corinos* en la región OMC-1S.



# Capítulo 5

## Discusión

### 5.1. Tasa de detección de *hot corinos*

Como se explicó en la introducción, el número de *hot corinos* que han sido detectados hasta la fecha es solo de una docena y esto puede ser debido a sesgos observacionales y/o procesos físicos. Dentro de los sesgos observacionales está la falta de sensibilidad y el efecto de la profundidad óptica como ha mostrado De Simone et al. (2020).

En el presente trabajo se ha detectado emisión de COMs asociada a 8 fuentes. Para estimar la tasa de detección de *hot corinos* primero se ha de definir el número de fuentes detectadas en la imagen de continuo con una resolución angular comparable a la que se tiene en la spw1 de  $0.88'' \times 0.54''$  (AP=-70°). Para ello, se tomó la imagen del continuo de Palau et al. (2018) que incluye ambas configuraciones y se ejecutó la tarea: *imsmooth* en CASA para obtener un haz final de  $0.88 \times 0.54$  (AP=-70°). Se midió un ruido de 6 mJy/haz y se consideró un umbral de identificación de  $7\sigma$ , con lo que se identificaron un total de 21 fuentes.

De esta forma, la tasa de detección de *hot corinos* en las 21 fuentes de continuo de OMC-1S es de 38 %. Esta tasa es mucho más alta que lo que se ha encontrado en estudios previos con interferómetros anteriores a ALMA. Por ejemplo, Zapata et al. (2007) y Orozco-Aguilera et al. (2019) detectaron solo dos *hot corinos* en esta región usando el SMA (por sus siglas en inglés, *Submillimeter Array*) lo cual corresponde a una tasa del 14 % para sus 14 fuentes del continuo.

La tasa de detección que hemos obtenido en este trabajo es ligeramente menor a la obtenida por Yang et al. (2021) del 58 % donde, mediante el mapeo PEACHES (por sus siglas en inglés, *Perseus ALMA Chemistry Survey*) se estudiaron 50 protoestrellas de Clase 0/I embebidas en la nube molecular de Perseo usando la banda 6 de ALMA y en las cuales se detectó la emisión de  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{HCOOCH}_3$  y algunas COMs con nitrógeno y oxígeno. Nuestra tasa de detección podría ser menor que la de Yang et al. (2021) por tener nuestros datos una peor sensibilidad.



---

Por tanto, al usar interferómetros muy sensibles como lo es ALMA se están descubriendo un número considerable de *hot corinos* que antes no se habían detectado. Parece por tanto crucial, si se quiere hacer un censo completo de los *hot corinos* de una región, usar la estrategia observacional adecuada, es decir, interferómetros muy sensibles. Es importante notar que hemos resuelto parcialmente la emisión de las COMs en muchos casos y por tanto, el factor de llenado suele ser  $>0.5$ . Por tanto, este sesgo observacional de baja sensibilidad por la emisión tan compacta de las COMs podría explicar el número pequeño de *hot corinos* detectados previos a ALMA.

Otro sesgo observacional puede estar relacionado con la alta opacidad del polvo a longitudes de ondas milimétricas, como propone De Simone et al. (2020). En la última fila de la tabla 5.1 se presenta una primera aproximación a la profundidad óptica para los 8 *hot corinos* aquí estudiados. Esta profundidad óptica se ha calculado siguiendo la ecuación 2.18 vista en la sección 2.2.3, la cual fue obtenida a partir de la ecuación de transporte radiativo y bajo la consideración de la aproximación de Rayleigh-Jeans. Además se considera equilibrio termodinámico local y acoplamiento entre el gas y el polvo, por lo que sus temperaturas han de ser similares. De esta forma, la temperatura del haz para el polvo queda:

$$T_{mbc} \sim f [T_{ex} (1 - e^{-\tau_\nu})] \quad (5.1)$$

donde se ha introducido el factor de llenado,  $f$ , con un valor de 0.5 que proviene de considerar que la fuente tiene un tamaño aproximado al haz de observación, como se ha visto en el capítulo 3.

Las profundidades ópticas obtenidas muestran que 5 de los 8 *hot corinos* presentan profundidades ópticas  $\lesssim 0.5$  por lo que el polvo se puede considerar ópticamente delgado en estos casos. En cambio, para el caso de SF6b, WF3 y N1, las profundidades ópticas están en el rango 0.7-3, por lo que el polvo en estas fuentes es parcialmente grueso o grueso. Es importante notar que si el polvo que está por delante de la emisión de COMs es grueso, puede absorber la emisión de las COMs. Esto podría ser una explicación al desplazamiento que hemos encontrado entre el pico de continuo y la emisión de las COMs para WF3 y N1. Para el caso de SF6b, la emisión de las COMs podría estar por delante de la emisión del polvo ópticamente gruesa, tal como sugieren los grandes tamaños medidos para las COMs en SF6b.

Se ha hecho además el cálculo de la profundidad óptica para la fuente SF5a encontrando un valor de 0.80, con lo cual es prácticamente gruesa. Esto podría explicar por qué detectamos en algunos casos emisión de moléculas complejas claramente desplazadas hacia el suroeste respecto a la emisión del continuo de SF5 como se ve en la figura 3.6 de los momentos de SF4 que incluyen a SF5 al noreste. Por tanto, en nuestra región parece que sí estamos viendo también el efecto que

---

De Simone et al. (2020) propone, que la emisión de moléculas complejas de algunos *hot corinos* puede verse absorbida por la alta profundidad óptica del polvo. Si esto es así, SF5 probablemente sea un *hot corino* también y en este caso, nuestra tasa de detección pasaría a ser del 43 %.

De esta manera, nuestra tasa de detección de  $\sim 40\%$  es mucho más alta comparada con estudios anteriores en esta misma región. Esto nos indica que la técnica de observación con interferómetros sensibles es muy importante, sin embargo, debemos tener presente que a estas longitudes de onda podemos estar perdiendo la emisión de *hot corinos* por la profundidad óptica del polvo. Esto además nos indica que es probable que la química compleja sea igual de frecuente en las estrellas de masa baja como en las de masa alta, sin embargo, el problema en la detección de *hot corinos* puede deberse a que estas regiones son más compactas que en los *hot cores* haciendo que la emisión de COMs sea más diluida en los datos de antena única. Se necesita llevar a cabo más búsquedas ciegas para poder concluir al respecto.

Finalmente, se ha hecho un cálculo preliminar de la densidad de cada *hot corino* para revisar la aproximación de LTE. Para ello, se usó la imagen de continuo a 1.3 mm generada con la misma resolución angular que la ventana espectral 1, y se calculó la masa de gas y polvo a partir de la densidad de flujo medida dentro del contorno de  $3\sigma$ , adoptando las temperaturas rotacionales obtenidas en el Capítulo 4 (suponiendo acoplamiento entre gas y polvo) y el coeficiente de absorción de Ossenkopf & Henning (1994) para mantos delgados de hielo a  $10^6 \text{ cm}^{-3}$ . Para el cálculo de la densidad, se asumió simetría esférica y el radio se tomó igual al radio equivalente que corresponde al área usada para medir la masa. Las densidades obtenidas están en el rango de  $5 \times 10^7 - 2 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ , que son de al menos un orden de magnitud mayor que las densidades críticas de algunas moléculas complejas ( $\sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ , Gerner et al. (2014)). Además, estas densidades obtenidas para los *hot corinos* de OMC-1S también son de al menos un orden de magnitud mayor que las estimadas por De Simone et al. (2020) en el *hot corino* NGC1333-IRAS4A, después de un análisis fuera de LTE, donde se llegó a la conclusión que la suposición de LTE sí es correcta a estas densidades. Por tanto, en nuestro caso la suposición adoptada de LTE parece ser una suposición razonable.

Propiedad	SF6b	SF4	SF3	EF1	EF2	WF2c	WF3	N1b
Clase tentativa: <sup>a</sup>	0/I	0/I	0/I	0/I	0/I	I	I	0/I
Multiplidad <sup>a</sup>	sí	no	sí	no	no	no	no	no
Emisión cm <sup>b</sup>	sí	no	no	sí	sí	sí	sí	sí
Emisión IR <sup>a</sup>	no	no	no	no	no	sí	sí	no
Emisión rayos-x <sup>a</sup>	sí	no	no	no	no	sí	sí	no
$M_{env}(M_{\odot})$ <sup>a</sup>	0.73	0.22	0.61	0.16	0.20	0.61	0.49	0.73
Tamaño continuo (UA) <sup>a</sup>	124×97	78×54	140×70	105×58	58×50	194×163	66×50	116×101
AP continuo(°) <sup>a</sup>	111	82	48	109	84	128	31	7
Tamaño CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub> (UA)	354×209	177×146	278×232	119×81	209×62	415×171	194×58	<i>fuentes puntual</i>
AP CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub> (°)	90	61	18	31	10-20 <sup>c</sup>	145	-	-
AP flujo molecular (°)	158	159	146	106 y 23	122	108	124	162
Diferencia AP (°) <sup>e</sup>	68	98	128	75 y 8	100	37	-	-
Velocidad flujo molecular (km/s) <sup>f</sup>	34	22	64	59	38	40	78	20
$T_{rot}(K)$	90 ±30	140±30	260±90	100±30	110±50	250±70	170±50	130±70
$T_{1.3mm}^{polvo}(K)$ <sup>d</sup>	43	21	39	13	21	19	50	44
$T_{1.3mm}^{UV}$	3.22	0.35	0.36	0.30	0.49	0.16	0.88	0.73
$n (cm^{-3})$	$1.5 \times 10^8$	$9.3 \times 10^7$	$4.6 \times 10^7$	$1.4 \times 10^8$	$1.1 \times 10^8$	$5.5 \times 10^7$	$6.8 \times 10^7$	$8.5 \times 10^7$

<sup>a</sup> Tomado de Palau et al. (2018).

<sup>b</sup> Tomado de Zapata et al. (2005).

<sup>c</sup> Valor aproximado a partir del gradiente de velocidad observado en el momento uno.

<sup>d</sup> Calculada a partir de la intensidad de pico en Palau et al. (2018).

<sup>e</sup> Diferencia entre el ángulo de posición del flujo molecular y el ángulo de posición del CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>.

<sup>f</sup> Valor promedio de la velocidad correspondiente al flujo corrido al azul y el corrido al rojo para cada fuente.

Tabla 5.1: Parámetros de los *hot corinos* presentes en la región OMC-1S.

## 5.2. Origen de la emisión de moléculas orgánicas complejas

Gracias a la alta resolución angular y sensibilidad que ofrece ALMA, además de obtener una tasa de detección de *hot corinos* en OMC-1S, también es posible estudiar la morfología de la emisión de las COMs y su posible relación con discos y/o flujos moleculares.

Para ello resulta muy útil conocer las direcciones de los flujos moleculares impulsados por cada una de las fuentes donde hemos detectado COMs. Zapata et al. (2005) y Zapata et al. (2006) reporta la emisión de flujos moleculares de alta velocidad en esta región con observaciones de SMA y reporta 5 flujos moleculares, uno en CO(2-1) y cuatro en SiO(5-4). De acuerdo a estos trabajos, el flujo de CO(2-1) está impulsado por la fuente WF3, mientras que las fuentes N1, WF2 y SF5 impulsan los cuatro restantes, ver figura 5.1. Por tanto, de los 8 *hot corinos* que hemos detectado, ya se tiene conocimiento de que 3 impulsan un flujo molecular.

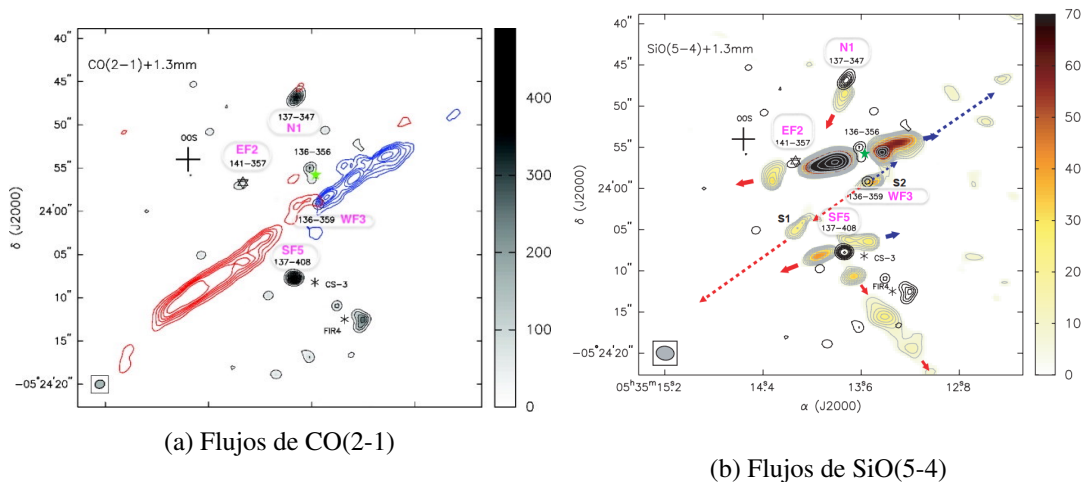


Figura 5.1: *Flujos moleculares de alta velocidad en las fuentes WF3, N1, WF2 y SF5 observados con el SMA. Imágenes tomadas de Zapata et al. (2006). Se han sobrepuesto los nombres de las fuentes aquí estudiadas en color magenta.*

Para buscar si los otros hot corinos que no tienen flujos moleculares reportados hasta la fecha tienen emisión de alta velocidad en algún trazador de flujo molecular, se ha hecho una exploración preliminar de nuestros datos de ALMA en la ventana espectral 2 y se ha encontrado que la transición de SO(6-5) recupera muy bien la emisión de alta velocidad para los flujos ya conocidos impulsados por WF3 y N1 (ver figura 5.2h y 5.2g). En el caso de N1 incluso se recupera muy bien en SO(6-5) no solo el lóbulo sur ya conocido corrido hacia el rojo, sino que además se ha descubierto su contraparte norte corrida al azul, como se puede ver en la figura 5.2h.

En la figura 5.2 se muestran los resultados de esta exploración, donde los contornos azules y rojos corresponden a la emisión integrada de SO(6-5) de alta velocidad corrida al azul y al rojo, respectivamente. También se ha marcado con flechas las direcciones de esta emisión de alta velocidad de SO(6-5) para poder hacer una primera estimación del ángulo de posición de cada flujo molecular. Además, en esta misma figura se muestra en escala de colores el momento uno del CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, que traza el campo de velocidad de esta molécula. Se ha elegido el dimetil éter porque es la molécula compleja más intensa detectada (a parte del CH<sub>3</sub>OH, que a veces traza flujos moleculares) en nuestro rango de frecuencias observado. En la tabla 5.1 se puede ver el valor promedio de la velocidad encontrada para cada flujo molecular, esta emisión es aproximadamente >10 km/s en todas las fuentes.

Como se puede ver en la figura 5.2a, SF6b tiene emisión de alta velocidad corrida al azul en la dirección sur-sureste y no se detecta ningún lóbulo corrido al rojo. Para SF4 se detecta emisión de alta velocidad en una dirección muy parecida a SF6b pero con el lóbulo rojo hacia el sur (figura 5.2b). Esta dirección es más o menos perpendicular a la dirección que une las dos fuentes de continuo asociadas a SF4. A partir de la figura

---

5.2b se ve que la fuente más intensa de continuo, llamada SF4b en Palau et al. (2018), queda en el eje del flujo molecular y en el centro de simetría de los dos lóbulos, con lo cual parece ser SF4b su fuente impulsora. En el caso de SF3 se detecta emisión de alta velocidad corrida al rojo hacia el noroeste, figura 5.2c. Como se puede ver en la figura 5 de Palau et al. (2018), la emisión a 7 mm muestra dos fuentes asociadas a SF3 en la dirección perpendicular al lóbulo rojo detectado aquí en SO(6-5), lo que sugiere que estas dos son parte de un disco circumbinario, como sugirió Zapata et al. (2007).

En la fuente EF1 detectamos emisión de muy alta velocidad corrida al rojo, cuya emisión integrada muestra una estructura muy colimada aproximadamente en la dirección este-oeste. En cambio, la emisión corrida al azul se encuentra al suroeste, es menos colimada y parece trazar las paredes de la cavidad de un flujo molecular, ver figura 5.2d. Esto sugiere que hay dos flujos moleculares más o menos perpendiculares entre sí asociados a la fuente EF1. En Palau et al. (2018) se presenta la emisión de esta fuente observada con el VLA a 7 mm y en su figura 3 se puede ver que la fuente está alargada hacia el noreste. Esta emisión alargada a 7 mm podría estar trazando la base de un radio jet térmico asociado al flujo molecular encontrado en la dirección suroeste-noreste. Alternativamente, la emisión alargada a 7 mm podría ser producida por dos fuentes que podrían ser las impulsoras de los dos flujos moleculares de EF1.

En el caso de EF2 se encuentra emisión de alta velocidad de SO(6-5) corrida al rojo hacia el sureste y también se puede apreciar una posible contraparte más débil corrida al azul hacia el noroeste (figura 5.2e). Finalmente, para WF2c no se ha encontrado emisión de alta velocidad de SO(6-5) claramente asociada a la fuente, aunque la emisión corrida al rojo que se puede apreciar en la figura 5.2f podría ser parte del lóbulo rojo observado en SiO(5-4) por Zapata et al. (2006) que también está al este de WF2c.

En la tabla 5.1 se dan los ángulos de posición estimados para los flujos moleculares de los 8 *hot corinos* aquí estudiados. Estos ángulos de posición se han medido con nuestros datos de SO(6-5) mostrados en la figura 5.2, excepto para los flujos ya conocidos en N1, WF2c y WF3. En estos casos se tomaron los ángulos de posición reportados en Zapata et al. 2005, 2006 que son totalmente consistentes con los medidos en el SO(6-5) para estas tres fuentes.

Tras la exploración hecha a los flujos moleculares de alta velocidad de SO(6-5) detectados en los 8 *hot corinos* y haber definido de manera preliminar su dirección, lo que se pretende ahora es estudiar si la emisión de moléculas complejas está alargada en la dirección del flujo molecular o en la dirección perpendicular. Para esto, haremos uso de la morfología y cinemática de la molécula  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  puesto que es la molécula compleja más intensa detectada. En la tabla 5.1 resumimos los parámetros obtenidos en el capítulo 3 del  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ , después de hacer el ajuste gaussiano a su emisión integrada siendo de especial importancia un AP deconvolucionado.

---

En la tabla 5.1 se ha incluido una fila donde se presenta la diferencia entre el ángulo de posición del flujo molecular y el ángulo de posición de la emisión de  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ . A partir de estos datos podemos ver que la emisión de  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  de las fuentes SF6b, SF4 y EF2 está alargada en una dirección entre  $70^\circ$  y  $110^\circ$  respecto a la dirección del flujo molecular, es decir, se pueden considerar perpendiculares. Para el caso de EF1 la emisión del  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  está alargada en una dirección de  $31^\circ$ , lo cual es perpendicular al flujo molecular este-oeste. Si suponemos que la emisión de EF1 está realmente asociada al disco de la fuente que impulsa el flujo este-oeste, entonces 4 de los 8 *hot corinos* estudiados aquí presentan indicios de poder estar asociados a discos. Esto se ve reforzado por el hecho de que, para SF6b y EF2 se detectan gradientes de velocidad significativos también en la dirección perpendicular a los flujos moleculares. Suponiendo que estos gradientes son producidos por rotación kepleriana se ha estimado de forma muy preliminar que la masa de los objetos centrales de SF6b y EF2 es de  $5M_\odot$  y  $1 M_\odot$  respectivamente. Como encontramos masas muy consistentes con las esperadas para objetos protoestelares de masa intermedia o baja, estos gradientes de velocidad podrían trazar la rotación de un disco protoestelar.

Respecto a SF3 y WF2c, la diferencia entre el ángulo de posición del flujo molecular y el ángulo de posición del  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  indica una desviación de la perpendicularidad de  $40^\circ$ , lo cual es una diferencia considerable y no es evidente que la emisión de las moléculas complejas en estos dos casos provenga del disco. Además, en la figura 5.2c, para SF3 se puede apreciar un gradiente de velocidad significativo pero cuya dirección tampoco es claramente perpendicular a la del flujo molecular. De la misma forma, la emisión de las moléculas complejas para WF2c presenta notoriamente una extensión hacia el noroeste, en la misma dirección del flujo molecular reportado por Zapata et al. (2006). Esto se puede ver en la figura 3.18 y es especialmente evidente para  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ ,  $\text{HCOOCH}_3$  y el  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ , donde la emisión en esta extensión es más intensa que en el pico del continuo. Para el caso del  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  también está presente esta extensión, aunque es más débil que la emisión en el pico del continuo. Todo esto indica que la emisión de moléculas complejas en SF3 y WF2c puede estar asociada a choques más que a un disco. Para el caso del  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$  en WF2c se ha buscado además la emisión de esta molécula dentro de la ventana espectral 2, identificando otras dos transiciones del cianuro de etil en las frecuencias  $\nu_0=218391.3414$  y en  $\nu_0=219595.59$ , lo cual nos ayuda a confirmar la identificación de  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$  en la extensión a lo largo del flujo molecular de WF2c.

Como se ve en la tabla, el ajuste gaussiano a la emisión integrada del  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  nos arrojó un tamaño deconvolucionado para todas las fuentes excepto para WF3 y N1. Justo para estas dos fuentes la emisión de las moléculas complejas es muy compacta y claramente está desplazada respecto a la fuente de continuo en la dirección del flujo molecular, lo que sugiere que para estos dos casos la emisión de las moléculas complejas está asociada a los choques que se dan a lo largo del flujo molecular.

---

Por tanto, como resultado de este análisis, parece que aproximadamente la mitad de los *hot corinos* encontrados en OMC-1S podrían estar asociados a discos mientras que en la otra mitad se han encontrado indicios de emisión de moléculas muy complejas asociadas al flujo molecular. Es importante notar que el  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$  es una de estas moléculas muy complejas típicamente asociadas a *hot cores* ricos en moléculas nitrogenadas y que, hasta donde sabemos, nunca se había reportado anteriormente en un flujo molecular. Por tanto estos datos pueden ser importantes para restringir los modelos químicos de formación de moléculas complejas.

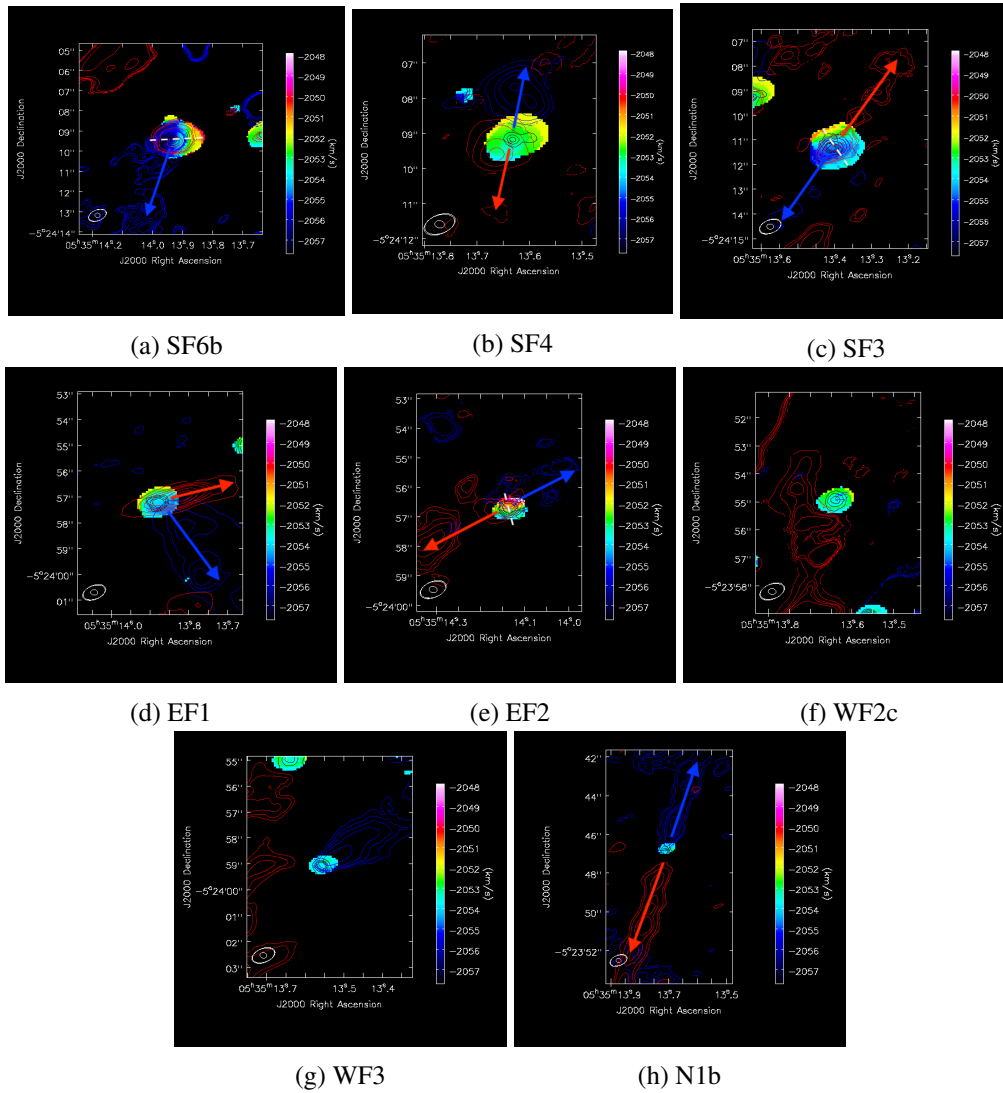


Figura 5.2: Gradientes de velocidad de la molécula  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  donde se le han sobrepuesto los lóbulos de flujos de alta velocidad de  $\text{SO}(6-5)$  observados en las diferentes fuentes de  $\text{OMC-1S}$  (para  $\text{WF2c}$  y  $\text{WF3}$  se consideran las direcciones de Zapata et al. (2006)). En contornos negros se observa la emisión del continuo a 1.3 mm; con flechas se indican las direcciones del flujo corrido al azul y corrido al rojo de  $\text{SO}(6.5)$ ; las líneas punteadas blancas indican la dirección del gradiente de velocidad para el  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ .



---

### 5.3. Grado de procesado

Dentro de las diferentes COMs hay algunas que se pueden asociar a diferentes grados de procesado químico. Öberg et al. (2011) propone un modelo en el que las moléculas orgánicas complejas se forman inicialmente en los hielos ricos en CO y CH<sub>3</sub>OH. Esto es porque a bajas temperaturas y altas densidades el CO se condensa en los granos de polvo. Reacciones de hidrogenación en los mantos hacen que se forme el radical HCO y la molécula de CH<sub>3</sub>OH. Mientras domina la desorción no-térmica (envolturas frías de protoestrellas, choques), se espera que se detecten solo las moléculas formadas más recientemente en las capas externas de los granos, como las ricas en HCO (HCOOCH<sub>3</sub> y CH<sub>3</sub>CHO). En cambio, a medida que domina la desorción térmica por la alta temperatura de la protoestrella, se espera detectar en fase gas moléculas formadas en todo el manto y, por tanto, más procesadas como aquellas ricas en los radicales CH<sub>3</sub> o CH<sub>2</sub> (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, (CH<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub>).

Öberg et al. (2011) propone unos cocientes de abundancias respecto al metanol, CH<sub>3</sub>OH, que podrían ser indicadores de un procesado más avanzado. En su estudio hace una comparación con otras fuentes observadas y encuentra que, por ejemplo, las abundancias del etanol (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH) respecto al acetaldehído (CH<sub>3</sub>CHO) son menores en los flujos moleculares y en las protoestrellas observadas con antena única (sensibles a las envolturas) mientras que en aquellas protoestrellas observadas con interferometría (más sensibles a discos) sucede lo contrario.

En la figura 5.3 las primeras tres columnas corresponden a regiones recopiladas de la literatura (Öberg et al. 2011; Palau et al. 2011; Fuente et al. 2014) que están asociadas a flujos moleculares, envolturas o discos y que tienen medidas de CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH y CH<sub>3</sub>CHO. En la figura los triángulos rojos corresponden a las abundancias del etanol y las cruces azules a las del acetaldehído.

De esta manera, en la misma figura 5.3 se ha agregado una cuarta columna con los resultados de la abundancia del etanol y el acetaldehído respecto al metanol para 7 de los *hot corinos* aquí detectados (N1 se ha excluido por ser más ruidoso). Se observa que para los 7 *hot corinos* de OMC-1S se cumple que la abundancia del CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH es mayor al CH<sub>3</sub>CHO como en el modelo de Öberg et al. (2011), es decir, las abundancias de estas moléculas parecen ser consistentes con material más procesado.

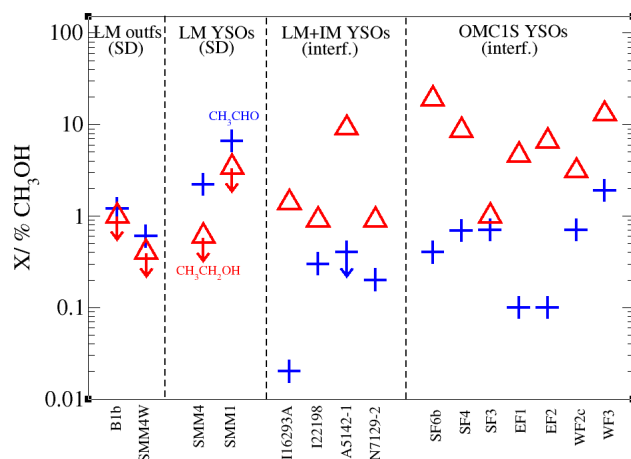


Figura 5.3: Abundancias del etanol ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ) y el acetaldehído ( $\text{CH}_3\text{CHO}$ ) respecto al metanol para diferentes objetos como: protoestrellas de masa baja (LM), masa intermedia (IM) y flujos moleculares observados con antena única (SD) así como protoestrellas observadas con interferómetros. Los triángulos rojos corresponden a las abundancias del etanol y las cruces azules a las del acetaldehído

Teniendo esto en mente, se ha hecho el cociente entre estas abundancias para las otras fuentes presentadas en la figura 5.3, para las que se sabe que están trazando un disco o flujos moleculares o envolturas. En la figura 5.4 se muestra el resultado de este cociente contra las temperaturas rotacionales, que debería ser una primera aproximación al grado de procesamiento. En esta figura se puede ver que, para las fuentes que están asociadas a flujos, choques o envolturas el cociente es bajo mientras que para aquellas donde se sabe que hay discos el cociente es más alto (puntos negros) de forma que aparece una tendencia de cociente  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}/\text{CH}_3\text{CHO}$  altos para temperaturas más altas, como es de esperar.

Para las fuentes de OMC-1S (cuadrados marrones), podemos observar en la misma figura 5.4 que la mayoría de ellas tienen valores altos, consistentes con los resultados obtenidos para las fuentes donde se sabe que hay un disco. Esto ocurre especialmente para SF6b y EF1. El resto de fuentes están en un caso intermedio. Esto es plenamente consistente con las conclusiones a las que se llegó en la sección 5.2, donde SF6b y EF1 se clasificaron como *hot corinos* asociados a discos.

Finalmente notar que, aunque Öberg et al. (2011) incluyó al  $\text{HCOOCH}_3$  y el  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$  como moléculas ricas en HCO y  $\text{CH}_3$ , respectivamente, aquí se han excluido estas dos moléculas del análisis porque en artículos posteriores a Öberg et al. (2011) se encontró un comportamiento especial para el metil formato y el dimetil éter, que suelen presentar distribuciones espaciales muy similares (por ejemplo, Brouillet et al. 2013; Palau et al. 2017).

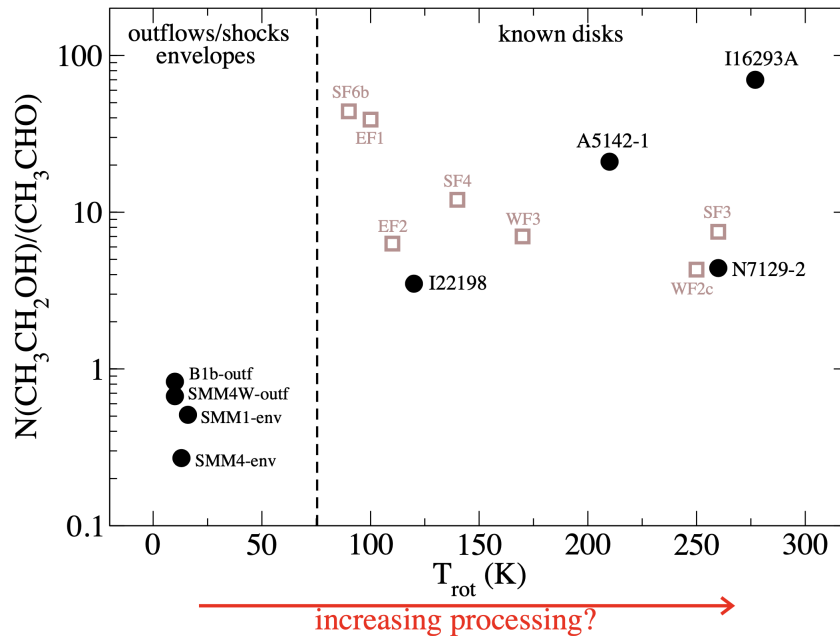


Figura 5.4: Cociente entre el etanol y acetaldehído contra la temperatura rotacional para diferentes objetos de la literatura que trazan flujos moleculares, envolturas o discos (puntos negros) y para 7 *hot corinos* de OMC-1S estudiados en este trabajo (cuadrados marrones).

Es interesante notar que, si consideramos únicamente los *hot corinos* de OMC-1S (para los que las condiciones iniciales han sido las mismas, a diferencia de los otros *hot corinos* recopilados de la literatura, que pertenecen a nubes diferentes) parece que justamente WF2c, WF3 y SF3 son los que tienen temperaturas más altas y cocientes más bajos, y precisamente estas fuentes son las que hemos propuesto en la sección anterior como posiblemente asociadas a flujos moleculares. Esto se ve ilustrado en la figura 5.5, donde se han indicado con símbolos rosa los asociados a discos y con símbolos *cyan* los asociados a flujos moleculares. Esta gráfica sugiere que la emisión de COMs asociada a flujos moleculares viene de un gas muy caliente (quizá la cavidad del flujo, irradiada por la protoestrella) y no corresponde a material tan procesado como el del disco.

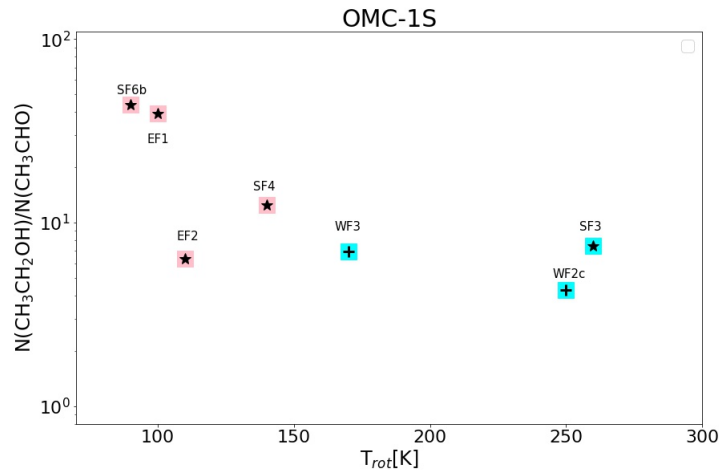


Figura 5.5: Cociente entre el etanol y acetaldehído contra la temperatura rotacional para los 7 *hot corinos* de OMC-1S estudiados en este trabajo. Los marcadores cuadrados color rosa son para aquellas fuentes asociadas a discos mientras que los color cyan son asociadas a flujos moleculares. La clase de los objetos está indicada dentro de los cuadrados con una estrella para objetos clase 0/I mientras que las cruces son aquellos objetos clase I, de acuerdo a Palau et al. (2018.)

## 5.4. Comparación con modelos y trabajo futuro

El modelo de Aikawa et al. (2012), con quien se ha entablado una colaboración, predice un perfil radial de abundancias de varias moléculas complejas en discos protoestelares. En la figura 5.6 se presenta el perfil radial del modelo de Aikawa et al. (2012) para varias de las moléculas detectadas en este trabajo.

Como se puede ver de la figura, se espera que la molécula de OCS y  $\text{CH}_3\text{CHO}$  se extiendan hasta varios centenares de UA, mientras que el  $\text{CH}_3\text{OH}$  y  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  deberían presentar emisiones más compactas, por debajo de las 100 AU de radio.

Una primera inspección de los tamaños medidos en OCS y  $\text{CH}_3\text{OH}$  en los *hot corinos* asociados a discos encontrados en este trabajo (SF6b, SF4, EF1 y EF2, ver capítulo 3), muestra que efectivamente el OCS tiene por lo general una extensión de  $\sim 1''$  (lo que corresponde a 200 AU de radio), mientras que el  $\text{CH}_3\text{OH}$  tiene extensiones más pequeñas, de  $0.5''$ , que corresponde a 100 AU. En un futuro se pretende desarrollar una comparación más detallada de nuestras observaciones con los modelos de Aikawa et al. (2012).

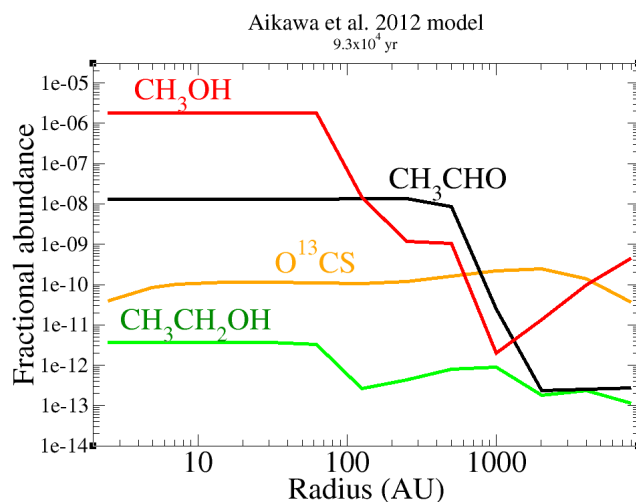


Figura 5.6: Perfil radial del modelo de Aikawa et al. (2012) para las moléculas:  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{CHO}$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$  y  $\text{O}^{13}\text{CS}$  en discos protoestelares.

Hemos considerado además la continuación del presente trabajo a través de:

- Explorar los cocientes no solo del etanol respecto al acetaldehído, sino incluir al dimetil éter y al metil formato, las cuales hemos identificado muy bien en este trabajo y cuyos cocientes actualmente están siendo estudiados también por otros grupos de investigación (Loyal Chahine, comunicación privada).
- Caracterizar con más detalle la emisión de COMs en WF2c, donde se ha encontrado una extensión muy rica en COMs y claramente asociada al flujo molecular. Para ello, se prevee extraer un espectro de la región asociada a la fuente del continuo (presumiblemente trazando el disco) y otro espectro en la extensión asociada al flujo molecular. Esto nos permitirá caracterizar mejor el contenido químico y las propiedades físicas en cada una de estas componentes (disco vs flujo) y avanzar en el estudio del origen de la emisión de las COMs.

# Capítulo 6

## Conclusiones

Con el objetivo de realizar una búsqueda ciega con alta resolución y alta sensibilidad de *hot corinos* y así, determinar una tasa de detección así como las condiciones físicas del gas y el polvo, además de determinar el posible origen de la emisión molecular, se ha estudiado la emisión molecular en 21 fuentes de la región OMC-1S a 1.3 mm con ALMA en la banda 6 (211.0-275.0 GHz) con una resolución espectral de 1.95 km/s en un ancho de banda total de 1.87 GHz. La metodología se ha basado en la identificación de moléculas mediante la generación de espectros sintéticos bajo la suposición de LTE, además de la aplicación del método de diagramas rotacionales a las fuentes encontradas. De esta forma, las principales conclusiones de este trabajo son las siguientes:

- Se han identificado al menos, 8 núcleos moleculares calientes de baja masa o *hot corinos* con moléculas complejas como: CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>3</sub>CHO, HCOOCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN, <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN e incluso g'Ga-(CH<sub>2</sub>OH)<sub>2</sub>, en las fuentes de continuo SF6b, SF4, SF3, EF1, EF2, WF2c, WF3 y N1b reportadas en Palau et al. (2018).
- La detección de 8 *hot corinos* en la muestra de 21 fuentes de continuo de la región corresponde a una tasa de detección del ~40 %, casi un factor 3 mayor que la tasa encontrada en estudios anteriores de la misma región (~14 %). Además, se ha encontrado que la alta opacidad del polvo puede afectar a, al menos, 2 de los *hot corinos* encontrados y a uno nuevo no considerado aquí por la emisión tan marginal. La conocida escasez de detección de *hot corinos* podría ser producida por una combinación de falta de sensibilidad en los estudios anteriores junto con la alta opacidad del polvo a 1.3 mm.
- Las temperaturas encontradas en las fuentes están en el rango 90 K -250 K usando varias transiciones del <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN.
- Un estudio preliminar de un trazador de gas de alta velocidad, SO(6-5), revela

---

flujos moleculares en todos los *hot corinos*, excepto en WF2c, pero de este se conoce su flujo de SiO(5-4) por trabajos anteriores.

- Parece que en al menos 3 de los *hot corinos* (SF6b, SF4, EF2) más uno tentativo (EF1) está asociada a discos protoestelares, mientras que para los otros 4 *hot corinos* la emisión de moléculas complejas parece estar más asociada al flujo molecular bipolar.
- La fuente WF2c presenta emisión de moléculas muy complejas alargadas en la dirección del flujo molecular, incluyendo HCOOCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>, <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>CN y CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN. Hasta nuestro conocimiento, este es el primer caso de detección de cianuro de etil, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CN, en un flujo molecular bipolar.
- Se ha estudiado el grado de procesamiento del gas en los *hot corinos* y se han encontrado resultados consistentes con alto grado de procesamiento para dos de los *hot corinos* que se habían clasificado como asociados a los discos, muy consistente con el modelo evolutivo propuesto por Öberg et al. (2011).
- Una comparación muy preliminar del tamaño de los discos para las diferentes moléculas complejas parece ser consistente con el modelo de Aikawa et al. (2012), lo cual abre el trabajo presente a una continuación en el futuro con dicho modelo químico.

En resumen, como fruto de este trabajo parece que podría haber muchos más *hot corinos* que los conocidos hasta la fecha y que la emisión de las moléculas complejas no solo parece estar asociada a las regiones más calientes de los discos protoestelares sino también, de forma no despreciable, a los flujos moleculares. Estos resultados pueden ser importantes para restringir los actuales modelos químicos de formación de COMs.

# Apéndice A

## Momento cero OMC-1S (por molécula)

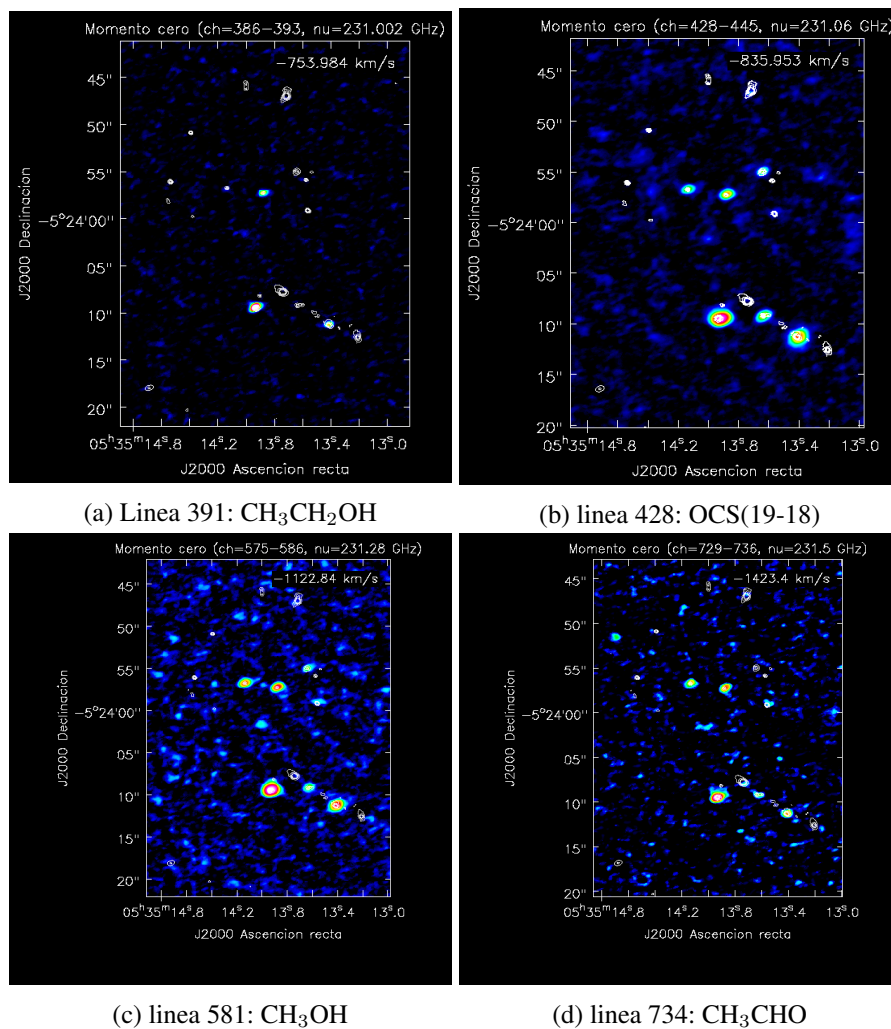
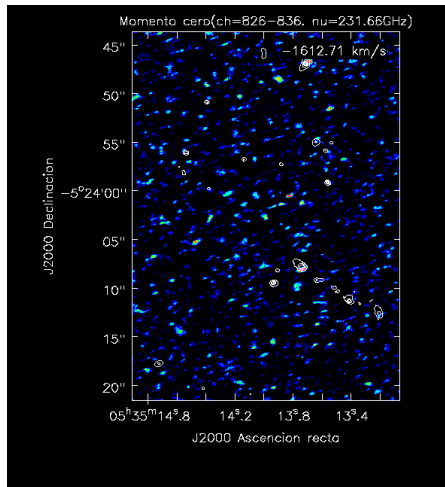
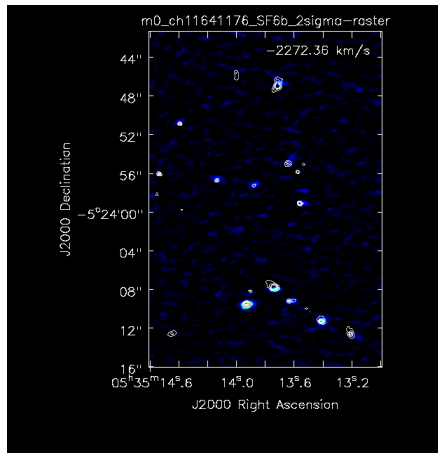


Figura A.1: *Momento cero para toda la region OMC-1S de las diferentes moléculas observadas.*

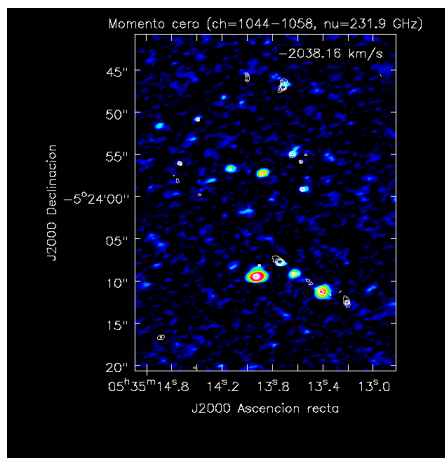




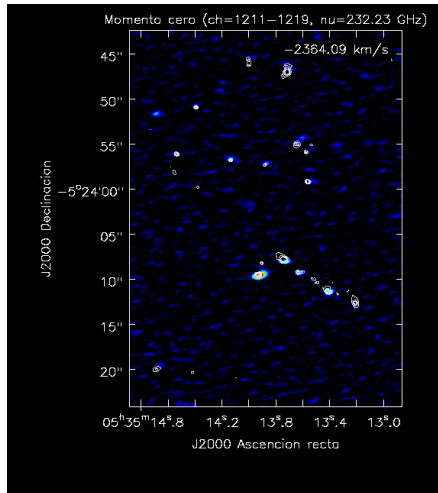
(e) línea 833:  $\text{HCOOCH}_3$



(f) línea:  $\text{HCOOCH}_3$



(g) línea 1044:  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$



(h) Línea 1215:  $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$

Figura A.1: *Continuación.*

# Apéndice B

## Espectros sintéticos de prueba

La identificación de las líneas mostradas en el capítulo 3 fue un proceso el cual implicó la prueba de más de una molécula en ciertas líneas espectrales del rango observado. A continuación se muestra el espectro observado para SF6b donde se ha indicado con una línea vertical las líneas usadas para comenzar la búsqueda e identificación de las mismas. Cada una se asoció a un número para una más fácil identificación.

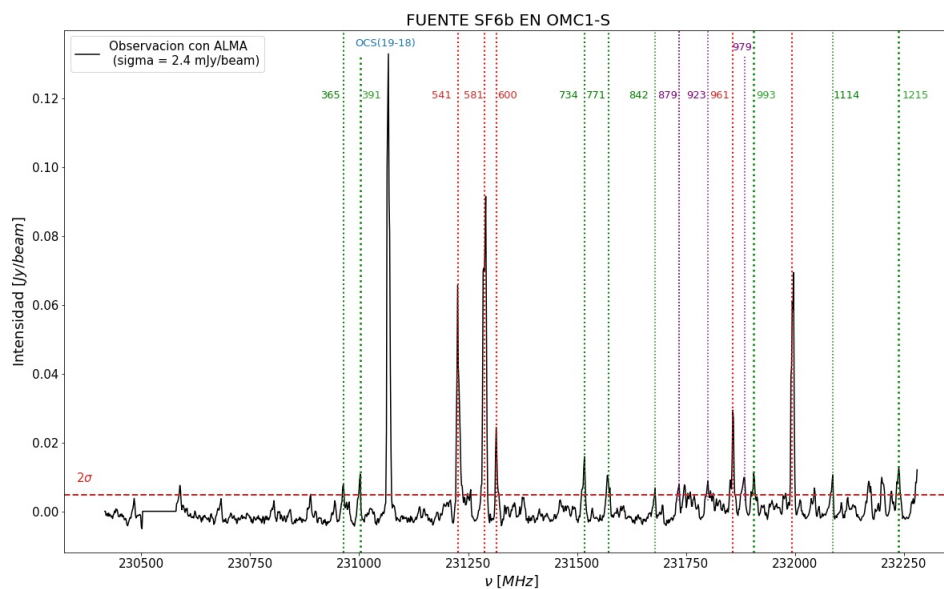


Figura B.1: Espectro observado por ALMA para la fuente SF6b usado para comenzar la identificación de las moléculas, asociando cada línea a un número para su búsqueda.

---

## Línea 541

### $\text{H}_2\text{C}^{13}\text{S}$

Entre las moléculas buscadas se probó con la molécula de  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$  (*Thioformaldehyde*) que podemos encontrar tanto en la base de datos de JPL como en CDMS, sin embargo, de las dos bases de datos que estamos utilizando, en JPL no se encuentra la línea en la frecuencia buscada:  $\sim 231.288$  GHz por lo que se decidió comparar los espectros sintéticos que cada base nos da.

En la figura B.2 encontramos a ambos espectros sintéticos de las diferentes bases de datos, vemos que la molécula de  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$  (por parte de JPL, color azul) podría estar contribuyendo a la línea de  $^{13}\text{CS}$  y también a la línea de OCS(19-18). Los parámetros de los espectros sintéticos mostrados en la figura B.2 se presentan en la tabla B.1.

Teniendo lo anterior en cuenta, si vemos nuevamente la figura ??, notamos que esta parece tener un ancho más grande que no se ajusta bien a la línea observada con ALMA (distinto a lo que se observa con con el espectro sintético de OCS), esto precisamente puede deberse a que tenemos contribución por parte de  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$ . Más adelante se presenta el espectro sintético de la suma entre  $^{13}\text{CS}$  y  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$  para comprobar esto.

Molécula	$\nu$ (GHz)	Densidad ( $\times 10^{14}\text{cm}^{-2}$ )	$T_{ex}$ (Kelvin)	$\Delta v$ (km/s)	Tamaño fuente (arcsec)
$\text{H}_2^{13}\text{CS}$ (CDMS)	231.28	11.0	115.0	8.8	0.7197
$\text{H}_2^{13}\text{CS}$ (JPL)	231.28	18.0	100.0	8.8	0.5971

Tabla B.1: *Parámetros obtenidos del gaussfit.*

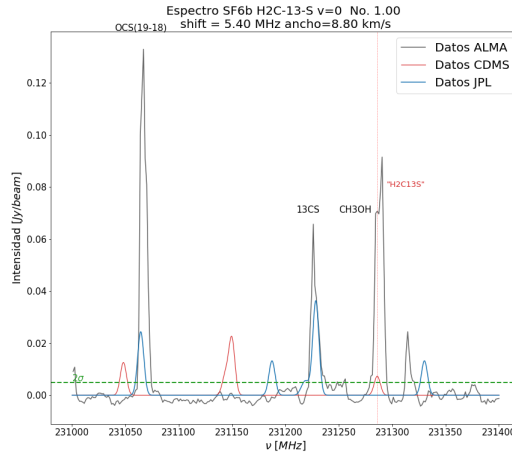
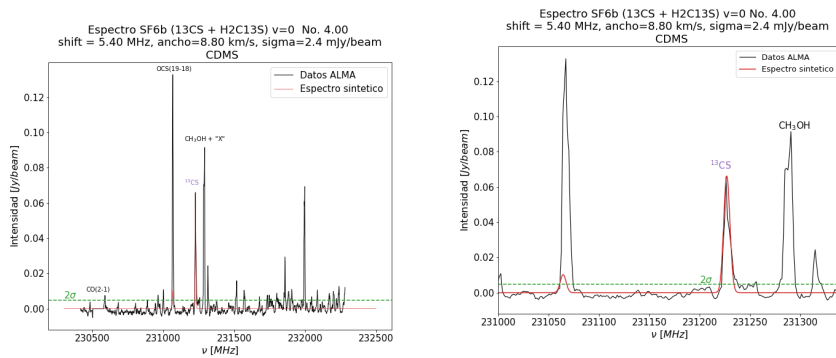


Figura B.2: Superposición de los espectros creados para  $H_2^{13}CS$  con las bases de datos: CDMS Y JPL.

### Espectro sintético *blended*: $^{13}CS + H_2C^{13}CS$ (JPL)

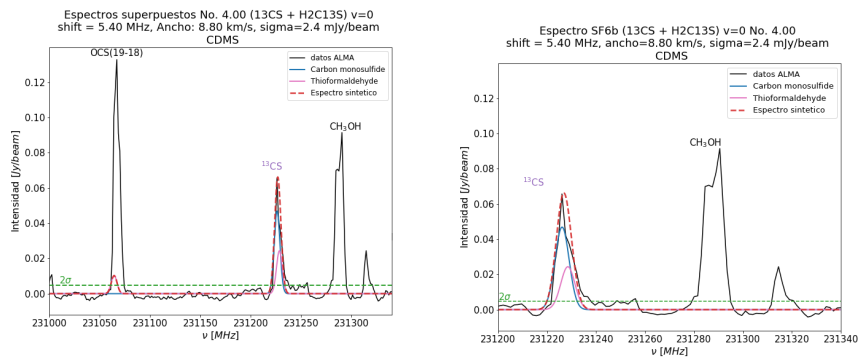
En los siguientes espectros vemos como la suma de las intensidades de las moléculas  $^{13}CS + H_2C^{13}CS$  (JPL) reproducen bien el comportamiento del espectro observado con ALMA; el ancho que antes se observaba solo con la molécula de  $^{13}CS$  parece ajustarse mejor ahora (figura B.3b). Los parámetros de los espectros sintéticos mostrados en las siguientes figuras se encuentran en la tabla ??.



(a) Espectro en el rango completo de observación.

(b) Acercamiento para observar las contribuciones a la línea de OCS(19-18) y  $^{13}CS$

Figura B.3: Espectro observado con ALMA y el espectro sintético creado donde se han sumado las intensidades de las moléculas  $^{13}CS$  y  $H_2^{13}CS$ .



(a) Acercamiento para observar la contribución individual por parte de  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$  a las líneas de OCS(19-18) y  $^{13}\text{CS}$ .

(b) Acercamiento a la línea de  $^{13}\text{CS}$  donde se observa la contribución por parte de  $\text{H}_2^{13}\text{CS}$ .

Figura B.4: Espectro observado con ALMA y el espectro sintético creado.

## Línea 391

Para este caso el espectro parece coincidir bien con nuestro espectro observado, sin embargo, la molécula no es muy común de encontrar, además, el logaritmo de la intensidad que algunas líneas presentan son muy bajos.

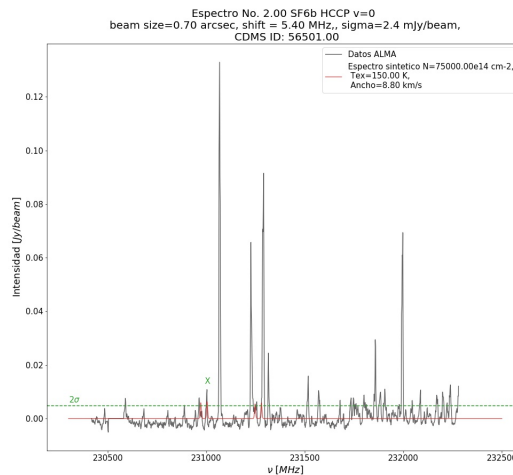


Figura B.5: Espectro sintético HCCP creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

Para este espectro, en la línea que queríamos identificar sale otra línea a menor frecuencia que no coincide para nada con el espectro observado.

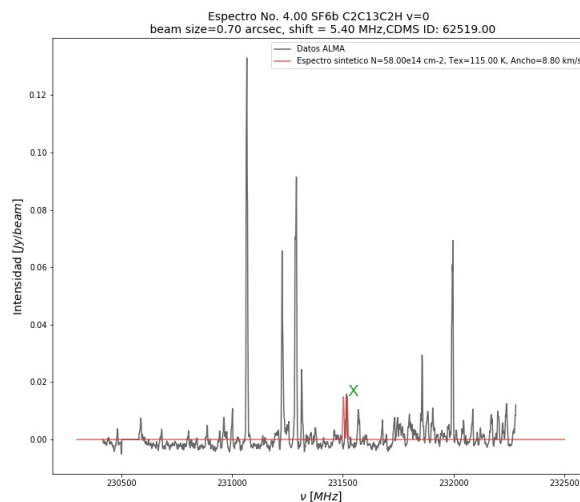


Figura B.6: Espectro sintético de  $C_2^{13}C_2H$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

Para este espectro observamos que hay una línea bastante intensa que tampoco coincide con nuestro espectro observado.

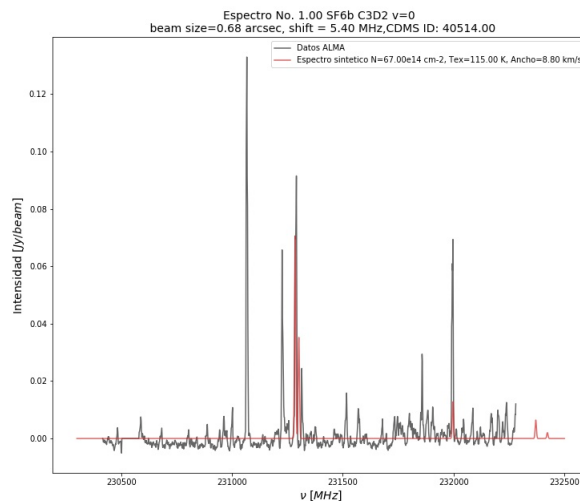


Figura B.7: Espectro sintético de  $C_3D_2$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

Esta línea (391) parece estar mezclada por lo que se buscó a la molécula que pudiera ser la compañera, intentando las siguientes moléculas pero no mostraron compatibilidad con nuestro espectro observado:

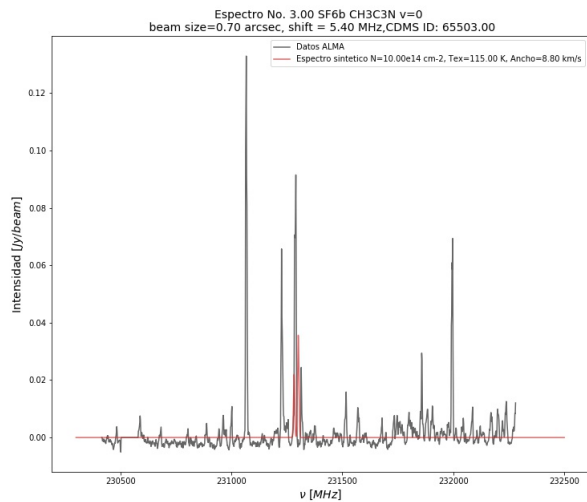


Figura B.8: Espectro sintético de CH<sub>3</sub>CN creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

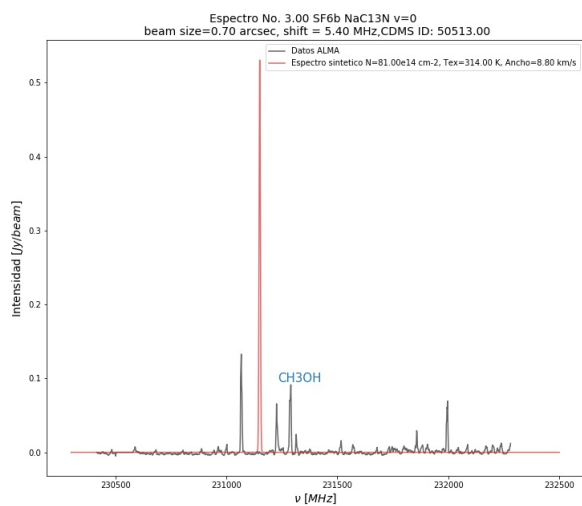


Figura B.9: Espectro sintético de NaC<sup>13</sup>N creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

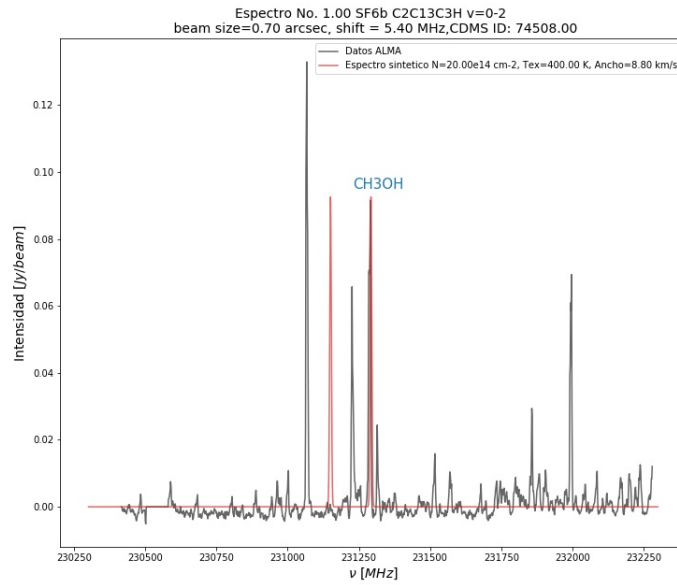


Figura B.10: Espectro sintético de  $C_2^{13}CC_3H$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

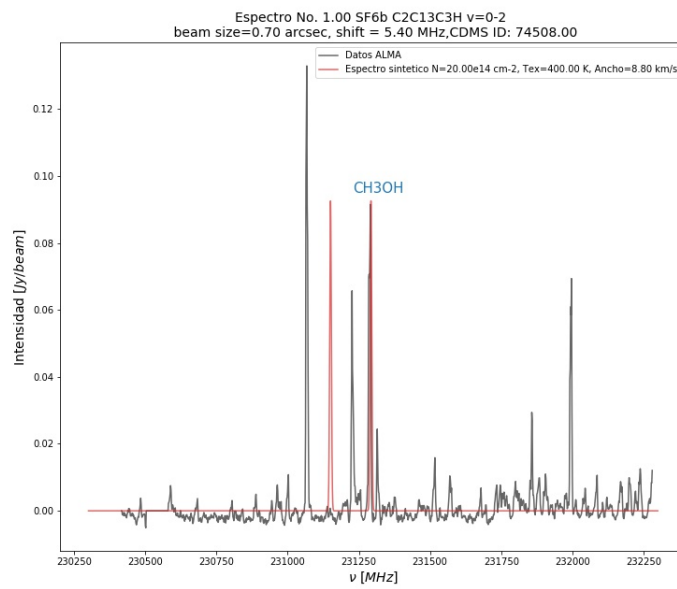


Figura B.11: Espectro sintético de  $C_2^{13}C_3H$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.



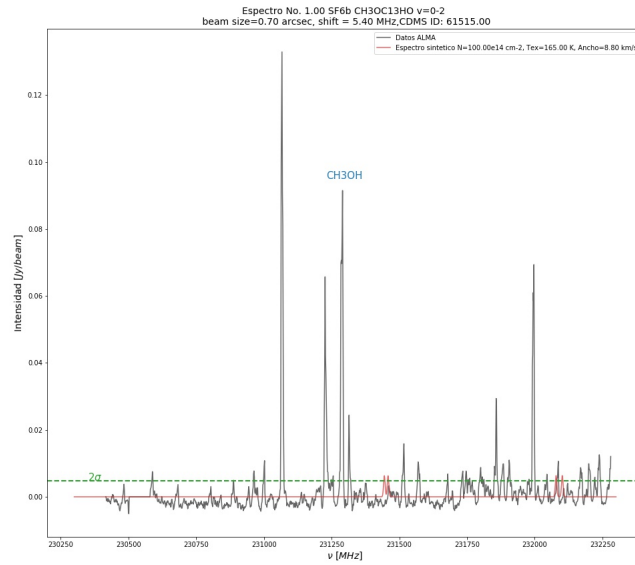


Figura B.12: Espectro sintético de  $\text{CH}_3\text{O}^{13}\text{CHO}$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

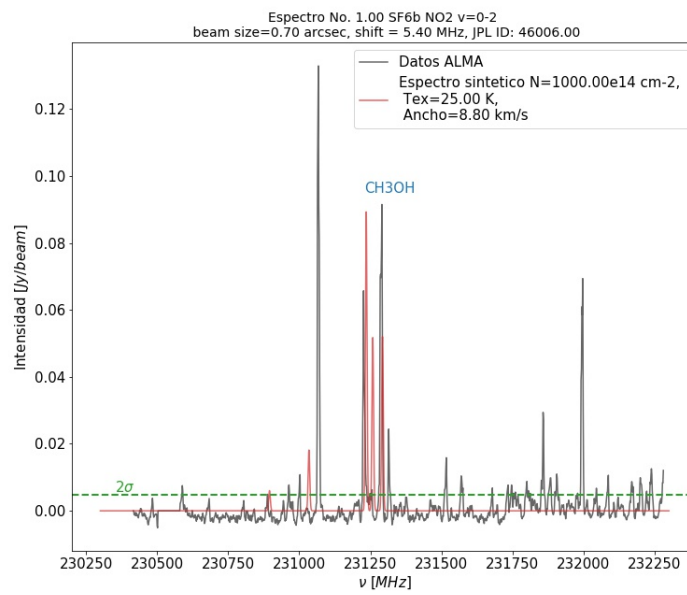


Figura B.13: Espectro sintético de  $\text{NO}_2$  creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

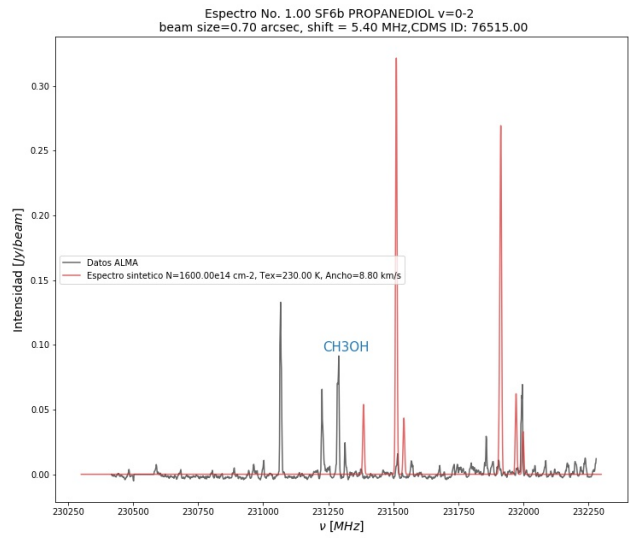


Figura B.14: Espectro sintético del *Propanediol* creado para la línea a  $\nu=231.002$  GHz.

## Línea 734

Igualmente, los siguientes espectros sintéticos fueron creados sin mostrar compatibilidad con nuestro espectro observado.

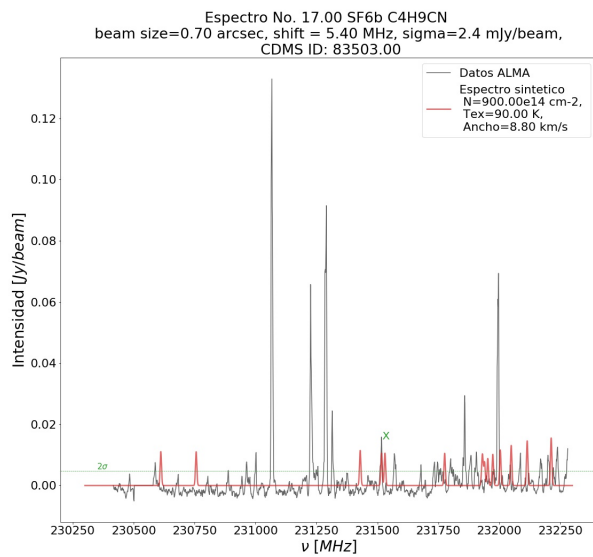


Figura B.15: Espectro sintético de  $C_4H_9CN$  creado para la línea a  $\nu=231.517$  GHz.

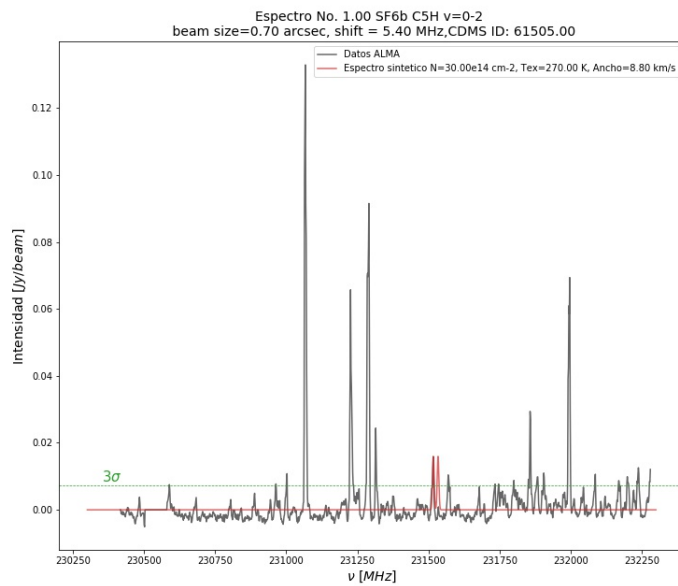


Figura B.16: Espectro sintético de C<sub>5</sub>H creado para la línea a  $\nu=231.517$  GHz.

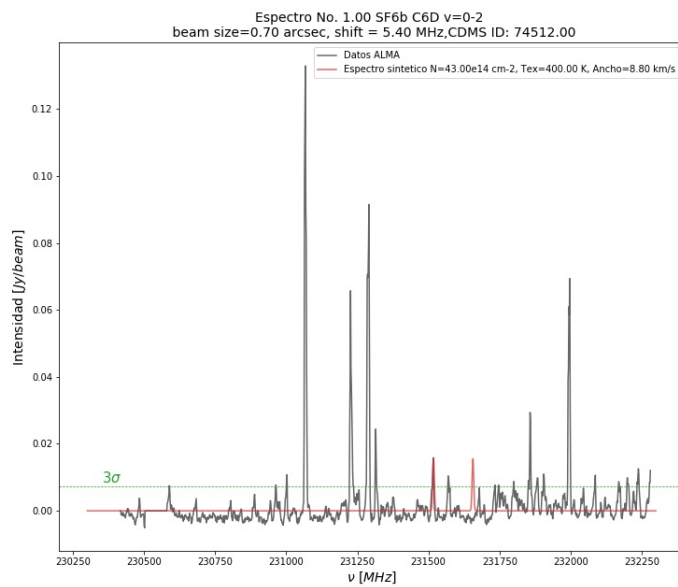


Figura B.17: Espectro sintético de C<sub>6</sub>D creado para la línea a  $\nu=231.517$  GHz.

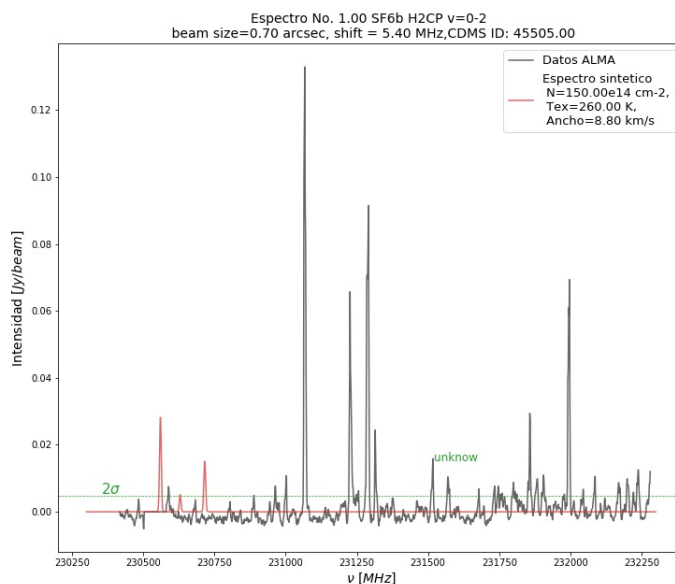


Figura B.18: Espectro sintético de H<sub>2</sub>CP creado para la línea a  $\nu=231.517$  GHz.

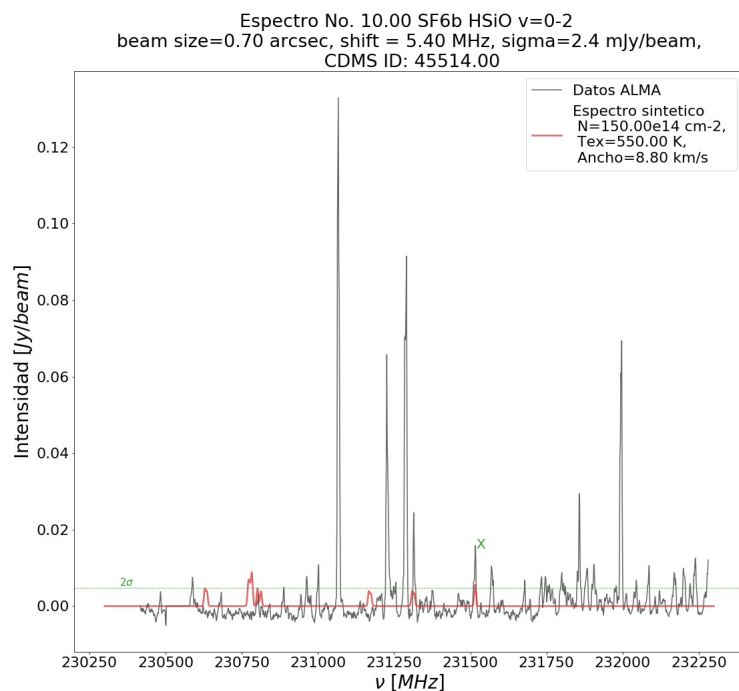


Figura B.19: Espectro sintético de HSiO creado para la línea a  $\nu=231.517$  GHz.

## Línea 879

Los siguientes espectros sintéticos fueron creados sin mostrar compatibilidad con nuestro espectro observado.

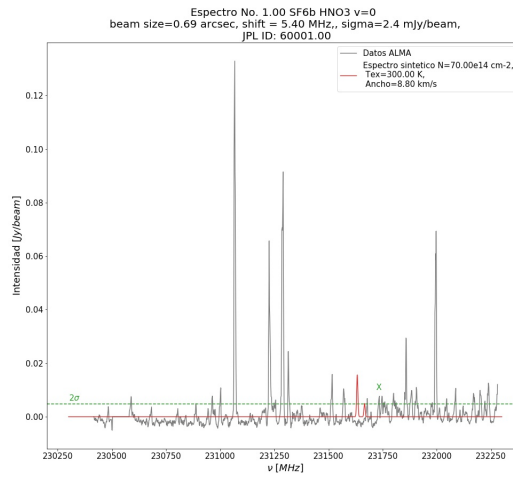


Figura B.20: Espectro sintético de HNO<sub>3</sub> creado para la línea a  $\nu=231.734$  GHz.

En este caso, además, la molécula no ha sido detectada en estos objetos:

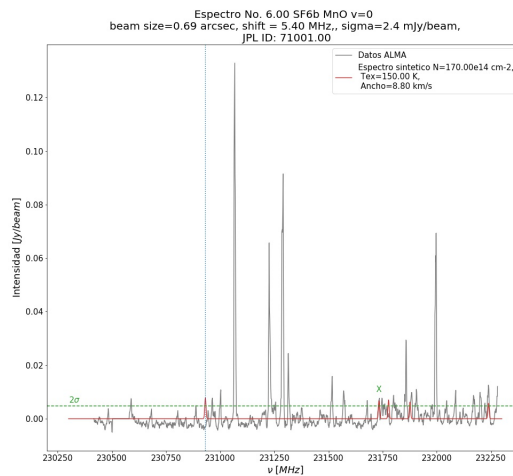


Figura B.21: Espectro sintético de MnO creado para la línea a  $\nu=231.734$  GHz.

## Línea 923

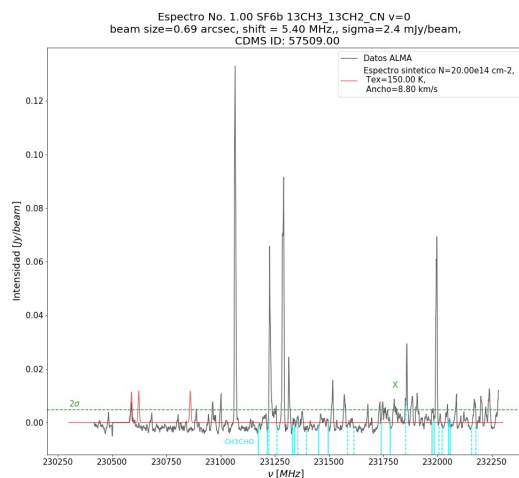


Figura B.22: Espectro sintético de  $^{13}\text{CH}_3^{13}\text{CH}_2\text{CN}$  creado para la línea a  $\nu=231.8$  GHz.

A pesar de que parece coincidir en frecuencia con nuestro espectro observado, haciendo un acercamiento esto no es así realmente.

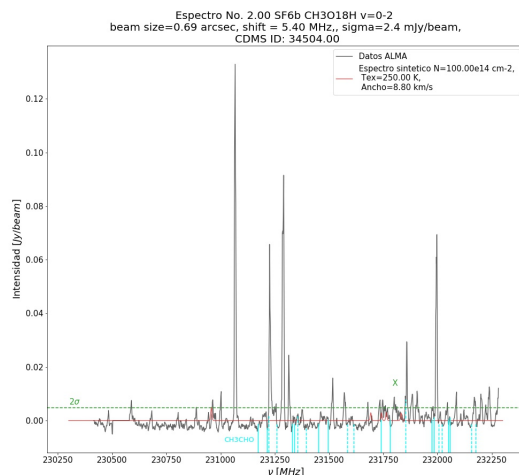


Figura B.23: Espectro sintético de  $\text{CH}_3^{18}\text{OH}$  creado para la línea a  $\nu=231.8$  GHz.

## Línea 979

El siguiente espectro parece coincidir bien con nuestro espectro observado, sin embargo, hay una línea a bajas frecuencias que no parece corresponderse.

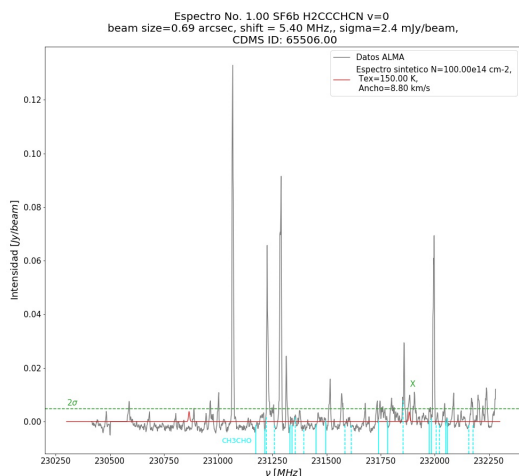


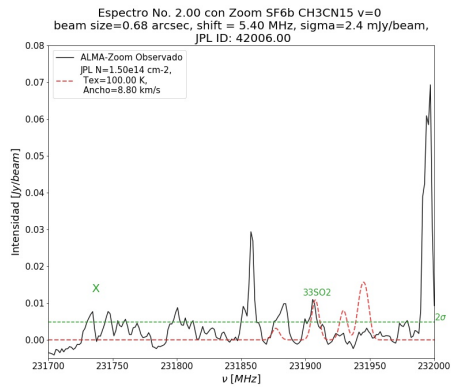
Figura B.24: Espectro sintético de  $\text{H}_2\text{CCCHCN}$  creado para la línea a  $\nu=231.884$  GHz.

## $\text{CH}_3^{15}\text{CN}$

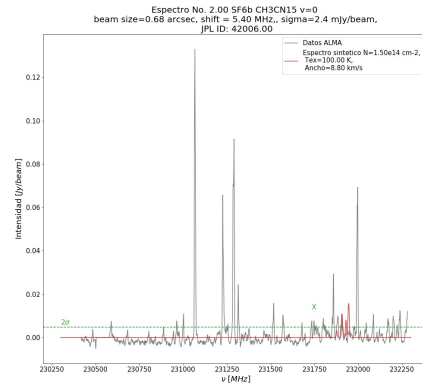
Durante la identificación de la línea con el número 879 se realizó el espectro sintético para el isótopo del *methyl cyanide*, sin embargo, esta presenta mejores resultados para la línea 993 ( $\nu = 231.905$  GHz) como se muestra a continuación.

En estos espectros sintéticos, se tomaron los valores del factor de llenado y el tamaño del haz correspondiente a la línea 993. Vemos que además pudiera estar contribuyendo a la línea con el número 979 ( $\nu=231.884$  GHz) que como se mencionó parecía estar mezclada con otra molécula.

Al final del documento se presenta la suma de todas las contribuciones, en especial, en la figura 3.2d se puede ver como estas contribuciones a las líneas 979 y 993 hacen que se ajuste mejor al ancho de la línea.



(a) Acercamiento sobre las posibles líneas donde contribuye el cianuro de metilo.



(b) Superposición del espectro observado y el sintético en toda la banda 6 para el cianuro de metilo.

Figura B.24: Línea 1215





# Apéndice C

## Código: Espectro sintético $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$

```
1 # -*- coding: utf-8 -*-
2
3 """
4 Created on Fri Jul  3 12:34:42 2020
5
6 @author: zmher
7 """
8
9 import pandas as pd
10 import numpy as np
11 from numpy import pi
12 import math
13 import matplotlib.pyplot as plt
14 from astropy import constants as const
15 from scipy.interpolate import interp1d
16
17 print('ESPECTRO SINTETICO C13H3CN SF6b \n' )
18
19 #CONSTANTES
20 h = const.h.cgs.value #ergs s
21 K = const.k_B.cgs.value #ergs K
22 c = const.c.cgs.value #cm/s
23
24 sigma= 7.469e-4 #Jy/beam CLASS SF6b
25 ff_ = 0.3225 #ff calculado especialmente para 1215
26 theta_1 = 0.6708 #arcsec (Clean beam ch1215)
27
28 theta_ = theta_1/60.0 #0.0116 #conversion a arcmin, usado en la
    ec 22 para Intensidad
29 lamda= 0.13 #cm, long de observacion 1.3 mm
30
31 freq = (c/lamda)*1.0e-9 #convirtiendo de Hz a GHz
32 print('OBSERVACION: \n Frecuencia: ', freq, 'GHz \n Long de:',
    lamda, 'cm \n ff:', ff_, '\n Source size:', theta_, 'arcmin')
33
34 # ----- #
```

```

35 #Datos del catalogo: CDMS
38
39 #ID2 para guardar la figura diferente
40 def synthetic_C13H3CN(ID, fichero_all, fichero_Qrs, ancho,
41 densidad, temperatura, shift, ID2, data_ALMA):#, data_zoom):
42
43     print('-----')
44     print('La molecula en JPL se corresponde con el ID:', ID)
45
46     #se cambio a numpy para que no haya problema al leer todas
47     las columnas que se descargan
48     nu1, log_I300, Ei1 = np.loadtxt(fichero_all, ndmin=2, usecols
49     =(0,2,4), unpack=True)
50
51     print('-----')
52     print('Tenemos', len(nu1), 'lineas encontradas')
53
54     #Conversiones
55     nu = nu1*1.0e6 #frecuencia MHz a Hz
56     # ----- #
57     I3001 = pow(10, log_I300) #quitamos el logaritmo, nm2MHz
58     I300 = I3001*1.0e-8 #conversion a cm^-2 Hz
59     # ----- #
60     Ei = Ei1*1.986e-16 #Energia en el nivel inferior cm-1 a ergs
61     Ei_K = Ei1*1.438776877 #Energia en el nivel inferior cm-1 a
62     Kelvin
63
64     #Funcion de Particion y temp de excitacion: JPL
65     table = pd.read_csv(fichero_Qrs, header=None,
66     delim_whitespace=True) #sin encabezado
67     Tex = table.iloc[:,0] #primera columna es la Temp de
68     excitacion
69     Qrs = table.iloc[:,1] #segunda columna es el valor de Qrs,
70     con logaritmo
71
72     #Extraemos solamente la funcion de particion y temp de
73     excitacion a 300 Kelvin:
74     #habia un error, estaba llamando a la de 500
75     Qrs_300 = Qrs[0]
76     Tex_300 = Tex[0]
77
78     #esto para verificar que estamos usando los valores a 300 K
79     print('-----')
80     print('Verificando: \n')
81     print('A', Tex_300, 'K la Qrs es:', Qrs_300)
82
83     #Interpolacion de Qrs a una Tex diferente al catalogo
84     print('-----')
85     inter_lineal = interp1d(Tex, Qrs, fill_value='extrapolate') #
86     funcion general que extrapola

```

```

79     Tex_inter = temperatura #definimos la temp a la que queremos
extrapolar; haremos sea un valor global
82
83     Qrs_inter=inter_lineal(Tex_inter) #le decimos a la funcion a
que temperatura queremos extrapolar/interpoliar
84
85     print('Interpolando a una Tex=', Tex_inter, 'tenemos que la
Qrs=', Qrs_inter)
86     print('-----')
87
88     #Valores que pueden ser modificados, algunos definidos
globalmente:
89     dV_ = ancho #cm/s
90     N_ = densidad #cm-2
91     #para evitar confusion, usamos el valor extrapolado/
interpolado definido con "temperatura"
92     Tex_ = Tex_inter
93     Qrs_ = Qrs_inter
94
95     print(""" Los valores usados son:
96             dV=%.2f km/s,
97             Tex=%.2f K,
98             Qrs=%.2f y
99             N =%.2fe14 cm-2""") %(dV_/100000, Tex_, Qrs_, N_/1.0e14)
)
100    print('-----')
101
102    #Funciones a usar:
103    def Eupper(Elower):
104        E_sup = h*nu + Elower
105        return(E_sup)
106
107    def Smu2(I, Elower):
108        expo_1 = np.exp((-Ei)/(K*Tex_300))
109        expo_2 = np.exp((-Eupper(Ei))/(K*Tex_300))
110        fac = expo_1 - expo_2
111        Qrs2 = Qrs_300/fac
112        cte = (3.0*h*c)/(8*pi**3)
113        Inu = I300/nu
114        smu2 = cte*Inu*Qrs2
115        return(smu2)
116
117    def AreaLinea(Texc, Ntot, Z,ff):
118        W1 = (8*pi**3*nu*ff)/(3*K*Z) #filling factor!!
119        e1 = Eupper(Ei)/(K*Texc)
120        expo = np.exp(e1)
121        W2 = (Smu2(I300, Ei)*Ntot)/expo
122        Tmb_dV = W1*W2
123        return(Tmb_dV)
124
125    def T_MB(ancho, ff):

```

```

126     Tmb = AreaLinea(Tex_, N_, Qrs_, ff)/ancho
129     return(Tmb)
130
131     def Intensity(theta, frec): #eq ifmi page 5
132         #Tmb [Kelvin]
133         #theta_A [arcmin] <- del telescopio
134         #frec [GHz]
135         Int = 2.95*T_MB(dV_, ff)*(theta**2)*(frec**2)
136         return(Int) #unidades: mJy/beam
137
138     print('----- ')
139     print(' Creando gaussianas ... ')
140     print('----- \n')
141
142     #Doppler efect broadening. He retomado los valores iniciales
143     de freq nu1=[MHz] y no en Hz
144     #nu1 es la freq en reposo de una de las transiciones
145     #dV_ es el ancho que le estamos introduciendo que podemos ir
146     variando
147     #c es la velocidad de la luz
148     Df = -(dV_*nu1)/c
149
150     #Number of samples to generate. Default is 50. Must be non-
151     negative.
152     x= np.linspace(230400.,232300.,10000)    #[MHz]
153
154     def gaussian(c,a,w): #central freq, amplitude, width
155         #gauss = a*np.exp(-(x-c)**2/w**2/2.) #this is a
156         Loretzian shape
157         var = (x-c)/(w/2)
158         gauss = a*np.exp(-np.log(2)*var**2 ) #this is a Gaussian
159         shape
160         return(gauss)
161
162     spec = np.zeros((len(x))) #Return a new array of given shape
163     and type, filled with zeros.
164     for j in range(len(nu1)):
165         spec = spec +gaussian(nu1[j]+shift, Intensity(theta_,
166         frec)[j]*1.0e-3 , Df[j])
167
168     print(' Obteniendo espectro con datos ALMA \n' )
169     data2 = pd.read_csv(data_ALMA, header=None, delim_whitespace=
170     True)
171     F = data2.iloc[:,0] #primera columna del archivo frecuencias,
172     MHz
173     S = data2.iloc[:,1] #segunda columna es la intensidad
174     observada con ALMA, Jy/beam
175
176     print('Graficando espectro completo ')
177     fig, ax = plt.subplots(figsize=(20,10))
178     ax.plot(F,S, label='Espec ALMA', color=(0,0,0), alpha=0.5)

```

```

169 ax.plot(x,spec, label='Espectro sintetico N=%.2fe14 cm-2, \n
Tex=%.2f K, \n Ancho=%.2f km/s' %(N_*1.0e-14, Tex_, dV_*1.e-5),
color = ('tab:red'), alpha=0.9, lw=1.5)
172 ax.set_xlabel(r'\nu$ [MHz$]', fontsize=18)
173 ax.set_ylabel(r'Intensidad [Jy/beam$]', fontsize=18)
174 ax.set_title('Espectro No. %.2f SF6b C13H3CN v=0 \n beam size
=%.2f arcsec, shift = %.2f MHz,, sigma=0.74 mJy/beam, \n JPL
ID: %.2f' %(ID2, theta_1, shift, ID), fontsize=20.)
175 ax.legend(prop={'size': 15})
176 ax.tick_params(axis='both', labelsize=15)
177 ax.set_xlim(230400.0, 232300.0)
178 plt.axhline(y=3*sigma, ls='--', lw=1.5, color = ('tab:green')
)
179 plt.text(230300.0, 3.5*sigma, r'$\sigma$', rotation=0, fontsize
=15, color = ('tab:green'))
180 fig.savefig('Espectro_C13H3CN_%.2f.jpg' %(ID2))
181
182 print(' Graficando espectro con zoom ')
183 fig2, ax2 = plt.subplots(figsize=(20,10))
184 ax2.plot(F,S, label='Espec ALMA', color=(0,0,0), alpha=0.9) #
color negro
185 ax2.plot(x,spec, label='JPL N=%.2fe14 cm-2, \n Tex=%.2f K, \n
Ancho=%.2f km/s' %(N_*1.0e-14, Tex_, dV_*1.e-5), color = ('tab:
red'), alpha=0.8, lw=2, ls='--')
186 ax2.set_xlabel(r'\nu$ [MHz$]', fontsize=18)
187 ax2.set_ylabel(r'Intensidad [Jy/beam$]', fontsize=18)
188 ax2.set_title('Espectro No. %.2f con Zoom SF6b C13H3CN v=0 \n
beam size=%.2f arcsec, shift = %.2f MHz, sigma=0.74 mJy/beam,
\n JPL ID: %.2f' %(ID2, theta_1, shift, ID), fontsize=20.)
189 ax2.legend(prop={'size': 15})
190 ax2.tick_params(axis='both', labelsize=15)
191 ax2.set_xlim(232000.0, 232300.0)
192 ax2.set_ylim(-0.005, 0.02)
193 plt.axhline(y=3*sigma, ls='--', lw=1.5, color = ('tab:green')
)
194 plt.text(232000.0, 3.5*sigma, r'$\sigma$', rotation=0, fontsize
=15, color = ('tab:green'))
195 fig2.savefig('Espectro_C13H3CN_zoom_%.2f.jpg' %(ID2))
196
197 #Creacion de archivo con nu e intensidad espec sintetico
198 np.savetxt('data_C13H3CN.txt', np.c_[x, spec], delimiter=' ')
199
200
201 print('\n Datos ESPEC SINTET \n')
202 fig3, ax3 = plt.subplots(figsize=(20,10))
203 ax3.plot(F,S, label='ALMA-Zoom Observado', color=(0,0,0),
alpha=0.9)
204 ax3.plot(x,spec, label='JPL N=%.2fe14 cm-2, \n Tex=%.2f K, \n
Ancho=%.2f km/s' %(N_*1.0e-14, Tex_, dV_*1.e-5), color = ('tab:
red'), alpha=0.8, lw=2, ls='--')
205 ax3.set_xlim(232000.0, 232300.0)

```

```

206 ax3.set_ylim(-0.0040, 0.02)
209 ax3.set_xlabel(r'$\nu$ [$MHz$]', fontsize=18)
210 ax3.set_ylabel(r'Intensidad [$Jy/beam$]', fontsize=18)
211 ax3.set_title('Espectro No. %.2f con Zoom SF6b C13H3CN v=0 \n
beam size=%.2f arcsec, shift = %.2f MHz, sigma=0.74 mJy/beam,
\n JPL ID: %.2f' %(ID2, theta_1, shift, ID),fontsize=20.)
212 ax3.legend(prop={'size': 15})
213 ax3.tick_params(axis='both',labelsize=15)
214 plt.axhline(y=3*sigma, ls='--', lw=1.5, color = ('tab:green')
)
215 plt.text(232000.0,3.5*sigma,r'$3\sigma$',rotation=0, fontsize
=15, color = ('tab:green'))

216
217 print('\n Datos ESPEC OBSERVADO \n')
218 #Trans 7
219 print('Frec obs [1141]:', F[1141])
220 print('Intensidad obs [1141]:', S[1141], '\n')
221 #plt.axvline(F[1140], lw=2)
222 plt.axvline(F[1141], lw=2)
223 plt.text(F[1142],0.018,'K=5', fontsize=15, color = ('tab:
green'))
224
225 #trans 9
226 print('Frec obs [1187]:', F[1187])
227 print('Intensidad obs [1187]:', S[1187], '\n')
228 plt.axvline(F[1187], lw=2)
229 plt.text(F[1187],0.018,'K=3', fontsize=15, color = ('tab:
green'))
230
231 #plt.axvline(232197.57, lw=2, c='g') #contrib glycol, freq
232
233 #trans 10
234 print('Frec obs [1202]:', F[1202])
235 print('Intensidad obs [1202]:', S[1202], '\n')
236 plt.axvline(F[1202], lw=2)
237 plt.text(F[1203],0.018,'K=2', fontsize=15, color = ('tab:
green'))
238
239 #plt.axvline(F[1203], lw=2)
240
241 #trans 11
242 #print('Frec obs [1211]:', F[1211])
243 #print('Intensidad obs [1211]:', S[1211], '\n')
244 #plt.axvline(F[1210], lw=2)
245 # plt.axvline(F[1211], lw=2)
246
247 #trans 12
248 print('Frec obs [1213]:', F[1213])
249 print('Intensidad obs [1213]:', S[1213])
250 plt.axvline(F[1213], lw=2)
251 plt.text(F[1214],0.018,'K=0', fontsize=15, color = ('tab:

```

---

```
    green'))
254
255     fig3.savefig('Espectro_C13H3CN_Diagrama_SF6_%.2f.jpg' %(ID2))
256
257
258 #synthetic_C13H3CN(42006, 'JPL_C13H3CN.DAT', 'Qrs_C13H3CN.DAT',
    8.8e5, 1.5e14, 150.0, 5.4, 1, 'spec-spw1-sf6b-Jypb-bsl-
    alma2class.txt')
```





## Apéndice D

### Código: Diagrama rotacional $^{13}\text{CH}_3\text{CN}$

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3 """
4 @author: esmeralda
5 """
6
7 import pandas as pd
8 import numpy as np
9 from numpy import pi
10 import math
11 import matplotlib.pyplot as plt
12 from astropy import constants as const
13
14 h = const.h.cgs.value #ergs s
15 K = const.k_B.cgs.value #ergs K
16 c = const.c.cgs.value #cm/s
17
18 dV_ = 5.085e5 #cm/s SF3
19 theta = 0.691963 #tamano del haz header cubo; Aina
20
21
22 """ PARTE I: conversion Intensidad Jy/beam a Kelvin """
23
24 theta_ = (theta/60.0) #CONVERSION DE ARCSEC TO ARCMIN
25
26 #Transiciones observadas ALMA#
27
28 # ----- #
29 #K=5
30 nu_c4h2 = 232131.8331*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con
    shift)
31 Int_c4h2 = 0.001236627*1.0e3 #Obtenida del code
32
```

```

33 nu7_ = 232130.542*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con shift);
    conv MHz a GHz
36 Int7_ = 0.00313680*1.0e3 # Intensidad observada ALMA; Conversion
    incluida de Jy/beam a mJy/beam
37
38 # ----- #
39 #K=3
40 nu_glyc = 232197.7697*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con
    shift)
41 Int_glyc = 0.00193028*1.0e3 #Obtenida del code
42
43 nu9_ = 232201.042*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con shift);
    conv MHz a GHz
44 Int9_ = 0.00623189*1.0e3 ## Intensidad observada ALMA; Conversion
    incluida de Jy/beam a mJy/beam
45
46 # ----- #
47 #K=2
48 nu10_ = 232223.542*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con shift);
    conv MHz a GHz
49 Int10_ = 0.00537760*1.0e3 # Intensidad observada ALMA; Conversion
    incluida de Jy/beam a mJy/beam
50
51 #K=1
52 #nu11_ = 232235.542*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con shift)
    ; conv MHz a GHz
53 #Int11_ = 0.003786*1.0e3 # Intensidad observada ALMA; Conversion
    incluida de Jy/beam a mJy/beam
54
55 #K=0
56 nu12_ = 232240.042*1.0e-3 #Frecuencia observada ALMA (con shift);
    conv MHz a GHz
57 Int12_ = 0.0064152*1.0e3 # Intensidad observada ALMA; Conversion
    incluida de Jy/beam a mJy/beam
58
59 # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- #
    # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- #
    --- #
60
61 theta2_ = (theta_)**2 #Calculo p introducir en la ec de Tmb
62
63 def Tmb(Inu, freq): #Inu[mJy/beam], freq[GHz]
64     Temp = (Inu)/(2.95*theta2_*freq**2) #theta2_ [arcmin]
65     return(Temp)
66
67 print('\n Temperaturas calculadas: \n')
68 print('C4H2 T_mb[K]:', Tmb(Int_c4h2, nu_c4h2))
69 print('7 + C4H2 T_mb[K]:', Tmb(Int7_, nu7_))
70 print('7 - C4H2 T_mb[K]:', Tmb(Int7_, nu7_)-Tmb(Int_c4h2, nu_c4h2
    ), '\n')
71

```

```

72 #print('Glyc T_mb[K]:', Tmb(Int_glyc, nu_glyc))
73 #print('9+glyc T_mb[K]:', Tmb(Int9_, nu9_))
74 #print('9-glyc T_mb[K]:', Tmb(Int9_, nu9_) - Tmb(Int_glyc,
75     nu_glyc), '\n') # <--- USAR PARA EL DIAGRAMA
76
77
78 #print('10 T_mb[K]:', Tmb(Int10_, nu10_), '\n')
79
80 #blended
81 #print('11 T_mb[K]:', Tmb(Int11_, nu11_))
82 #print('12 T_mb[K]:', Tmb(Int12_, nu12_), '\n')
83
84 # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- #
85     # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- # --- #
86     --- #
87
88 """" PARTE II: Ajuste para el diagrama rotacional """"
89 "Datos diagrama"
90 nu0_7 = 232125.12970e6 #Hz --> JPL
91 Smu2_7 = 340.77096 #Debye^2 = (esu cm)^2 = (g cm3 s-2 cm2) #
92     splatalogue
93 Eup_7 = 256.87423 #kelvin, splatalogue
94 Tmb_7 = Tmb(Int7_, nu7_) - Tmb(Int_c4h2, nu_c4h2) #K=5 - c4h2
95 #Tmb_7 = Tmb(Int7_, nu7_) #K=5
96
97 nu0_9 = 232194.9056e6 #Hz --> JPL
98 Smu2_9 = 757.22218 #Debye^2 = (esu cm)^2 = (g cm3 s-2 cm2) #
99     splatalogue
100 Eup_9 = 142.42947 #kelvin, splatalogue
101 #Tmb_9 = Tmb(Int9_, nu9_)
102 Tmb_9 = Tmb(Int9_, nu9_) - Tmb(Int_glyc, nu_glyc)
103
104 nu0_10 = 232216.7263e6 #Hz --> JPL
105 Smu2_10 = 390.43308 #Debye^2 = (esu cm)^2 = (g cm3 s-2 cm2) #
106     splatalogue
107 Eup_10 = 106.65121 #kelvin, splatalogue
108 Tmb_10 = Tmb(Int10_, nu10_) #Kelvin CODE
109
110 #nu0_11 = 232229.8223e6 #Hz --> JPL
111 #Smu2_11 = 397.57222 #Debye^2 = (esu cm)^2 = (g cm3 s-2 cm2) #
112     splatalogue
113 #Eup_11 = 85.18112 #kelvin, splatalogue
114 #Tmb_11 = Tmb(Int11_, nu11_)#Kelvin CODE
115
116 nu0_12 = 232234.1883e6 #Hz JPL
117 Smu2_12 = 399.8879 #Debye^2 = (esu cm)^2 = (g cm3 s-2 cm2) #
118     SPLATALOGUE
119 Eup_12 = 78.02380 #kelvin SPLATALOGUE
120 Tmb_12 = Tmb(Int12_, nu12_) #Calculada a partir del observado
121     ALMA
122
123 def NupGup(freq, Tmb, Smu2, ancho ):

```

```

116     fac1 = 3.0*K*Tmb*ancho
117     fac2 = 8.0*(np.pi**3)*freq*Smu2
118     Nup_gup = fac1 / fac2
119     return(Nup_gup)
120
121 # ----- #
122 Punto1 = np.log(NupGup(nu0_7, Tmb_7, Smu2_7, dV_ ))
123 Punto2 = np.log(NupGup(nu0_9, Tmb_9, Smu2_9, dV_ ))
124 Punto3 = np.log(NupGup(nu0_10, Tmb_10, Smu2_10, dV_))
125 #Punto4 = np.log(NupGup(nu0_11, Tmb_11, Smu2_11, dV_))
126 Punto5 = np.log(NupGup(nu0_12, Tmb_12, Smu2_12, dV_))
127 # ----- #
128
129 No_fig = 6 #SE LE HA QUITADO LA CONTRIBUCION DEL GLYCOL A LA K
130           =3, agregando k=5 restandole C4H2
131 ##energias en el nivel superior de cada transicion
132 x_ = np.array([Eup_7, Eup_9, Eup_10, Eup_12])
133 ##Calculo del Nu en logaritmo
134 y_ = np.array([Punto1, Punto2, Punto3, Punto5])
135
136
137 fit = np.polyfit(x_,y_,1)
138 print(fit) #primer parametro es nuestra pendiente, mientras que
139           el segundo es la abscisa
140 fit_ = fit[0]*x_ + fit[1]
141
142 "Temperatura rotacional"
143 Trot = -1.0/fit[0]
144 print('Trot es:', Trot)
145
146 "Visualizacion del diagrama"
147 fig, ax = plt.subplots(figsize=(13,7))
148 yerror =
149 ax.plot(x_, y_, 'ro', label='Datos  ${}^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ ')
150 ax.plot(x_, fit_, 'b-', label='Ajuste: Trot=%.2f K' %(Trot))
151
152 ax.plot(Eup_7, Punto1, marker='D', color='b', label='K = 5')
153 ax.plot(Eup_9, Punto2, marker='D', color='c', label='K = 3')
154 ax.plot(Eup_10, Punto3, marker='D', color='g', label='K = 2')
155 #ax.plot(Eup_11, Punto4, marker='D', color='r', label='K = 1')
156 ax.plot(Eup_12, Punto5, marker='D', color='y', label='K = 0')
157
158 ax.set_xlabel(r'E$_{\text{up}}$ [K]', fontsize=14)
159 ax.set_ylabel(r'ln(N$_{\text{up}}$ / g$_{\text{up}}$ [cm$^{-2}$])$', fontsize=14)
160 ax.set_title('Fuente: SF3 \n Diagrama rotacional:  ${}^{13}\text{CH}_3\text{CN}$ 
161             (13-12)', fontsize=20.)
162
163 ax.legend(prop={'size': 15})
164 #ax.set_yscale('log', basey=10)
165 fig.savefig('Diagrama_C13H3CN_SF3_%.2f.jpg' %(No_fig))

```

# Bibliografía

- Aikawa, Y., Wakelam, V., Hersant, F., Garrod, R. T., & Herbst, E. 2012, *The Astrophysical Journal*, 760, 40
- Arce, H. G., Santiago-García, J., Jørgensen, J. K., Tafalla, M., & Bachiller, R. 2008, *The Astrophysical Journal Letters*, 681, L21
- Bachiller, R. 1996, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 34, 111
- Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., Kahane, C., & Ceccarelli, C. 2012, *Astronomy & Astrophysics*, 541, L12
- Beltrán, M. T., & Rivilla, V. M. 2018, arXiv preprint arXiv:1806.08137
- Blake, G. A., Sutton, E., Masson, C., & Phillips, T. 1987, *Astrophysical Journal*, 315, 621
- Booth, A. S., van der Marel, N., Leemker, M., van Dishoeck, E. F., & Ohashi, S. 2021, arXiv preprint arXiv:2104.08908
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., et al. 2004, *The Astrophysical Journal*, 615, 354
- Bouvier, M., López-Sepulcre, A., Ceccarelli, C., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 636, A19
- Brouillet, N., Despois, D., Baudry, A., et al. 2013, *Astronomy & Astrophysics*, 550, A46
- Cazaux, S., Tielens, A., Ceccarelli, C., et al. 2003, *The Astrophysical Journal Letters*, 593, L51
- CDMS. 2021, *Molecules in Space*, [https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/molecules#molecules\\_in\\_the\\_interstellar\\_medium\\_or\\_circumstellar\\_shells\\_as\\_of\\_02\\_2021](https://cdms.astro.uni-koeln.de/classic/molecules#molecules_in_the_interstellar_medium_or_circumstellar_shells_as_of_02_2021), [Online; accessed 10-Enero-2021]
- Ceccarelli, C. 2004, in *Star Formation in the Interstellar Medium: In Honor of David Hollenbach*, Vol. 323, 195

- 
- Ceccarelli, C., Caselli, P., Fontani, F., et al. 2017, *The Astrophysical Journal*, 850, 176
- Chacón-Tanarro, A., Pineda, J., Caselli, P., et al. 2019, *Astronomy & Astrophysics*, 623, A118
- Chandler, C. J., Brogan, C. L., Shirley, Y. L., & Loinard, L. 2005, *The Astrophysical Journal*, 632, 371
- Charnley, S. B. 2011, *Hot Cores*, ed. M. Gargaud, R. Amils, J. C. Quintanilla, H. J. J. Cleaves, W. M. Irvine, D. L. Pinti, & M. Viso (Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg), 763–763
- Codella, C., Cabrit, S., Gueth, F., et al. 2014, *Astronomy & Astrophysics*, 568, L5
- Codella, C., Ceccarelli, C., Cabrit, S., et al. 2016, *Astronomy & Astrophysics*, 586, L3
- Codella, C., Ceccarelli, C., Caselli, P., et al. 2017, *Astronomy & Astrophysics*, 605, L3
- Codella, C., Ceccarelli, C., Bianchi, E., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 635, A17
- Coletta, A., Fontani, F., Rivilla, V., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 641, A54
- Coutens, A., Commerçon, B., & Wakelam, V. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 643, A108
- Dame, T. M., Hartmann, D., & Thaddeus, P. 2001, *The Astrophysical Journal*, 547, 792
- De Simone, M., Ceccarelli, C., Codella, C., et al. 2020, *The Astrophysical Journal Letters*, 896, L3
- Enoch, M. L., Corder, S., Duchêne, G., et al. 2011, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 195, 21
- Estalella, R., & Pons, G. A. 1997, *Introducción a la física del medio interestelar* (Universitat de Barcelona)
- Fuente, A., Cernicharo, J., Caselli, P., et al. 2014, *Astronomy & Astrophysics*, 568, A65
- Galván-Madrid, R., Liu, H. B., Izquierdo, A. F., et al. 2018, *The Astrophysical Journal*, 868, 39
- Gaume, R., Wilson, T., Vrba, F., Johnston, K., & Schmid-Burgk, J. 1998, *The Astrophysical Journal*, 493, 940
- Gerner, T., Beuther, H., Semenov, D., et al. 2014, *Astronomy & Astrophysics*, 563, A97
- Goldsmith, P. F., & Langer, W. D. 1999, *The Astrophysical Journal*, 517, 209

- 
- Henning, T., & Semenov, D. 2013, *Chemical Reviews*, 113, 9016
- Herbst, E., & Van Dishoeck, E. F. 2009, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 47, 427
- Ikeda, N., Sunada, K., & Kitamura, Y. 2007, *The Astrophysical Journal*, 665, 1194
- Jiménez-Serra, I., Vasyunin, A. I., Caselli, P., et al. 2016, *The Astrophysical Journal Letters*, 830, L6
- Jørgensen, J. K., Belloche, A., & Garrod, R. T. 2020, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 58, 727
- Kamp, I. 2019, arXiv preprint arXiv:1901.10862
- Keene, J., Hildebrand, R., & Whitcomb, S. 1982, *The Astrophysical Journal*, 252, L11
- Kounkel, M., Hartmann, L., Loinard, L., et al. 2017, *The Astrophysical Journal*, 834, 142
- Law, C. J., Zhang, Q., Öberg, K. I., et al. 2021, arXiv preprint arXiv:2101.07801
- Leurini, S., Codella, C., Zapata, L., et al. 2011, *Astronomy & Astrophysics*, 530, A12
- Loison, J.-C., Agúndez, M., Marcelino, N., et al. 2016, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 456, 4101
- Martín-Doménech, R., Bergner, J. B., Öberg, K. I., & Jørgensen, J. K. 2019, *The Astrophysical Journal*, 880, 130
- Mezger, P., Wink, J., & Zylka, R. 1990, *Astronomy and Astrophysics*, 228, 95
- Moscadelli, L., Li, J. J., Cesaroni, R., et al. 2013, *Astronomy & Astrophysics*, 549, A122
- Motte, F., Bontemps, S., & Louvet, F. 2018, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 56, 41
- Öberg, K. I., & Bergin, E. A. 2020, *Physics Reports*
- Öberg, K. I., Guzmán, V. V., Furuya, K., et al. 2015, *Nature*, 520, 198
- Öberg, K. I., Van der Marel, N., Kristensen, L. E., & Van Dishoeck, E. F. 2011, *The Astrophysical Journal*, 740, 14
- Orozco-Aguilera, M., Zapata, L., & Chávez, M. 2019, *Memorie della Societa Astronomica Italiana*, 90, 511



- 
- Ortiz-León, G. N., Loinard, L., Dzib, S. A., et al. 2018, *The Astrophysical Journal Letters*, 869, L33
- Ossenkopf, V., & Henning, T. 1994, *Astronomy and Astrophysics*, 291, 943
- O'dell, C., Muench, A., Smith, N., & Zapata, L. 2008, *Handbook of Star Forming Regions*, 1
- Palau, A., Fuente, A., Girart, J. M., et al. 2011, *The Astrophysical Journal Letters*, 743, L32
- Palau, A., Walsh, C., Sánchez-Monge, Á., et al. 2017, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 467, 2723
- Palau, A., Zapata, L. A., Román-Zúñiga, C. G., et al. 2018, *The Astrophysical Journal*, 855, 24
- Panoglou, D., Cabrit, S., Des Forêts, G. P., et al. 2012, *Astronomy & Astrophysics*, 538, A2
- Phuong, N., Chapillon, E., Majumdar, L., et al. 2018, *Astronomy & Astrophysics*, 616, L5
- Pickett, H., Poynter, R., Cohen, E., et al. 1998, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60, 883
- Pineda, J. E., Maury, A. J., Fuller, G. A., et al. 2012, *Astronomy & Astrophysics*, 544, L7
- Purcell, C. 2018, Cartoon showing the observed phases in the birth and early evolution of a high-mass star, [http://web.science.mq.edu.au/~cpurcell/public/images/sequence\\_new.png](http://web.science.mq.edu.au/~cpurcell/public/images/sequence_new.png), [Online; accessed 06-Enero-2021]
- Qi, C., Öberg, K. I., Wilner, D. J., & Rosenfeld, K. A. 2013, *The Astrophysical Journal Letters*, 765, L14
- Rivière-Marichalar, P., Fuente, A., Le Gal, R., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 642, A32
- Rivilla, V., Martín-Pintado, J., Sanz-Forcada, J., Jiménez-Serra, I., & Rodríguez-Franco, A. 2013, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 434, 2313
- Rohlfs, K., & Wilson, T. L. 2013, *Tools of radio astronomy* (Springer Science & Business Media)
- Schilke, P., Benford, D., Hunter, T., Lis, D., & Phillips, T. 2001, *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 132, 281

- 
- Shu, F. H., Adams, F. C., & Lizano, S. 1987, *Annual review of astronomy and astrophysics*, 25, 23
- Skouteris, D., Balucani, N., Ceccarelli, C., et al. 2018, *The Astrophysical Journal*, 854, 135
- Smith, N., Bally, J., Shuping, R. Y., Morris, M., & Hayward, T. L. 2004, *The Astrophysical Journal Letters*, 610, L117
- Van Der Tak, F. F. 2005, *Proceedings of the International Astronomical Union*, 1, 70
- van Kempen, T., McCoey, C., Tisi, S., Johnstone, D., & Fich, M. 2014, *Astronomy & Astrophysics*, 569, A53
- Vastel, C., Ceccarelli, C., Lefloch, B., & Bachiller, R. 2014, *The Astrophysical Journal Letters*, 795, L2
- Vasyunin, A., & Herbst, E. 2013, *The Astrophysical Journal*, 769, 34
- Walsh, C., Loomis, R. A., Öberg, K. I., et al. 2016, *The Astrophysical Journal Letters*, 823, L10
- Willis, E. R., Garrod, R. T., Belloche, A., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 636, A29
- Yamamoto, S. 2017, Editorial: Springer
- Yang, Y.-L., Sakai, N., Zhang, Y., et al. 2021, *The Astrophysical Journal*, 910, 20
- Zapata, L. A., Ho, P. T., Rodríguez, L. F., et al. 2006, *The Astrophysical Journal*, 653, 398
- Zapata, L. A., Ho, P. T., Rodríguez, L. F., Schilke, P., & Kurtz, S. 2007, *Astronomy & Astrophysics*, 471, L59
- Zapata, L. A., Rodríguez, L. F., Ho, P. T., et al. 2005, *The Astrophysical Journal Letters*, 630, L85
- Zapata, L. A., Rodríguez, L. F., Kurtz, S. E., O'dell, C., & Ho, P. T. 2004, *The Astrophysical Journal Letters*, 610, L121
- Ziurys, L. M., Wilson, T., & Mauersberger, R. 1990, *The Astrophysical Journal*, 356, L25