

La Química del Cosmos

Víctor J. Herrero.

**Instituto de Estructura de la Materia, CSIC,
Madrid**

v.herrero@csic.es

<http://www.iem.cfmac.csic.es/departamentos/fismol/Victor/Victor.htm>

Elementos y compuestos

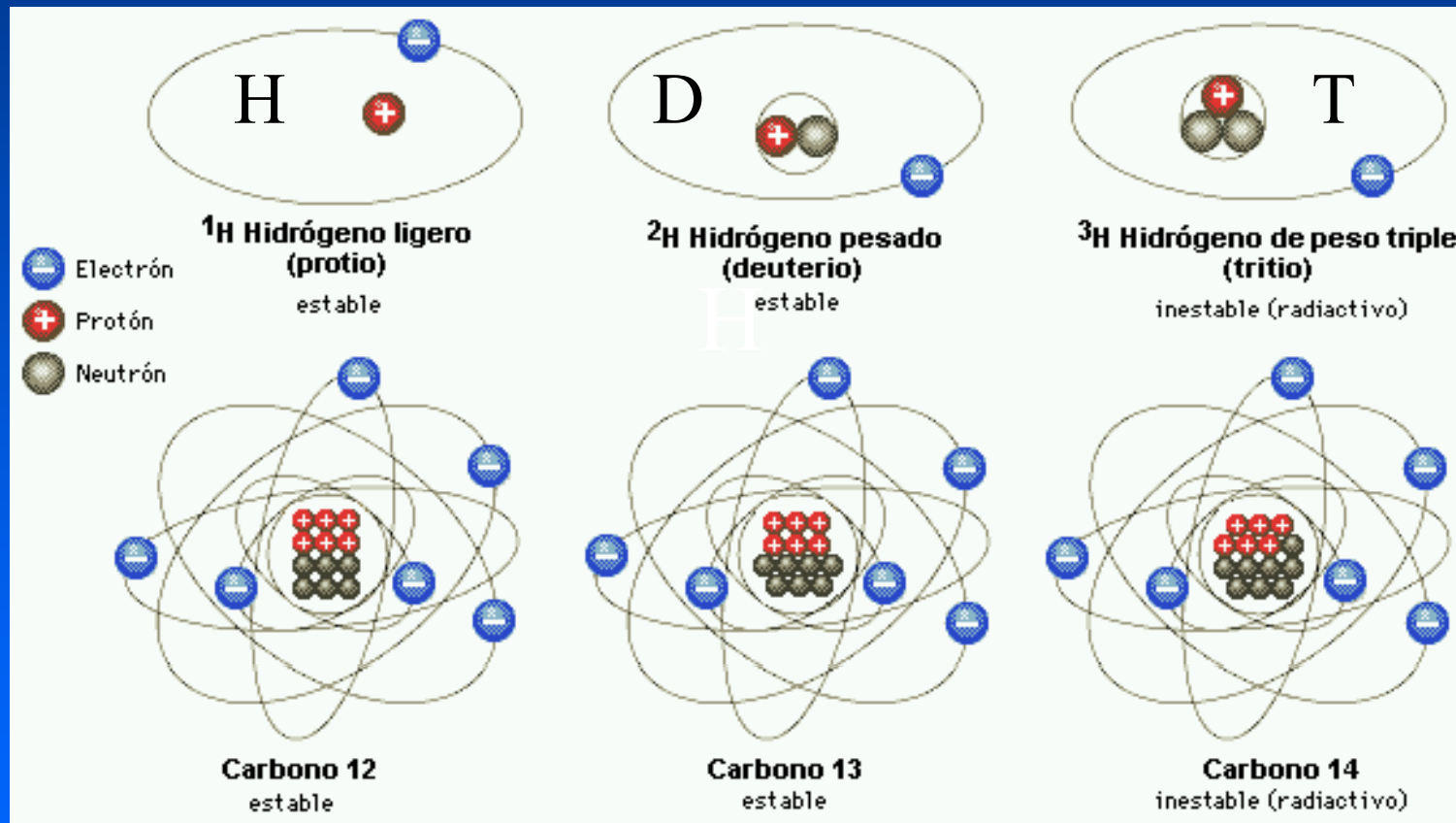
Periodic Table of the Elements

1	IA H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII	IB	IIB	13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	+89 Ac	104 Rf	105 Ha	106 Sg	107 Ns	108 Hs	109 Mt	110	111	112	113					

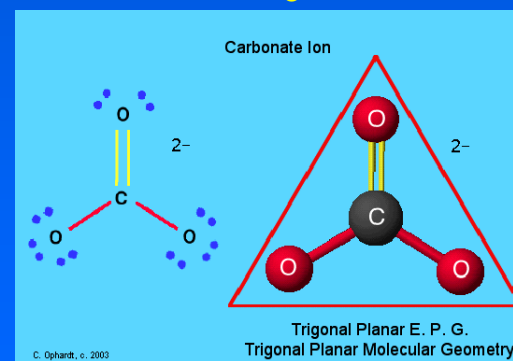
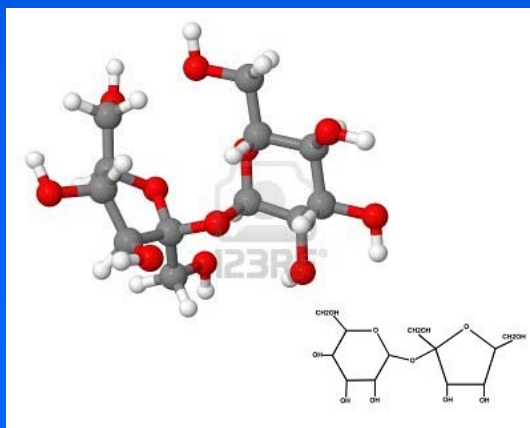
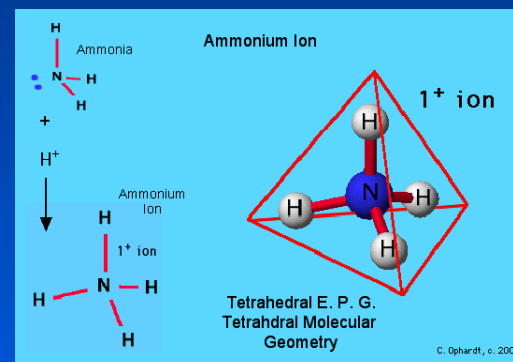
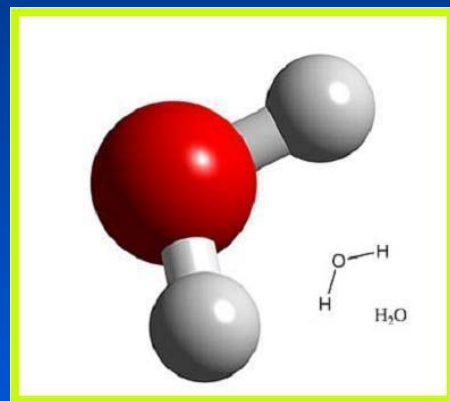
* Lanthanide Series	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
+ Actinide Series	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



Átomos e isótopos



Moléculas y iones



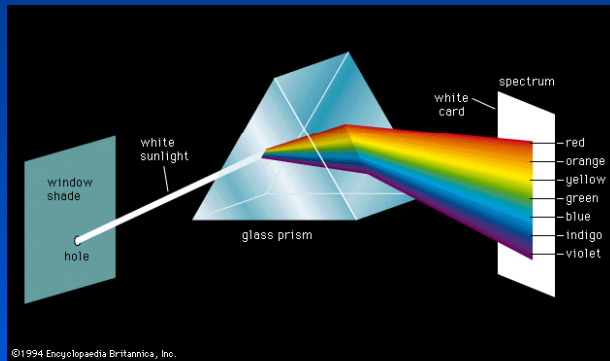


“Nunca sabremos de qué están hechas las estrellas”

A. Comte, hacia 1850

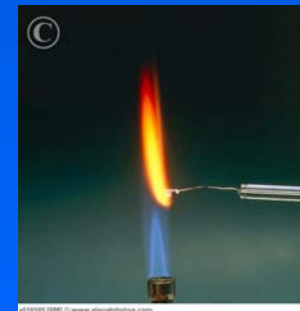
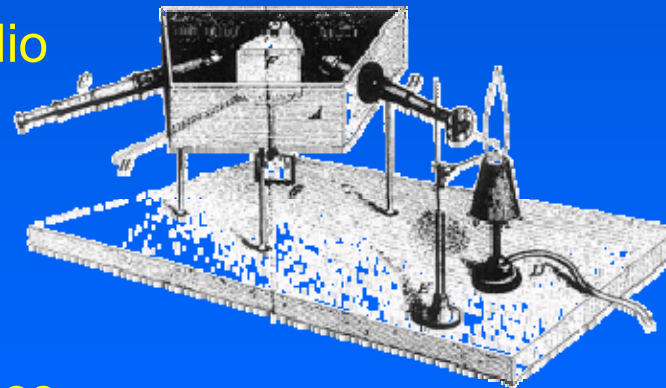
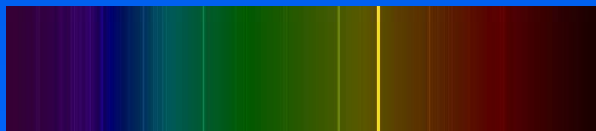
Análisis espectral

hacia 1850



G. Kirchhoff y
R. Bunsen

Espectro de emisión del sodio



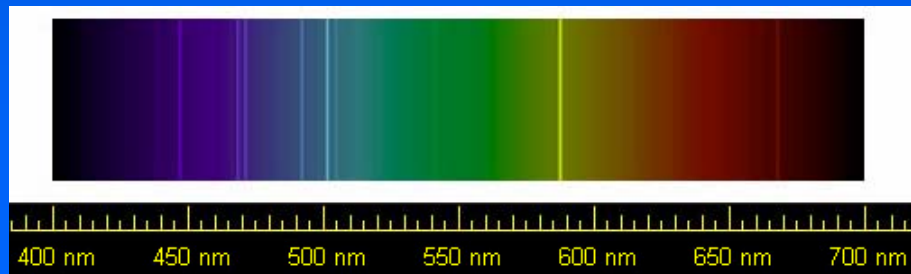
Patrón de líneas característico

Descubrimiento del helio

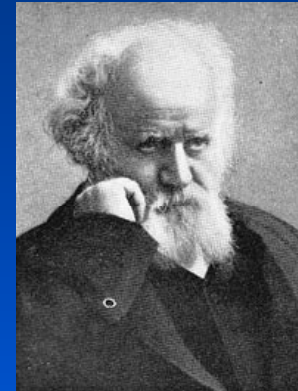
1868



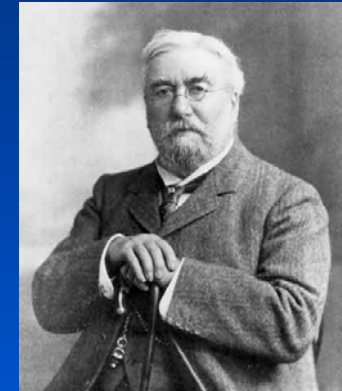
Espectro durante eclipse solar



Líneas características del He



P. J. Janssen



N. Lockyer

- En la Tierra el He es raro y no se aisló hasta 1895

Infrared Mn I laboratory oscillator strengths for the study of late type stars and ultracool dwarfs

R. Blackwell-Whitehead^{1,2}, Y. V. Pavlenko^{3,4}, G. Nave⁵, J. C. Pickering², H. R. A. Jones³,
Y. Lyubchik⁴, and H. Nilsson¹

3. Laboratory oscillator strengths

Table 1 presents the BF s, transition probabilities and oscillator strengths. The oscillator strengths were obtained by combining the BF s with the published radiative lifetimes of Kronfeldt et al. (1985) and Schnabel et al. (1995). The Mn I Ritz wavenumbers in Table 1 are determined from the upper and lower energy level values from the NIST atomic Spectra Database (Ralchenko et al. 2009), which are taken from the term analysis of Catalán et al. (1964). The air wavelengths in Table 1 have been determined with the Edlén (1966) equation, and include the more recent update for the refractive index of air, Eq. (3) in Birch & Downs (1994). All lines measured in this work have a peak signal to noise ratio of more than 100, and the BF uncertainties are dominated by the tungsten lamp calibration uncertainty and the uncertainty in the intensity calibration “cross-over” between the two spectral regions. The uncertainty in the oscillator strength is determined from the BF and lifetime uncertainty using the criteria discussed by Sikström et al. (2002) and follows the NIST guidelines for evaluating and expressing uncertainty (Taylor & Kuyatt 1994).

It can be seen that our oscillator strengths for the transitions

...estrellas de tipo tardío
y enanas ultrafrías

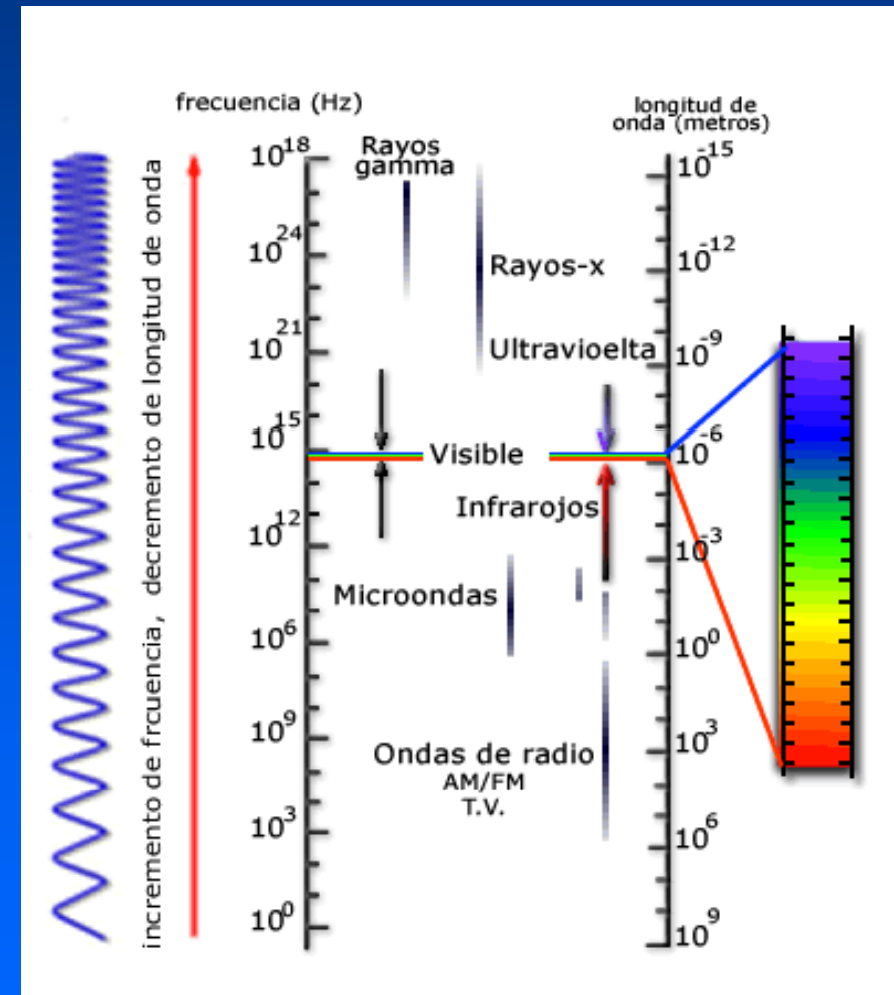
M. A. Catalán

(1894 - 1957)



Espectro electromagnético

- Niveles electrónicos →
- Vibraciones moleculares →
- Rotaciones moleculares →



Nota: $10^3 = 1000$; $10^{-3} = 0,001$

Sistema periodico "astronómico"

Periodic Table of the Elements

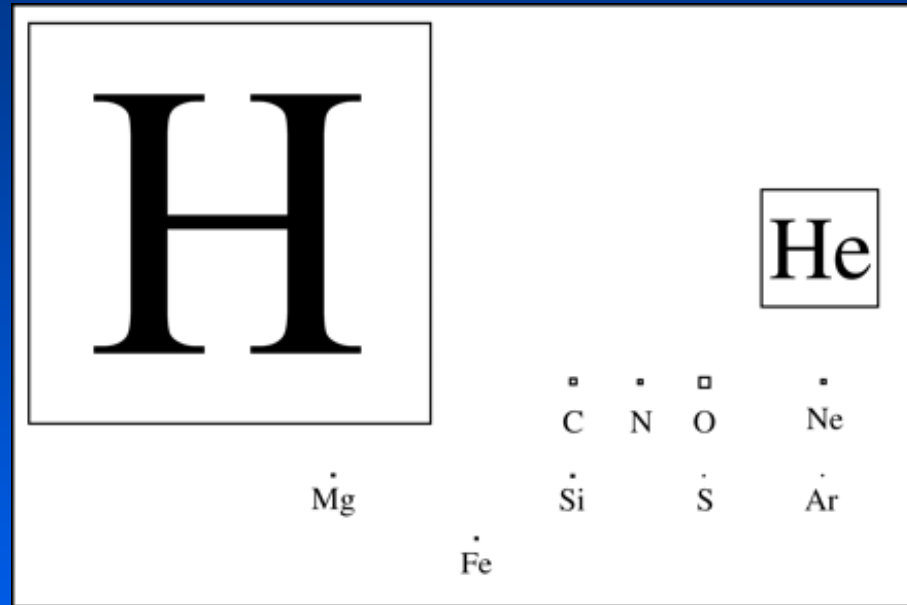
1	IA																O																							
1	H																	He																						
2	Li	IIA																Be																	B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	IIIB										IVB				VB		VIB		VIIB		VII		IB		IIB		Al	Si	P	S	Cl	Ar						
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																						
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																						
6	Cs	Ba	*La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																						
7	Fr	Ra	+Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt	110	111	112	113																											

* Lanthanide Series

58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu

+ Actinide Series

90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

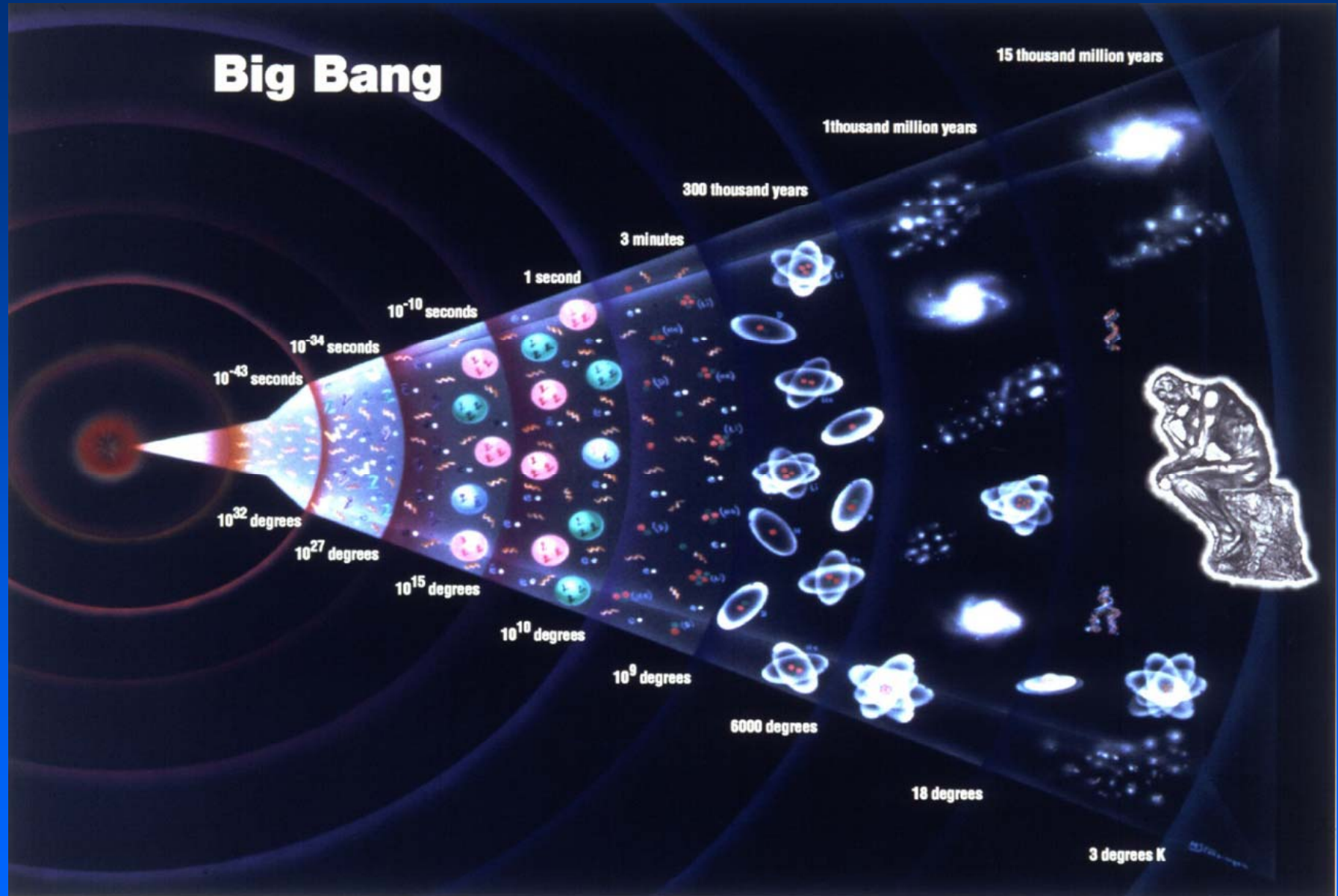


Elementos más abundantes

Origen de los elementos

- Nucleosíntesis primordial
- Nucleosíntesis estelar

Big Bang



Química

Justificación del modelo del Big Bang

■ Expansión del Universo

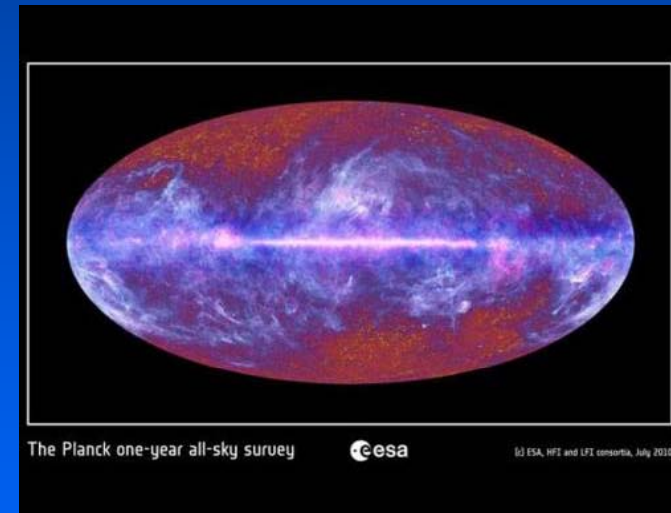
- Corrimiento al rojo
- Constante de Hubble

■ Radiación de fondo

- Microondas 2.7 K (-270,3 °C)
- Muy homogénea

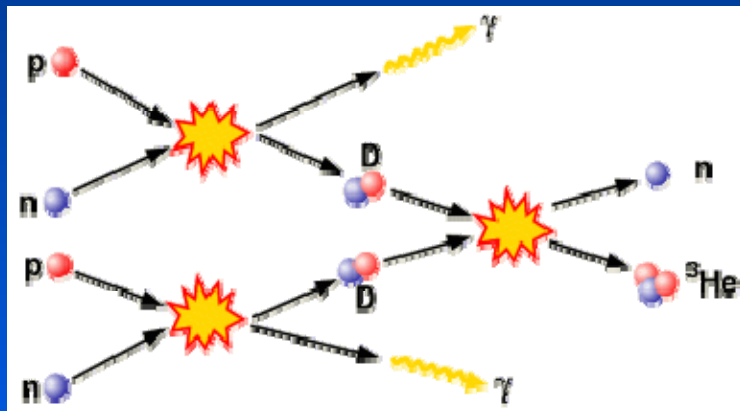
■ Proporción de elementos ligeros

- Nucleosíntesis primordial

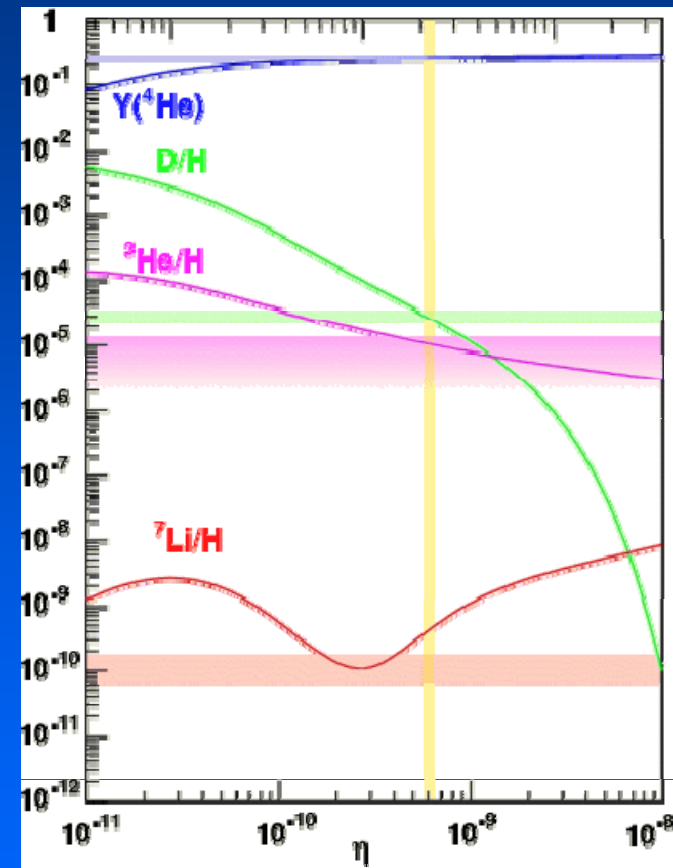


Nucleosíntesis primordial

Ejemplo de reacciones



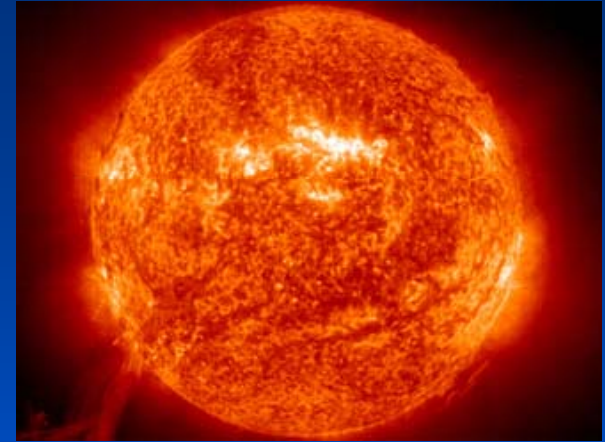
- Solo se forman elementos ligeros: H (D), He, trazas de Li, Be
- Expansión y enfriamiento detienen el proceso



Modelo y observaciones

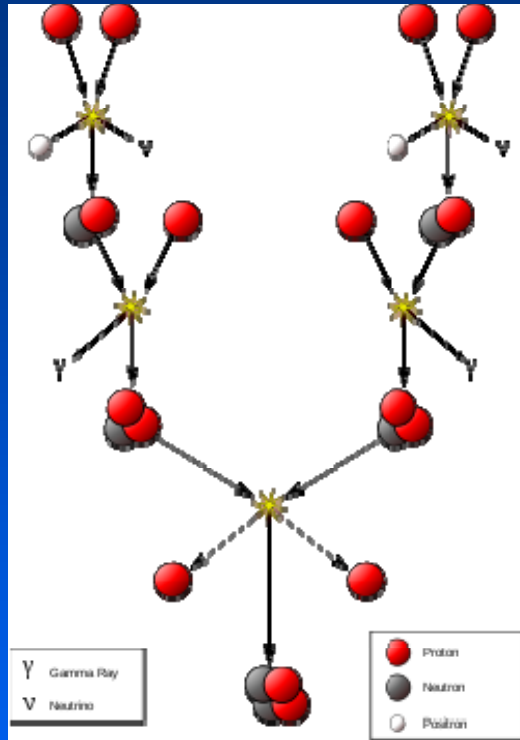
Nucleosíntesis estelar

- Atracción gravitatoria \longleftrightarrow fusión nuclear
- Fusión nuclear: elementos ligeros producen elementos mas pesados
- El proceso continúa en varias fases hasta que se consume el combustible nuclear.
- La primera generación de estrellas tras el Big Bang sólo debió contener inicialmente H y He
- Las generaciones posteriores de estrellas incorporan ya otros átomos (“metales”) desde el principio

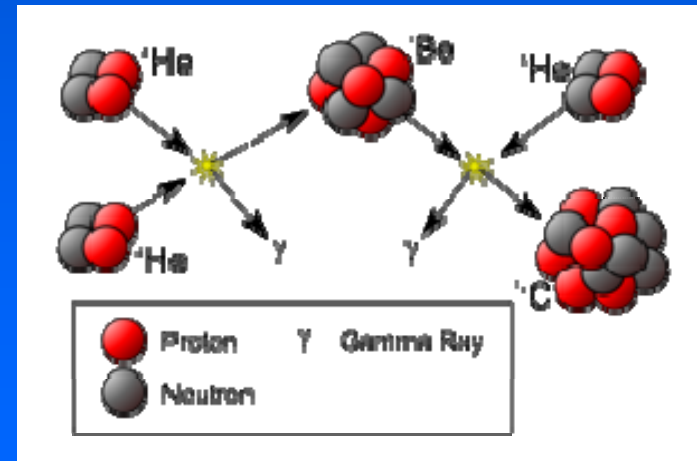


Nota: en astronomía se llaman “metales” a los átomos distintos de H y He

Nucleosíntesis estelar

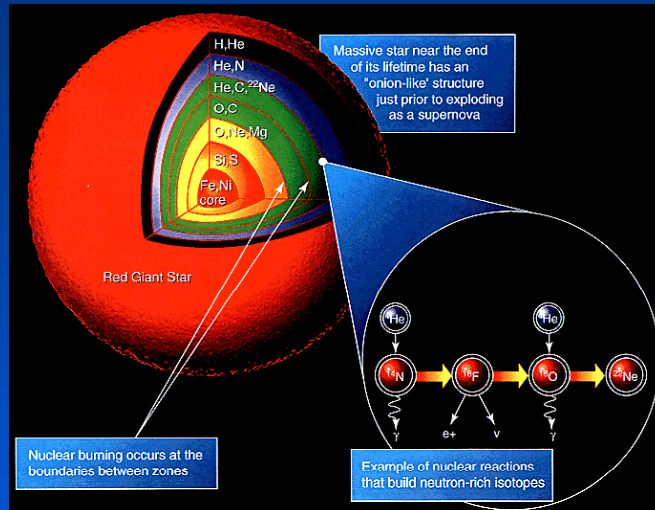


- Cadena protón-protón
 - $H \rightarrow He$



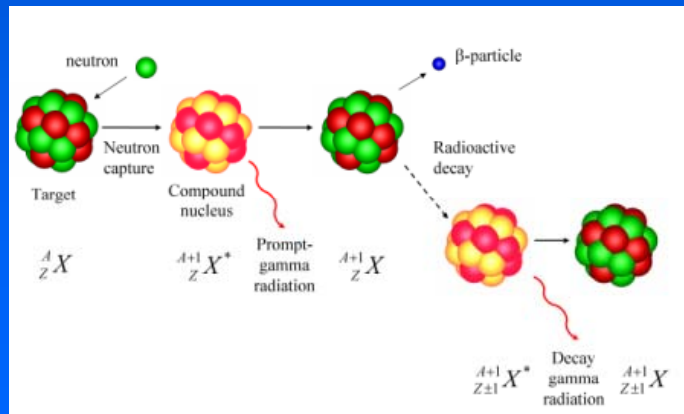
- Cadena triple α
 - $He \rightarrow C$

Nucleosíntesis estelar



Estrella masiva (capas)

- En estrellas grandes, la fusión de elementos cada vez mas pesados da lugar a una estructura en capas
- A partir del hierro la fusión no es efectiva y los elementos se forman por captura de neutrones



- En las explosiones de supernovas se producen flujos muy altos de neutrones que forman muchos elementos pesados

Resumen de nucleosíntesis

H																		He															
Li	Be																	B	C	N	O	F	Ne										
Na	Mg																	Al	Si	P	S	Cl	Ar										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																
Fr	Ra																																
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																	
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																	

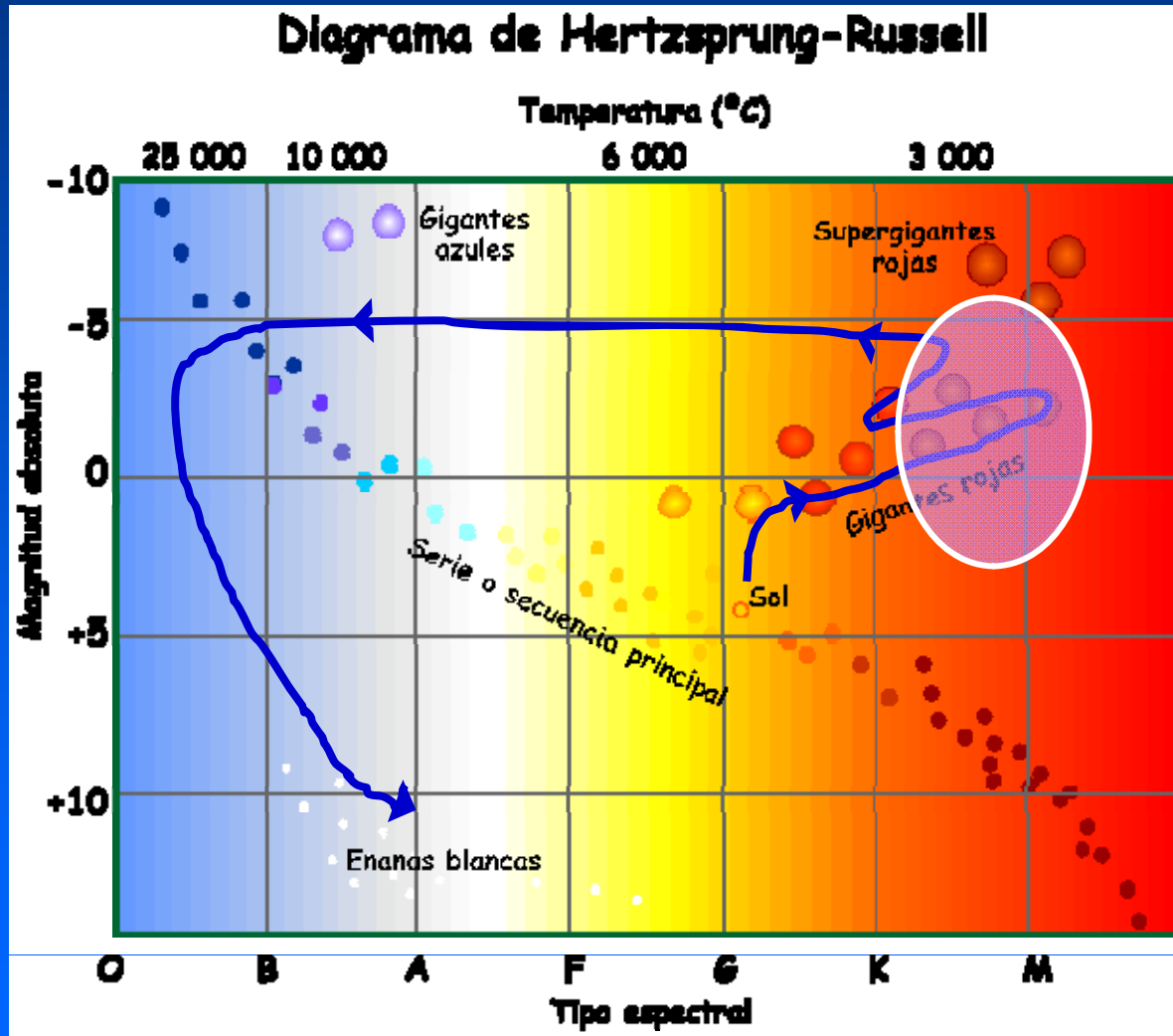
Big Bang
 Supernovae
 Large Stars
 Small Stars
 Cosmic Rays

Producción de moléculas

- Envoltorios de estrellas evolucionadas
- Regiones de formación estelar

Evolución estelar

Estrellas RAG y supergigantes rojas

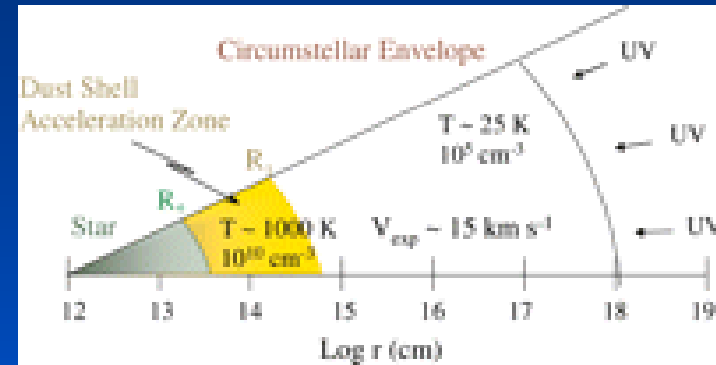


Expulsión de las capas externas (Envoltorio estelar)

Estrellas RAG y supergigantes rojas



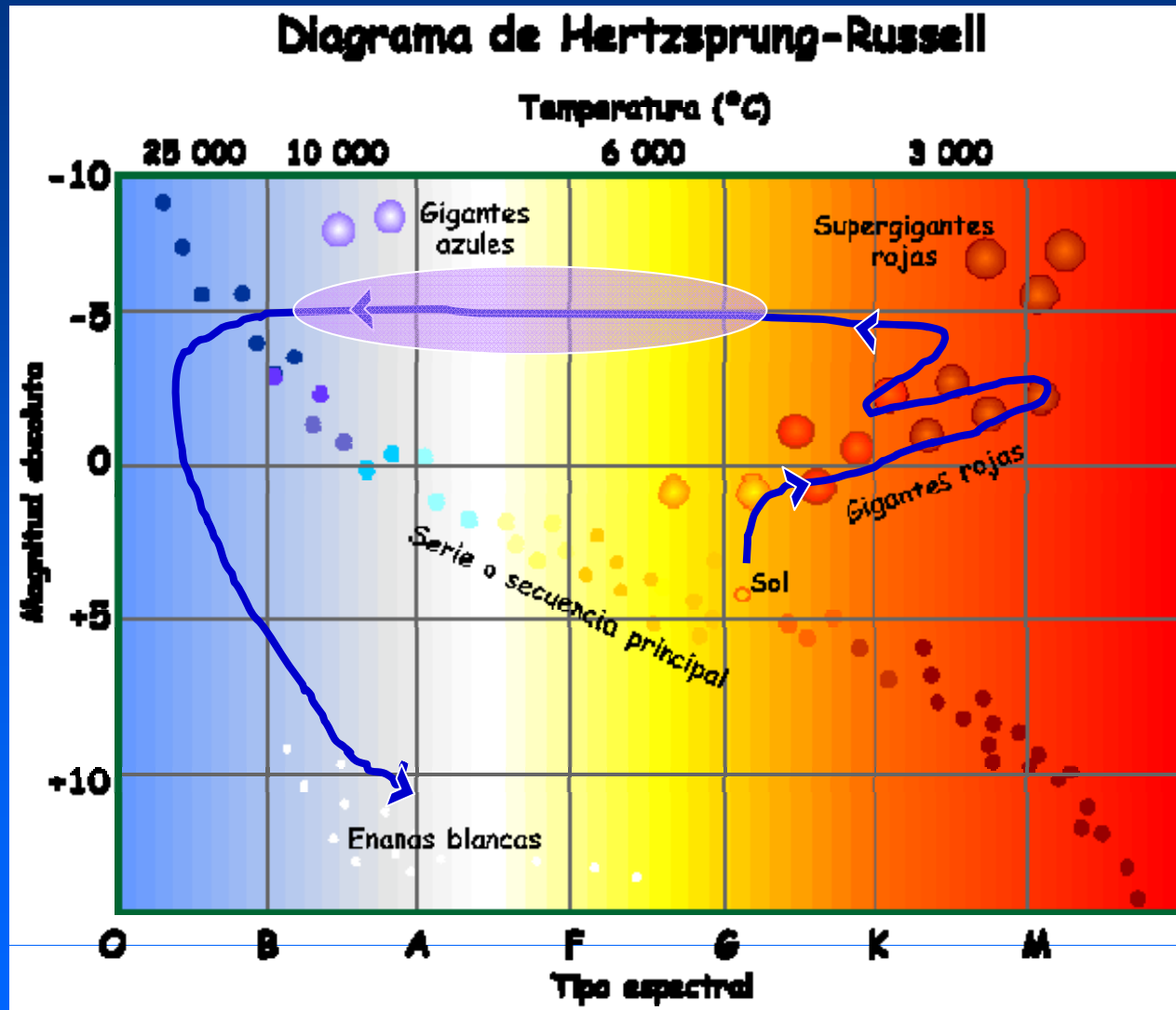
Supergigante roja V838 Mon



Granos de polvo

- Decenas de moléculas identificadas
- Envoltorios enriquecidos en C (mayor riqueza química)
 - CO, CS, CN, HCN, CH₄, C₂H₂, C_nH, HC_nN, NH₃, SiCN, NaCl....
 - Polvo: SiC
- Envoltorios ricos en O
 - CO, SiO, SO, H₂O, SO₂, HCN....
 - Polvo: Silicatos, óxidos

Evolución estelar: nebulosas planetarias



Excitación del
envoltorio
expulsado

Nebulosas planetarias

- La estrella central emite radiación UV que ioniza y excita el envoltorio circundante
- Gas: Aparecen mas radicales y iones
 - CO, CN, OH, CH, HCO⁺, CO⁺, CH⁺, N₂H⁺...
- Sólido
 - Cadenas carbonadas aromáticas y alifáticas

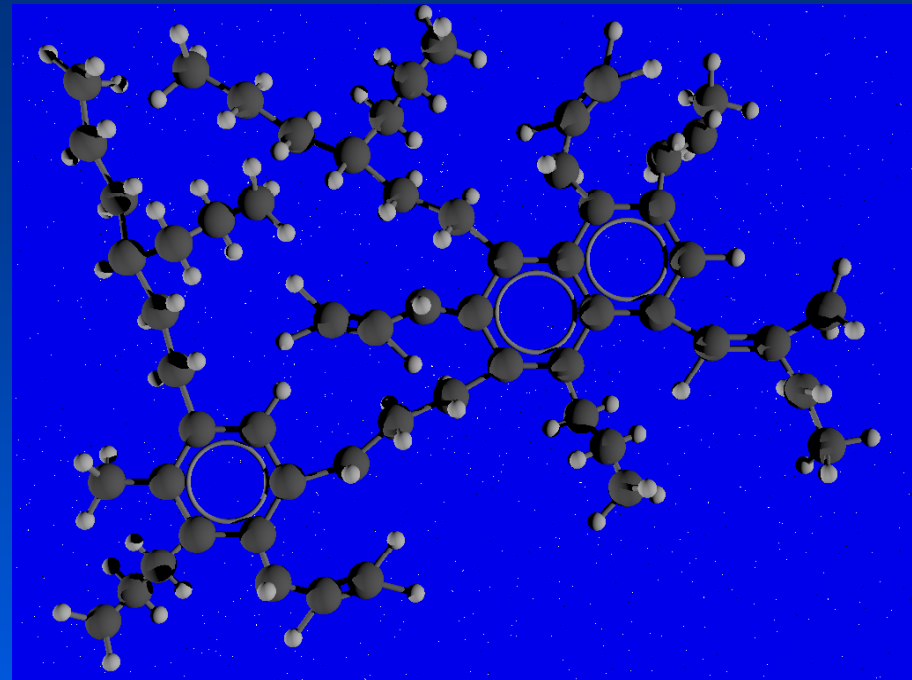


Nebulosa planetaria
“Ojo de gato”

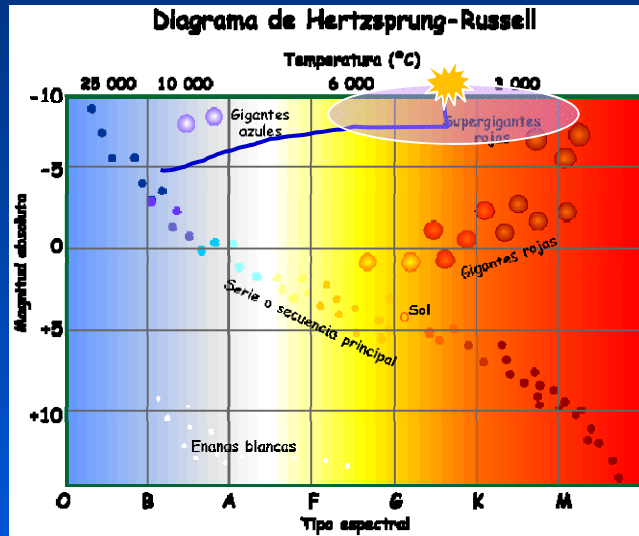
Nota: El nombre “nebulosa planetaria” tiene razones hitóricas. No tienen nada que ver con planetas

Grandes estructuras carbonáceas

- Mas de la mitad del carbono interestelar está en forma macromolecular.
- Principales especies
 - Hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAHs)
 - Carbono amorfo hidrogenado (HAC)
 - Fullerenos, diamantes, grafito ?...
- Son responsables de bandas espectrales entre UV y microondas, pero no siempre fáciles de asignar



Supernovas



Supernova 1987a

- Producción de los elementos mas pesados
- Formación de polvo
- Ondas de choque en el medio interestelar

Regiones de formación estelar

- El material liberado por las estrellas evolucionadas queda en el medio interestelar
- Muchas moléculas se disocian por la intensa radiación UV en este entorno
- Sobreviven especialmente los granos de polvo y las moléculas más grandes
- Se originan nubes tenues de gas y polvo a partir de las cuales se forman nuevas estrellas

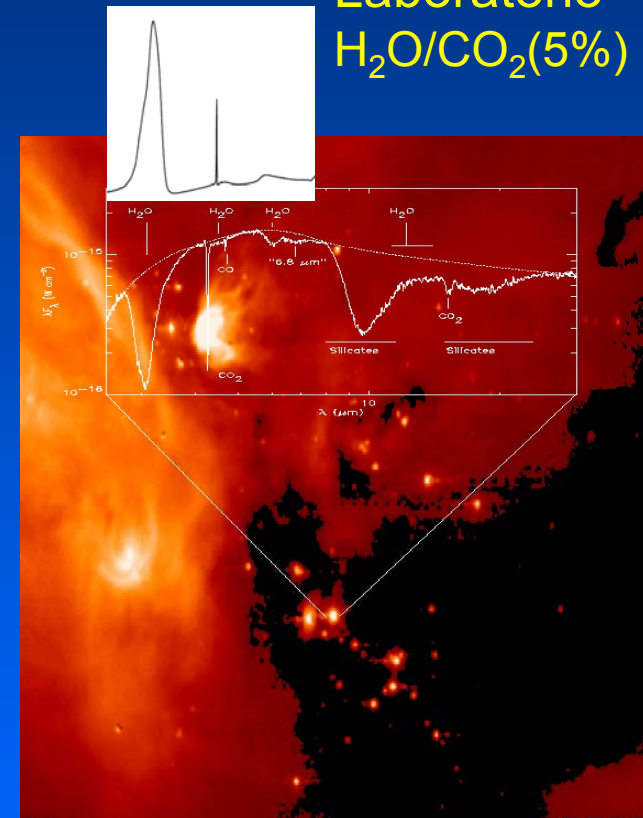
LH95 en la Gran Nube de Magallanes



Nubes moleculares densas

- Densidad “alta” (10^4 - 10^6 cm^{-3}) y temperatura baja (10-50 K)
- Apantallan la radiación UV y permiten la pervivencia de moléculas
- Las moléculas más abundantes son H_2 y CO
 - $(\text{CO}/\text{H}_2) = 0.0001$
- Los granos de polvo (refractarios) se recubren de capas de “hielos” (volátiles)

Laboratorio
 $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2(5\%)$



Espectro IR hacia Elias 29
en ρ Ophiuchi

Nota: en la superficie terrestre la densidad del aire es 10^{19} cm^{-3}

Nubes moleculares densas



Nebulosa "cabeza de caballo" en Orión



Nebulosa del águila (M 16)

Química en nubes moleculares densas

T muy baja → Reacciones sin apenas barrera

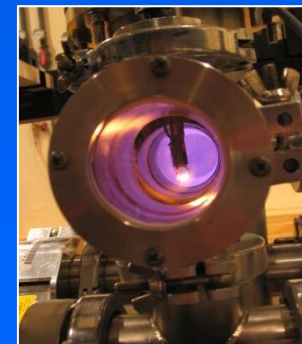
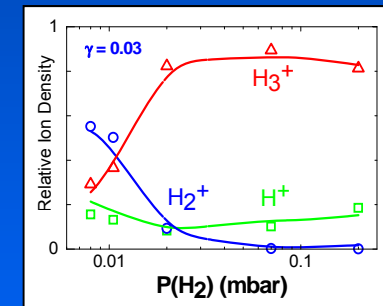
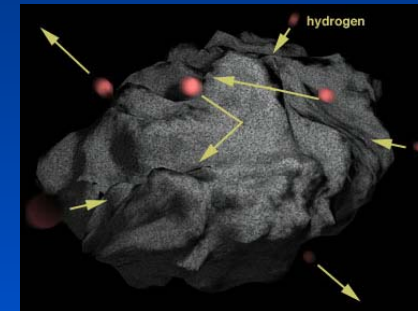
- **Reacciones en la superficie** de los granos : Ej. Síntesis de H₂



- **Reacciones ión molécula**, a partir de H₃⁺



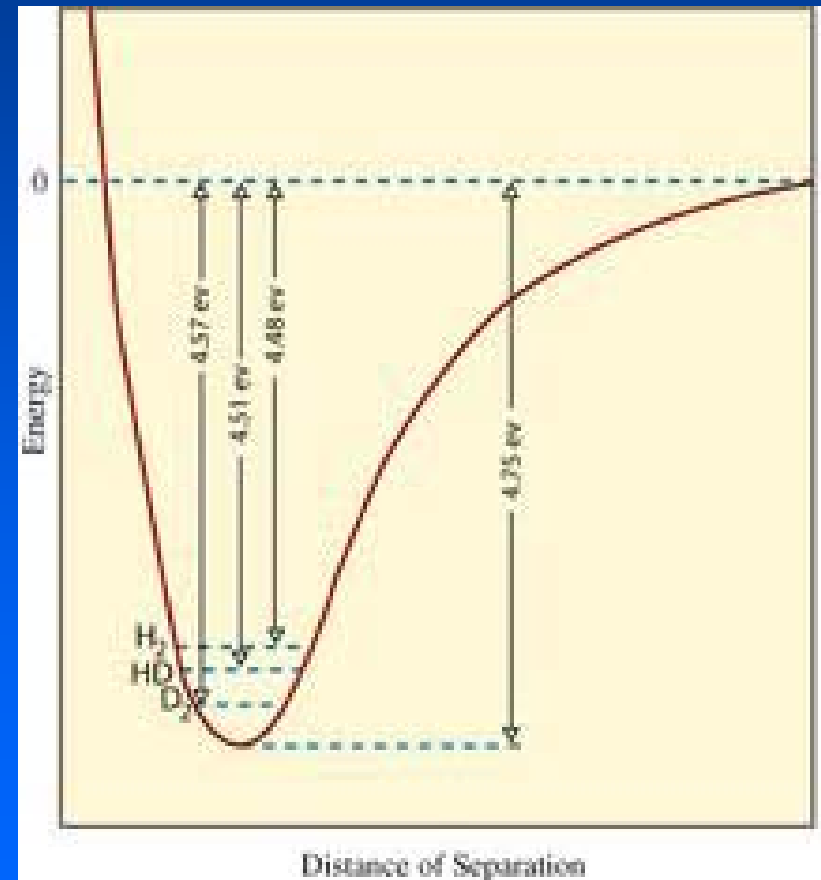
- XH⁺ propaga la cadena de reacciones ion molécula



Laboratorio

Enriquecimiento isotópico

- Cuanto menor es la temperatura de formación de un compuesto mayor es la proporción de isótopos pesados
- El efecto es muy marcado a temperaturas muy bajas y especialmente en la relación D/H
- Las moléculas con isótopos más pesados tienen **energías de punto cero** más bajas



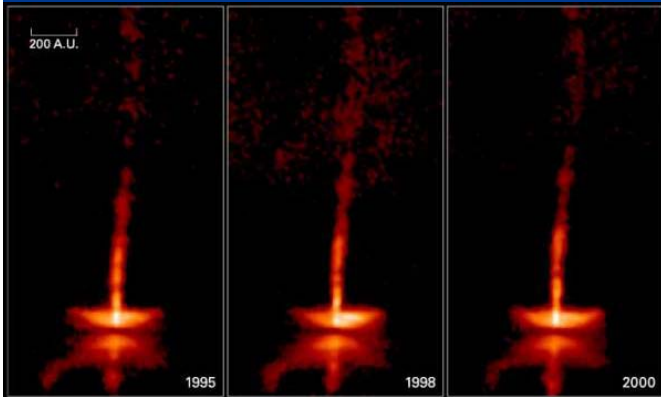
Formación estelar

- Dentro de las nubes densas se forma un núcleo que comienza a colapsar por atracción gravitatoria.
- A medida que el colapso progresa aumentan la densidad y la temperatura hacia el centro del núcleo.
- Se incrementa la complejidad de la química tanto en superficie como en fase gas.
- Las moléculas se van desorbiendo de la superficie de los granos en función de su volatilidad

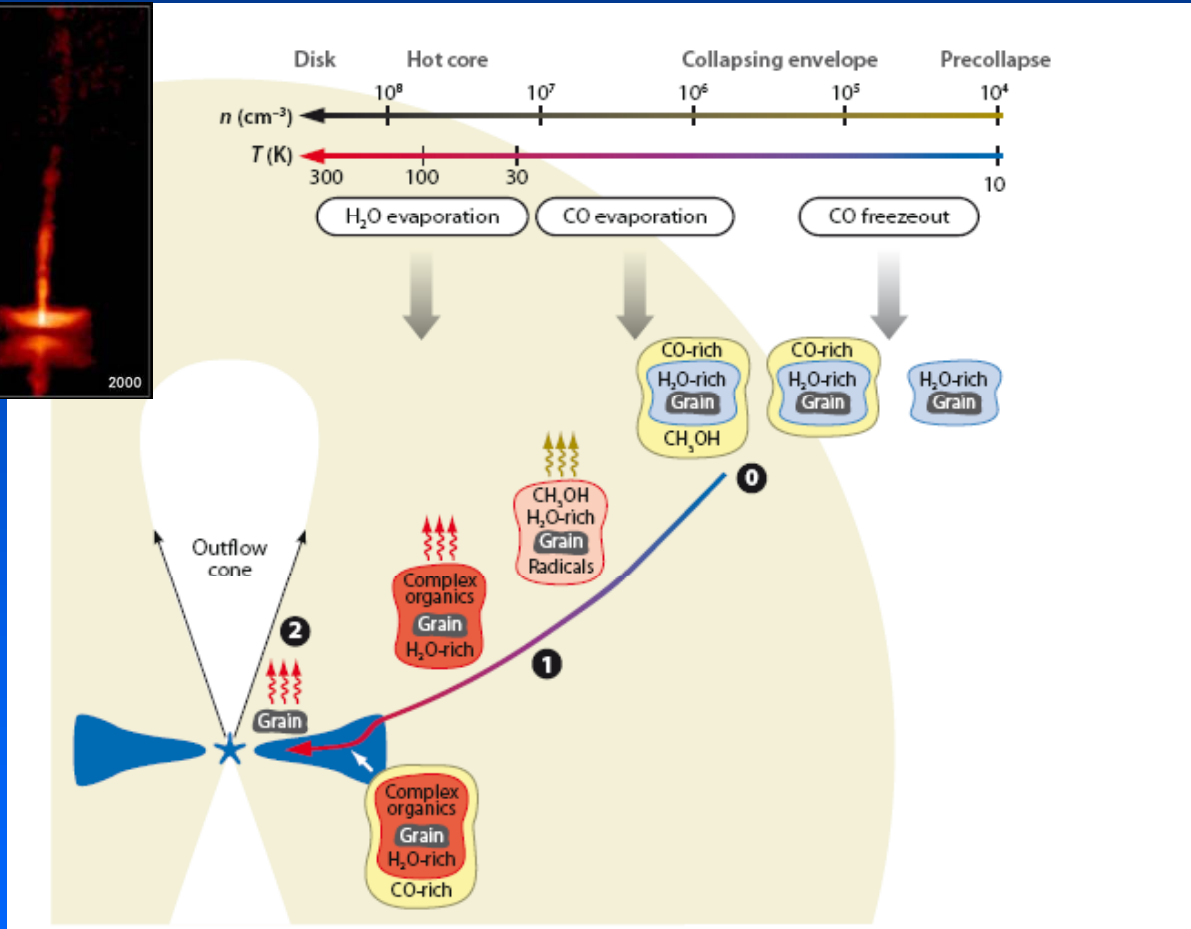
N90 en la pequeña nube de Magallanes



Colapso de un núcleo pre-estelar



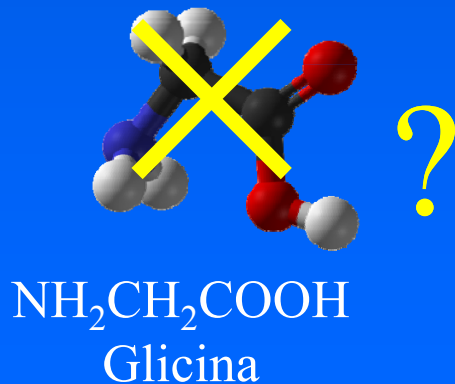
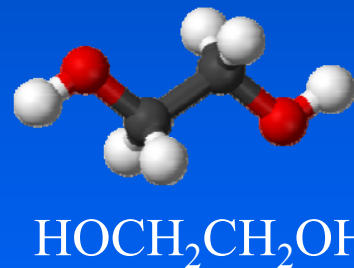
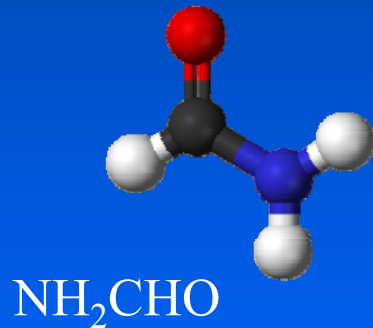
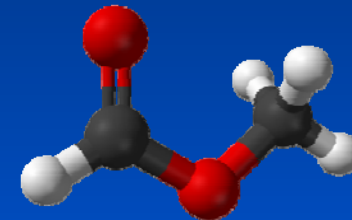
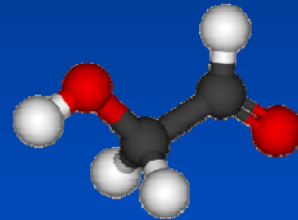
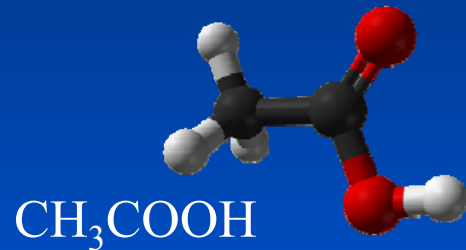
Protoestrella HH30



Moléculas interstelares y cricunestelares

- Se han detectado unas 150 moléculas, entre ellas:
 - Moléculas pequeñas
 H_2 , CO , CO_2 , HF , HCN , NH_3 , CH_4 ...
 - Radicales
 OH , CN , CH , NH , CH_2 , C_nH ...
 - Iones
 H_3^+ , HCO^+ , N_2H^+ , OH^+ , CN^- , OCN^- , C_4H^- ...
 - “Moléculas complejas” (COMs) de más de seis átomos
 CH_3OH , C_2H_2 , $HCOOCH_3$, $HOCH_2CHO$, CH_3CONH_2 ...

Ejemplos de moléculas complejas en zonas de colapso protoestelar ("hot core")



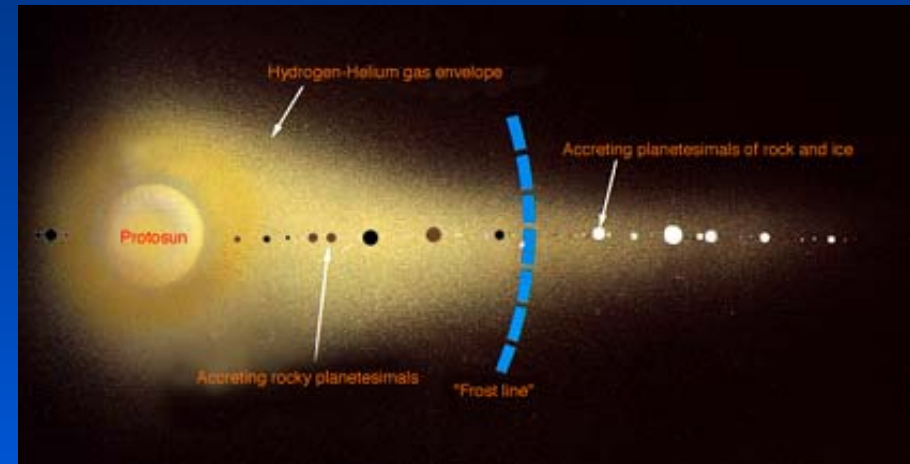
No se ha confirmado la detección de glicina, ni de ningún otro aminoácido en el medio interestelar

Formación del Sistema Solar

Línea del hielo
~ 3 UA, 150 K

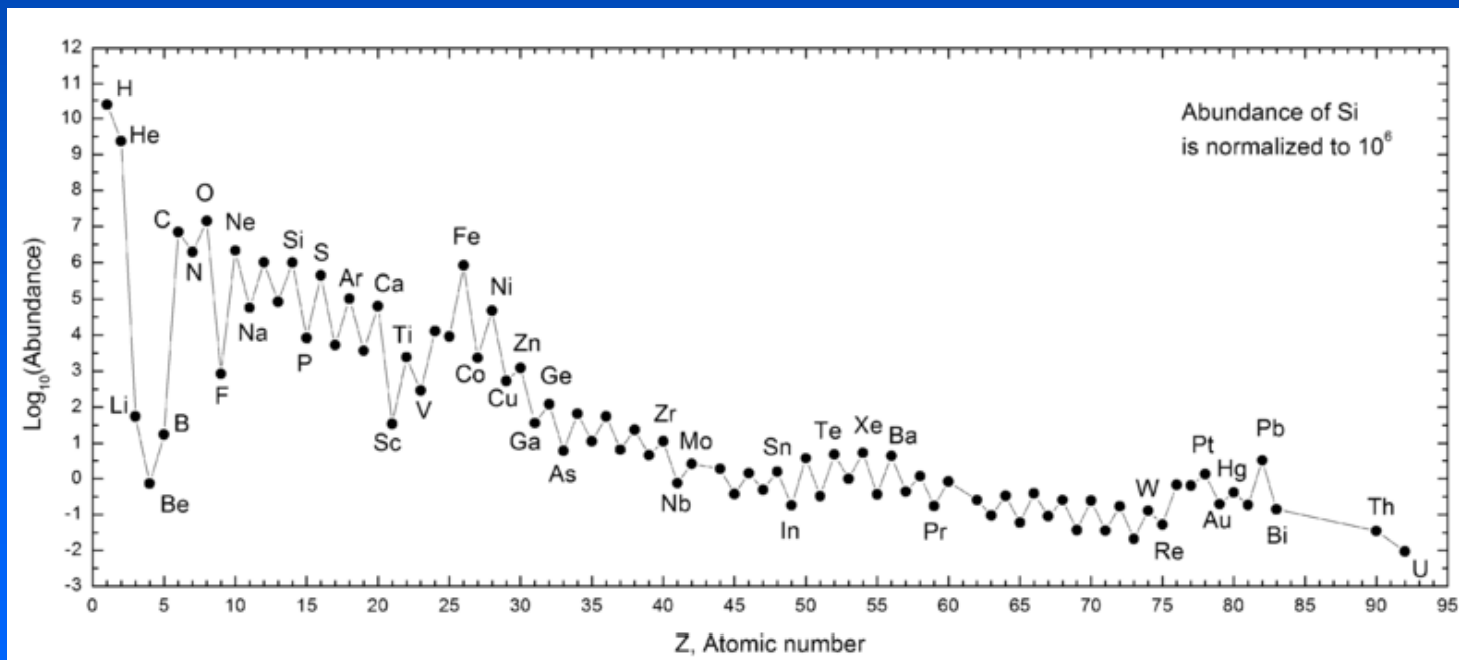
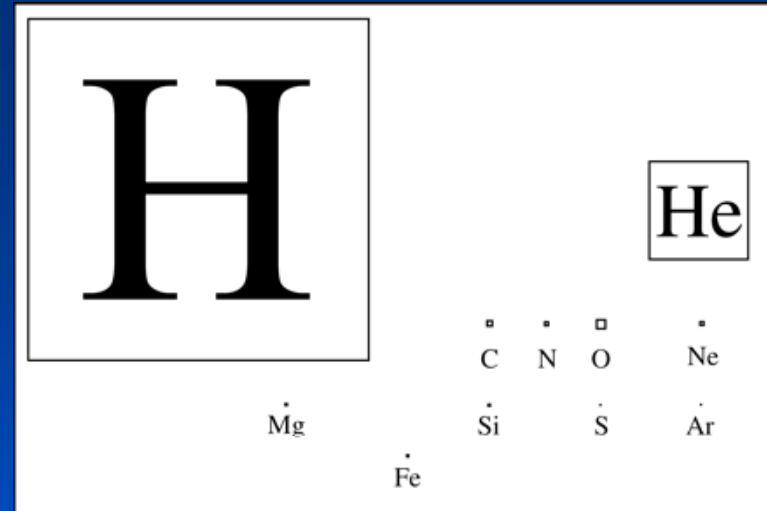


- Colapso parcial de una nube de gas y polvo (“nebulosa solar”)
- Hace unos 4600 millones de años
- Casi toda la masa (99,9%) se concentró en el Sol.
- Material original de múltiples estrellas previas
- El 98% de la masa corresponde a los elementos más ligeros : H y He

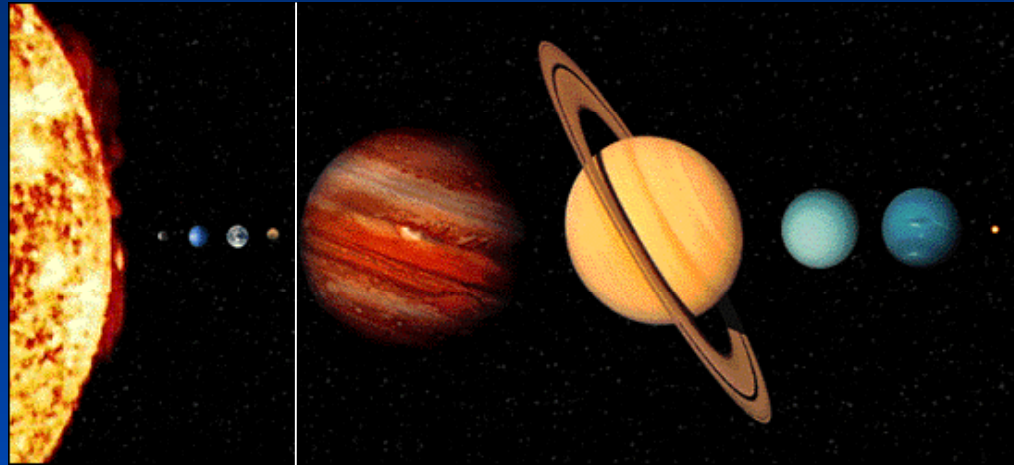


Nota : Unidad astronómica (UA) = $1,5 \times 10^8$ km
(Distancia media Tierra-Sol)

Abundancia de los elementos en el Sistema Solar



Planetas



■ Planetas rocosos

- Formados entre el Sol y la línea del hielo
- Ricos en metales (Fe, Mg, Al) y silicatos. Pequeño tamaño
- Incapaces de retener H_2 o He. **Atmósferas tenues**

■ Planetas gaseosos

- Formados más allá de la línea del hielo
- Condensación de especies volátiles. Tamaño grande
- **Grandes atmósferas de H_2 y He**

Línea del hielo

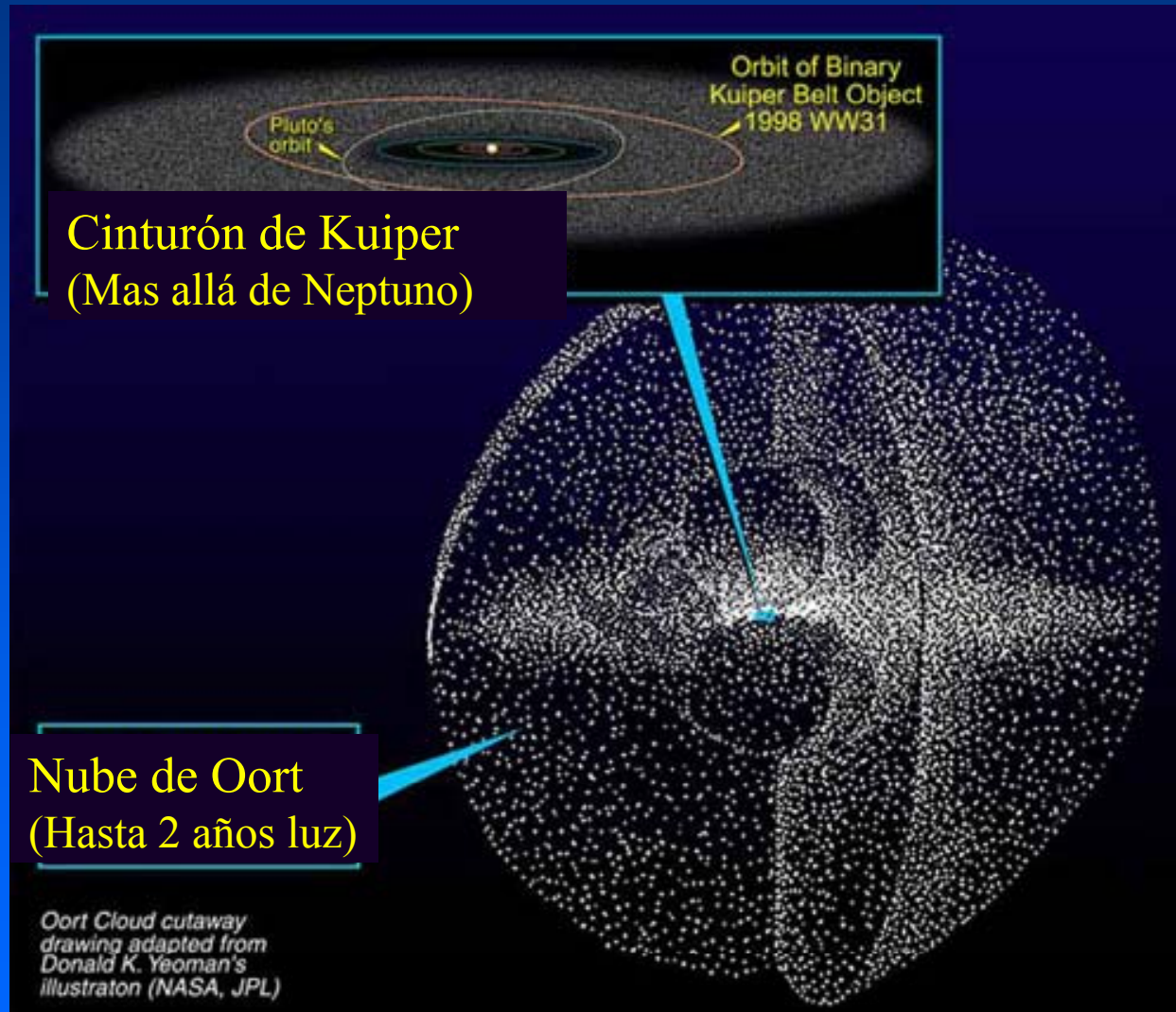
Meteoritos

- La mayoría (86 %) de los meteoritos son rocas primitivas (condritas) compuestas por fragmentos indiferenciados que no llegaron a formar planetas
- Las condritas provienen del cinturón de asteroides entre Marte y Jupiter
- Las condritas carbonáceas contienen abundantes compuestos orgánicos
- Se encuentran entre los objetos mas antiguos del Sistema Solar (> 4500 millones de años)
- Las mas antiguas (tipo CI) tienen una composición elemental muy similar a la del SoL



Meteorito Gao

Sistema Solar



Cometas

- Pequeños cuerpos de las regiones exteriores del Sistema Solar
 - Período Largo (nube de Oort)
 - Período corto (cinturón de Kuiper)
- Objetos muy antiguos en el Sistema Solar
- Formados por materia rocosa y hielos de sustancias volátiles.
- La composición de los hielos es similar a la de los hielos interestelares (H_2O , CO_2 , CO ...)
- También contienen materia orgánica



Cometa Halley

Superficie de los planetas rocosos

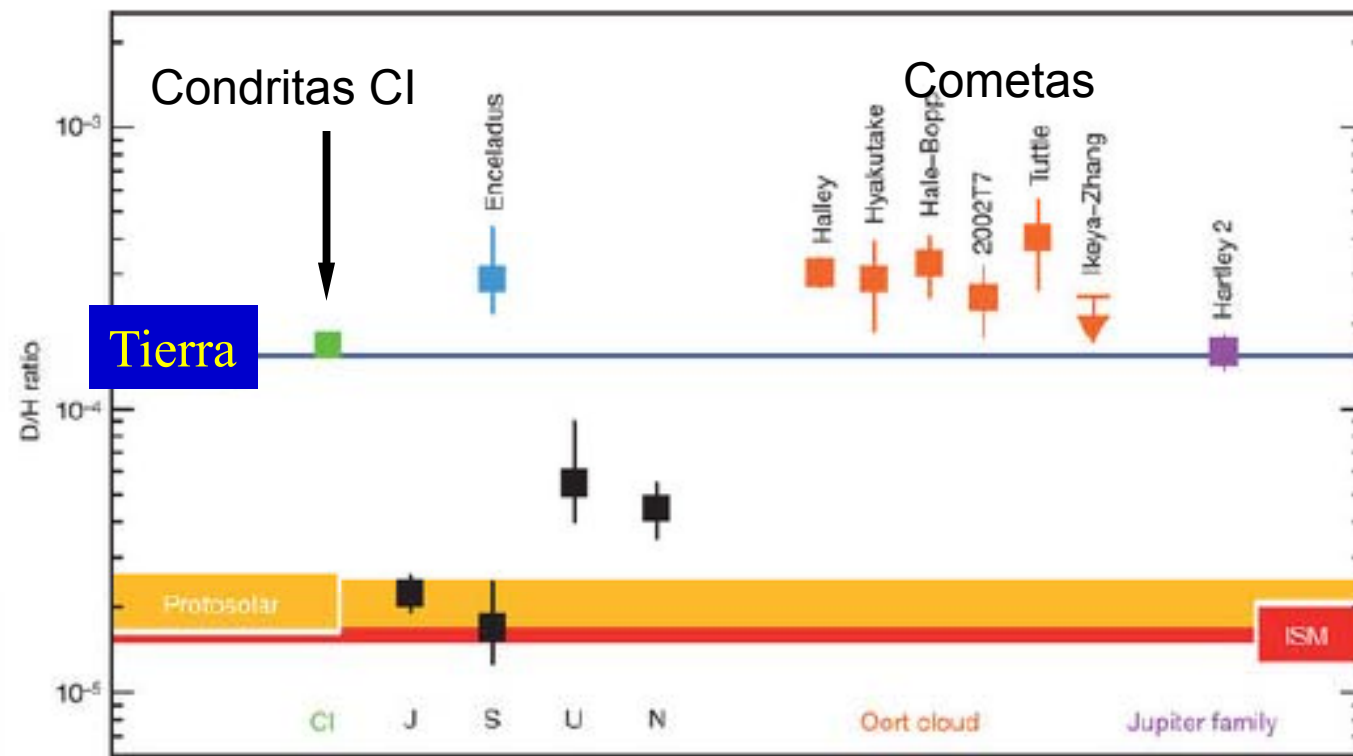
	Presión bar	Temp. °C	Principales componentes atmosféricos	Observaciones
Venus	92	460	CO ₂ (96 %) N ₂ (3 %)	Trazas de agua en fase vapor
Tierra	1	18	N ₂ (78 %) O ₂ (21 %)	Agua líquida en superficie
Marte	0.006	-60	CO ₂ (96 %) N ₂ (3 %)	Casquetes de hielo polares



Origen del agua en la Tierra

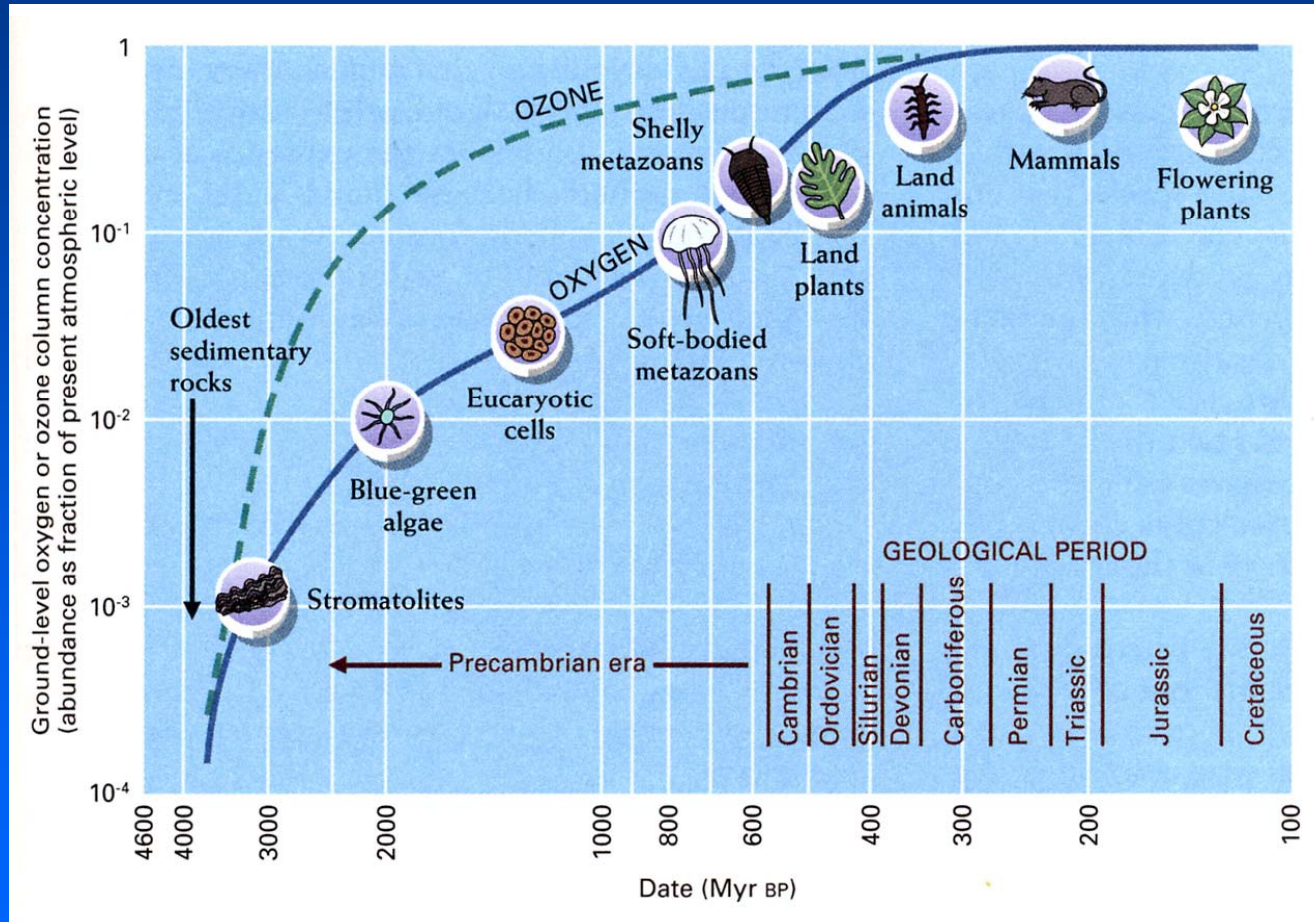
- Hace 3800-4200 millones de años, la Tierra sufrió una fase de bombardeo intenso por parte de objetos de regiones exteriores del Sistema Solar que pudieron aportar H₂O

Cociente D/H



P. Hartogh et al. Nature, 2011

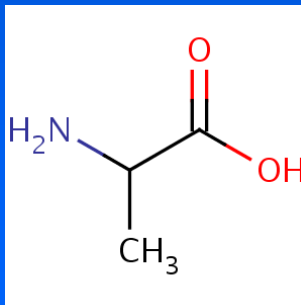
Evolución del oxígeno en la atmósfera terrestre



La mayor parte del O_2 se produjo por fotosíntesis

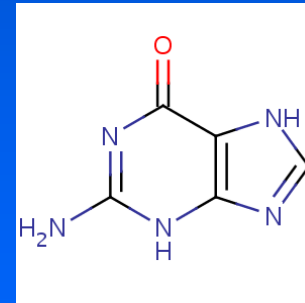
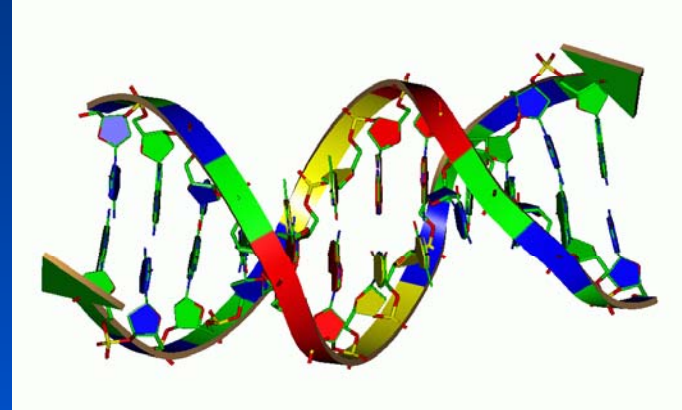
Biomoléculas

Proteínas
(mioglobina)



Aninoácidos
(alanina)

Ácidos nucleicos



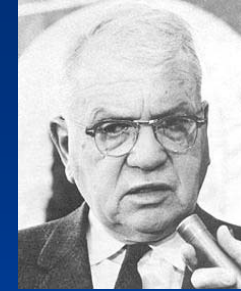
Bases nitrogenadas
(guanina)

Experimento de Miller-Urey

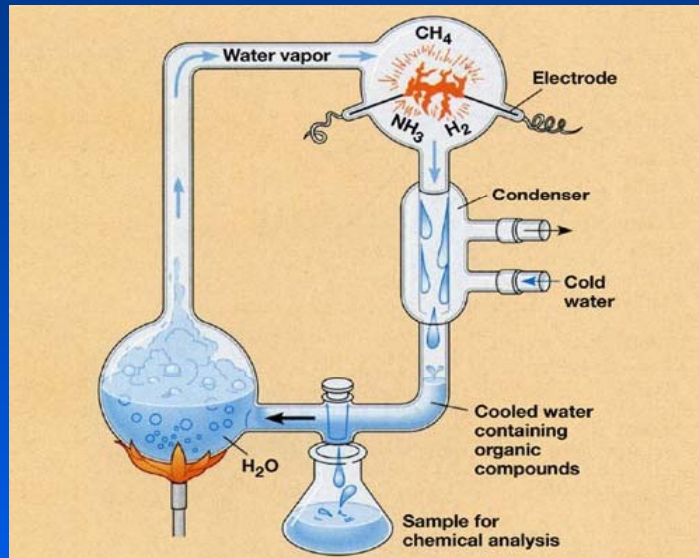
Science, 1953



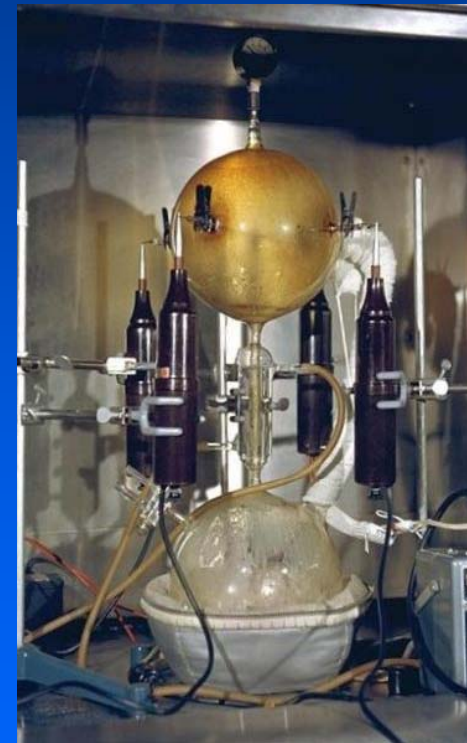
S. Miller



H. Urey



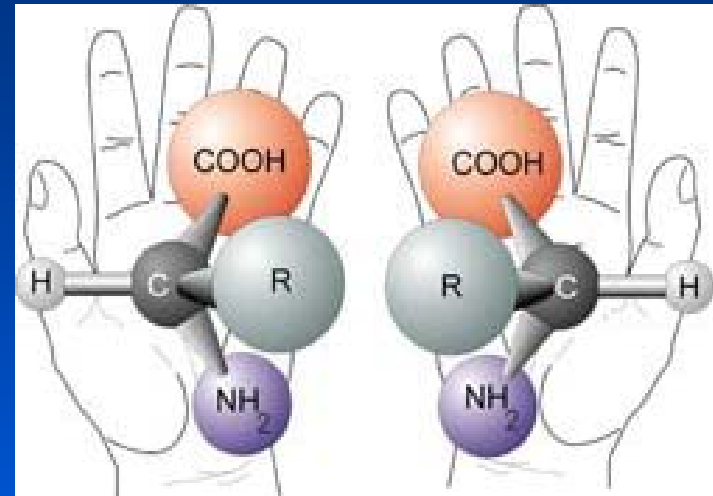
↓
Azúcares, lípidos,
aminoácidos



Experimentos posteriores con otros precursores (HCN) formaron también bases nitrogenadas como la adenina (J. Oró, 1961)

Aminoácidos y quiralidad

- Las proteínas están formadas por combinaciones de solo 22 aminoácidos distintos
- Salvo la glicina (el más sencillo) estos aminoácidos son quirales
- Las moléculas quirales tienen dos variedades L y D que son como imágenes especulares y no se pueden superponer
- En las síntesis de laboratorio se obtiene normalmente una mezcla equimolecular de L y D
- Los aminoácidos fabricados por los seres vivos son de la variedad L



Aminoácidos en meteoritos y cometas

- Gran número de compuestos orgánicos incluidos bases nitrogenadas y aminoácidos
- Mezclas de aminoácidos L y D, con ligero exceso de L
- Relaciones isotópicas de $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ y $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ mayores que las terrestres



Meteorito de Murchinson
1969



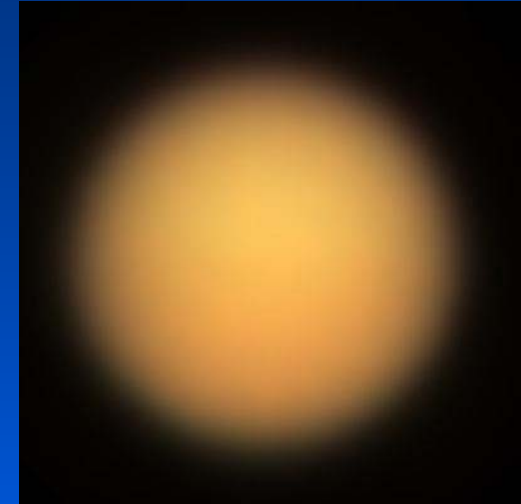
Cometa Wild2
("Stardust" 2004)

- Identificada glicina en fragmentos recogidos del cometa Wild2
- La relación isotópica $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ distinta a la de la Tierra y similar a la del meteorito Murchinson

Probable formación extraterrestre de aminoácidos

Titán

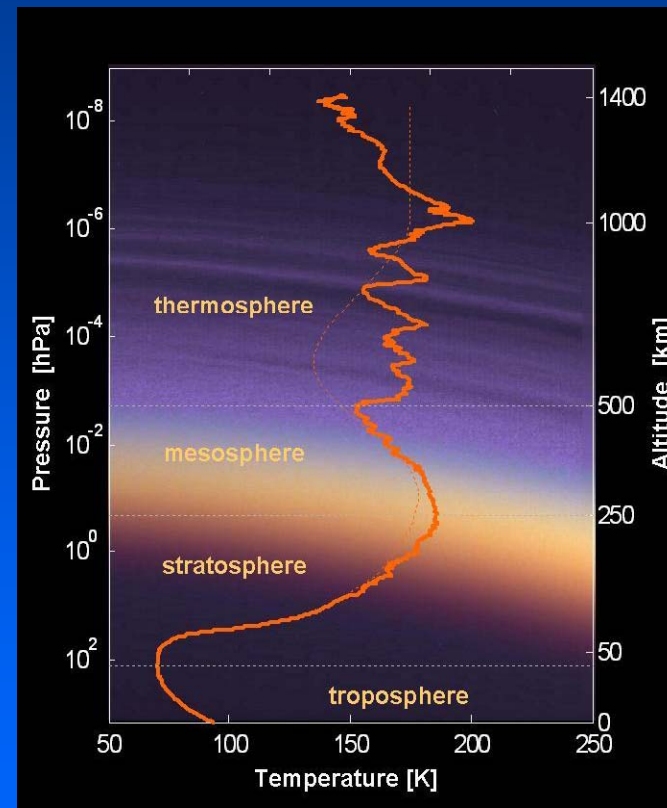
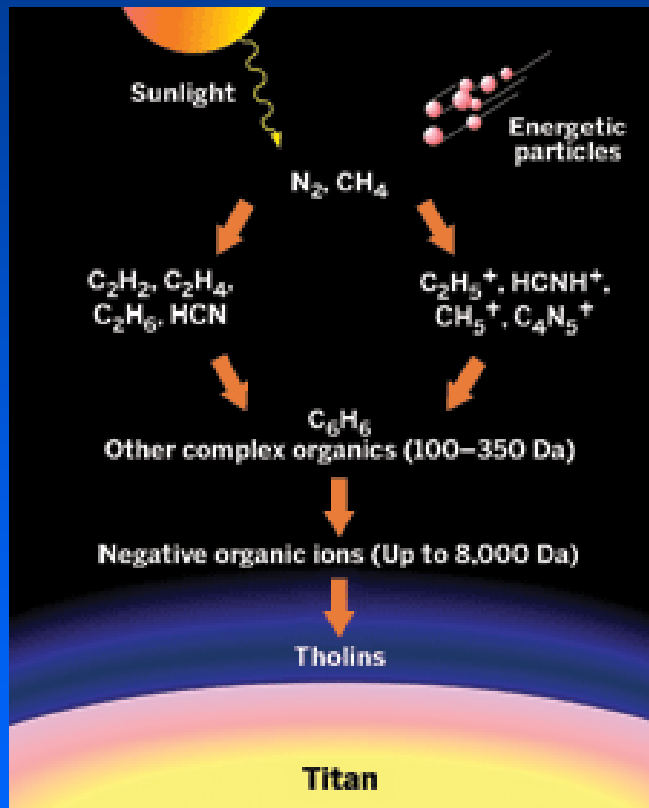
- Es la mayor luna de Saturno
- Distancia al Sol : 9,54 UA ($1,43 \times 10^9$ km)
- Atmósfera en la superficie
 - $P = 1,5$ bar ; $T = -179$ °C
 - $N_2 = 95\%$; $CH_4 = 5\%$
- Envuelto en una niebla anaranjada de derivados de nitrógeno y metano
- Se producen lluvias de metano



- Paisaje de Titán (guijarros de hielo en la niebla) desde la sonda Huygens, tomado en 2005
- La sonda Huygens es la nave más lejana “aterrizada” por el hombre

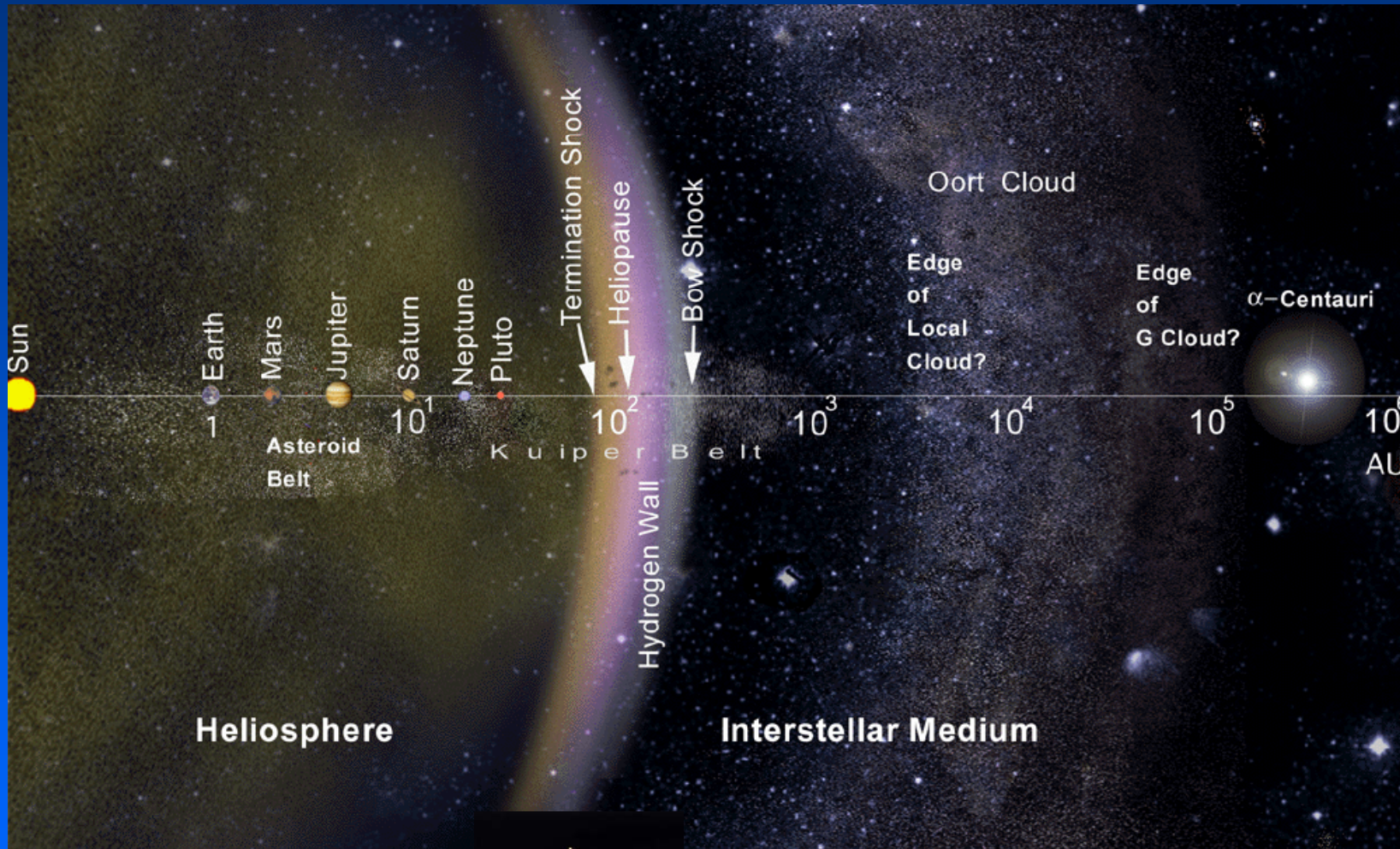
Química en la atmósfera de Titán

- La fotoquímica atmosférica produce polímeros de carbono y nitrógeno



Titán es la mayor fábrica abiótica de compuestos orgánicos conocida en el Sistema Solar

Los Confines del Sistema Solar



Voyager 1

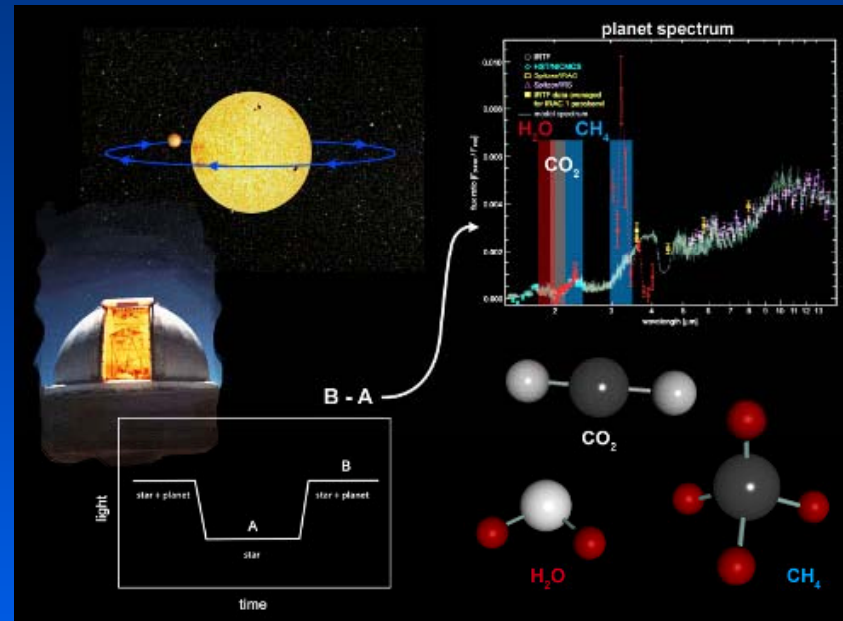
Exoplanetas

- Desde mediados de los 90 se han detectado unos 800 planetas fuera del Sistema Solar mediante variaciones en el movimiento o en la luminosidad de estrellas. En algún caso se ha podido tomar imágenes
- La mayoría son gigantes gaseosos (tipo Júpiter o Neptuno) cercanos a estrellas
- Recientemente se han detectado también planetas rocosos.
- **Existe un gran interés en encontrar planetas rocosos en la zona de habitabilidad** (posible agua líquida)



Exoplaneta 2M1207b orbitando a una enana marrón (VLT, 2004)

Atmósferas de exoplanetas



- Existen muy pocos datos. A partir de espectros IR de transmisión se han detectado indicios de H₂O, CO₂ y CH₄ en las atmósferas de gigantes gaseosos extrasolares
- No es posible aún ver atmósferas en exoplanetas rocosos

FIN