

UNIVERSIDAD DE SONORA  
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN FÍSICA

137325

**"Química Primordial en un Modelo No-Estándar  
del Big Bang"**



**TESIS**

**Que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias  
(Física)**

Presenta:

*L.F. Julio César Campos García*

71070-2

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

## **AGRADECIMIENTOS**

**Agradezco a mi director y codirector de tesis, el Dr. Anton Lipovka y el Dr. Julio César Saucedo Morales, respectivamente, por su valiosa colaboración para la realización del presente trabajo.**

**A los miembros del Comité Revisor de Tesis: Dr. Raúl Riera Aroche y MC. Angel Coronel Beltrán.**

**Agradezco a la Universidad de Sonora y al Centro de Investigación en Física por su apoyo económico para poder asistir a los Congresos Nacionales durante el tiempo en que desarrolle el programa de maestría.**

**Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico brindado durante el período de dos años, tiempo suficiente para llevar a cabo el Programa de Maestría en Ciencias (Física).**

## Resumen

En este trabajo se hace un estudio detallado de la química primordial (el término química primordial se refiere a la química de los elementos primarios que surgieron después de la gran explosión) en un universo descrito, esencialmente, dentro del contexto de la teoría del Big Bang. Se explora además, la relación entre dicha formación molecular con la formación de los primeros objetos. Para este estudio de formación en épocas tempranas en la vida del universo, se llevan a cabo cálculos, suponiendo, tanto el modelo estándar, como uno no estándar del Big Bang.

Se toman en consideración no sólo a las moléculas primordiales de elementos ligeros tales como el  $H$ ,  $D$ ,  $He$  y  $Li$ , sino además, a moléculas formadas por elementos primigenios como el carbono, nitrógeno y oxígeno. Esto último, debido a los resultados observacionales de los satélites Boomerang y Maxima, que sugieren que son plausibles, modelos no estándar del Big Bang. De acuerdo con dichos modelos, es posible que existan abundancias primarias no despreciables de elementos pesados tales como el  $C$ ,  $N$  y  $O$ . Estas abundancias son adimensionales y se definen en el capítulo 4, ecuación 39 de este trabajo.

A partir del modelo no estándar, se considera la formación de moléculas en épocas pregalácticas con corrimientos al rojo  $z$  en el intervalo  $10 < z < 400$ , con  $z = (\lambda_{obs} - \lambda_{rep})/\lambda_{rep} = \Delta\lambda/\lambda_{rep}$ , donde  $\lambda_{obs}$  es la longitud de onda medida por un observador fuera de la fuente y  $\lambda_{rep}$  es la longitud de onda detectada en un marco en reposo respecto a la fuente que emite. En el cálculo de la abundancia del carbono y oxígeno, se predicen abundancias significativas de dichas moléculas. Se encuentra además, que la abundancia relativa de la molécula de  $CH$  basada en carbono primordial, debe alcanzar un valor superior a  $10^{-14}$ , mientras que las abundancias de moléculas basadas



en oxígeno primordial son pequeñas para el gas homogéneo.

En lo que respecta a la investigación de la química primordial en el contexto de los primeros objetos, se discute la influencia de las moléculas primordiales en la evolución del universo en épocas con corrimiento al rojo de  $10 < z < 300$ .

Se estiman abundancias moleculares en protoobjetos, bajo diferentes circunstancias, y se discuten los cambios posibles en su evolución.

Suponiendo abundancias relativas de hidrógeno, oxígeno y carbono iguales a  $10^{-9} - 10^{-10}$ , se obtienen profundidades ópticas observables ( $\tau \cong 5 \times 10^{-3}$ ) (donde la profundidad óptica para un protoobjeto de tamaño  $L$  esta dada por  $\tau_\nu(L) = \int \alpha_\nu(x) dx = \alpha_\nu L$ , con  $\alpha_\nu$  como el coeficiente de absorción) para las líneas de moléculas primordiales, debidas a la luminiscencia y dispersión de la radiación de fondo (CMBR), por moléculas de protoobjetos moviéndose con velocidades peculiares  $v/c \cong 10^{-3} - 10^{-6}$ , a altos corrimientos, donde  $v$  es la velocidad de los protoobjetos y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío.

El presente trabajo tiene como objetivo, realizar un estudio detallado sobre la química primordial en el universo mediante modelos estándar y no estándar de nucleosíntesis del Big Bang. Para realizar este trabajo, es necesario recapitular el contenido del mismo de una manera sistemática. Iniciamos el capítulo 1 con la introducción general del trabajo. Esta introducción está compuesta por cuatro secciones. La sección 1 trata sobre la formación de los primeros átomos (nucleosíntesis) y moléculas, así como las épocas más importantes según el modelo de SBBN, para tener una idea más clara de lo que aconteció en los primeros minutos de la gran explosión. Los procesos de formación de estructura en el Universo dependen primordialmente de cómo se efectuaron los primeros procesos después de la gran explosión. El capítulo 2, describe los procesos básicos de formación y destrucción de las moléculas

en reacciones químicas fundamentales en la red de reacciones que aquí se presentan. El capítulo 3 contiene la cinética molecular, donde se proporcionan en detalle los juegos de reacciones en la fase gaseosa (elementos ligeros), y para moléculas de los átomos pesados ( $C, O$ ) en el caso de modelos NBBN. También se describe un modelo mínimo para el sistema total de reacciones. También trata sobre los parámetros cosmológicos del Universo, es decir; se describen los parámetros para el problema en consideración, los cuales son:  $H_0$ ,  $\Omega$ ,  $\Omega_b$  (constante de Hubble, parámetro de densidad y densidad bariónica, respectivamente) en diferentes modelos. También se describen los parámetros que dependen de la evolución, tales como: La temperatura cinética ( $T_g$ ), la temperatura de la radiación ( $T_r$ ), y las funciones de enfriamiento ( $\Lambda_{mol}$ ). Estos parámetros se definen en el capítulo 3 y 4.

En el capítulo 4, se establece el sistema total de ecuaciones correspondiente a las especies en cuestión, es decir; por un lado están las ecuaciones cinéticas, y por otro, las ecuaciones que se encuentran conectadas con las anteriores, como la ecuación de evolución (ecuación 38). Así mismo, se detalla en forma completa el modelo a seguir y las aproximaciones posibles que se puedan hacer.

La discusión en el capítulo 5 se centra en la formación de la estructura inicial del Universo (en su etapa lineal), es decir, se analizan los mecanismos de formación de los primeros protoobjetos, además se estudian sus diversas propiedades (tamaño físico, tamaño angular, profundidad óptica, etc.).

Para terminar, redactamos las conclusiones del trabajo en el capítulo 6.

En el capítulo 7 se muestra un apéndice con las tablas correspondientes al capítulo 4.

En el capítulo 8 se hace mención de todas las citas requeridas para la elaboración de este trabajo.

1. Introducción	
1.1. Nucleosíntesis y Big Bang.....	7
1.2. Época de Recombinación.....	15
1.3. Moléculas Primordiales.....	16
1.4. Formación de Primeros Objetos y Reionización.....	17
2. Reacciones Químicas Básicas en el Espacio	
2.1. Introducción.....	20
2.2. Procesos de Formación molecular.....	21
2.3. Procesos de Destrucción molecular.....	26
3. Cinética Molecular en Cosmología	
3.1. Introducción.....	28
3.2. El Modelo Mínimo.....	30
3.3. Parámetros del Modelo.....	35
3.4. Parámetros Cosmológicos para Distintos Modelos.....	40
4. Cálculo de Abundancias	
4.1. Introducción.....	43
4.2. Cinética Molecular.....	49
4.3. Los Cálculos.....	53
5. La Formación de los Primeros Objetos	
5.1. Introducción.....	65
5.2. Protoobjetos.....	68
5.3. Estimaciones.....	73
5.4. Primeras Estrellas.....	76
6. Conclusiones.....	79
7. Apéndice.....	81
8. Referencias.....	90



# 1 Introducción

## 1.1 Nucleosíntesis y Big Bang

Durante el dinámico desarrollo actual en el tema de estudio denominado por astrofísicos y cosmólogos, como “la formación primogenia en el universo”, ahí se estudia desde los primeros elementos químicos hasta la formación de las primeras protoestructuras. A pesar del gran avance que se tiene en las investigaciones de esta rama de estudio, aun faltan muchos estudios por realizar, enigmas que resolver e interrogantes fundamentales que contestar. La idea que se tiene al respecto, es; que la radiación cósmica de fondo en microondas (CMBR) es una prueba cosmológica fuerte a favor del Big Bang. Entonces, a partir de esto; se conocen 2 puntos: El punto inicial del Big Bang de la Nucleosíntesis (BBN) y el punto final  $z = 0$  (el Universo observable, donde  $z$  es el parámetro corrimiento al rojo). ¿Qué hay entre estos dos puntos?. Para resolver esto se llevan acabo modelos cosmológicos que puedan describir los procesos que se producen entre esas épocas. Por así decir, la naturaleza está constituida por partículas elementales libres y de elementos químicos, donde estos últimos predominan. Pero, ¿cómo han llegado a existir los elementos químicos en la forma en que ahora se encuentran? ¿fueron siempre como son ahora o han evolucionado en alguna forma desde otros estados? Si han evolucionado, ¿cómo y cuándo ocurrieron estos cambios?.

Una clasificación de los acertijos que se presentan en el estudio del origen de los elementos químicos, se puede hacer de la siguiente manera:

1. ¿Cuál es la actual distribución de la abundancia de los elementos

primordiales?, es decir, ¿cuánto helio, litio y deuterio existen en comparación con el hidrógeno ( $He/H$ ,  $D/H$ ,  $Li/H$ )?

2. ¿Cómo varía la distribución de la abundancia de los elementos ya mencionados de un lugar a otro en el Universo?

3. Si los elementos anteriores han evolucionado a partir de algún estado primordial, ¿cuál era ese estado y qué procesos han ocurrido en su evolución?

4. ¿Cómo evolucionaron estos elementos, desde los lugares donde fueron creados hasta donde ahora se encuentran? (Acosta V., Cowan C., Graham B., 1975).

Para la realización de toda esta gama de investigaciones relativas a las moléculas cosmológicas del Universo, es necesario tener como base un modelo cosmológico del universo sobre el cual partir.

Seguiremos aquí con la línea de razonamiento que propone un origen explosivo: la teoría de la gran explosión (Big Bang), sugerida por Gamow y sus colaboradores (Carroll B.W., Ostlie D.A., 1996). Para este modelo, la teoría se encuentra bien establecida y plenamente desarrollada. Según esta teoría, el temprano Universo consistía de un plasma de partículas elementales extremadamente denso y caliente. Varios procesos físicos importantes ocurrieron como consecuencia de la expansión. Por ejemplo, el Universo se enfrió por debajo de las energías de amarre de los elementos ligeros (hidrógeno, deuterio, litio, helio), principiando la formación de núcleos que una vez re-combinados con los electrones forman los primeros átomos (Puy D., Signore M., 2001).

Más específicamente, el proceso de nucleosíntesis primordial está sustentado por el modelo Standard Big Bang Nucleosynthesis (SBBN), el cual fue analizado primero por Peebles(1966), Wagoner, Fowler y Hoyle (1967) y Wagoner (1969, 1973). Un grupo de investigación en Chicago dió también un fuerte impulso a este campo, ver Yang *et al.* (1979,1984), Copi *et al.* (1995), Schramm y Turner (1998), Schramm (1998) y Olive *et al.* (1981, 2000).

Enseguida, resumiremos las principales características del modelo SBBN. El modelo estándar del muy temprano Universo es muy simple y está determinado por tres importantes pilares : la expansión gobernada por la relatividad general, las interacciones de partículas por el modelo estándar y la distribución de partículas por la física estadística. El SBBN depende sólo de un parámetro, que es la razón barión a fotón  $\eta$  o la cantidad adimensional de densidad bariónica  $\Omega_b$ .

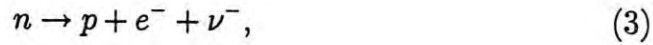
En el marco del modelo SBBN a un tiempo mucho menor que un segundo después del Big Bang, el Universo era un plasma caliente( $T \gg 10^{10} K$ ) que estaba expandiéndose rápidamente, donde la mayor parte de su energía se encontraba en forma de fotones de alta temperatura y partículas relativistas. Para mantener la razón de neutrones a protones en su valor térmico (razón de equilibrio), es decir;  $\frac{n}{p} \approx 1$ , se llevaron a cabo procesos débiles como los siguientes:

$$n + \nu \rightarrow p + e^-, \quad (1)$$

$$n + e^+ \rightarrow p + \nu, \quad (2)$$



y



donde  $n$  son los neutrones,  $p$  los protones,  $e^-$  los electrones,  $e^+$  los positrones,  $\nu$  los neutrinos y  $\nu^-$  los antineutrinos.

Al acercarse a un segundo, la temperatura del Universo es alrededor de  $10^{10} K$ , entonces; los procesos débiles anteriores se hacen inefectivos. La razón  $n/p$  se congela para acercarse a  $1/6$  (Puy D., Signore M., 2001), primero para las colisiones entre neutrones y protones que forman deuterio D:



donde  $\gamma$  es un fotón que se libera en la reacción.

Las colisiones con deuterio permiten la formación de núcleos de tritio y helio 3:



y finalmente de helio 4 por medio de las reacciones:





Al aproximarse los 100 segundos la época de nucleosíntesis concluye. Así, la mayor parte de los neutrones estarán en núcleos de  ${}^4\text{He}$ , y la mayor parte de los protones se mantendrán libres, mientras pequeñas cantidades de  $D$ ,  ${}^3\text{He}$  y  ${}^7\text{Li}$  serán sintetizados.

La producción de nucleosíntesis primordial se muestra como una función de la densidad bariónica en la figura 1 (Burles *et al.* 1999). Medir las abundancias primordiales actuales es un desafío considerable, debido a las incertidumbres en la medición de abundancias en el presente y debido a las incertidumbres en la modelación de la evolución nuclear según el Big Bang. Las abundancias medidas de helio 4, deuterio, litio 7 y helio 3 (Burles *et al.* 1999) son:

$$Y = 0.244 \pm 0.002, \quad (10)$$

$$\left(\frac{D}{H}\right) = (3.4 \pm 0.3) \times 10^{-5}, \quad (11)$$

$$\left(\frac{{}^7\text{Li}}{H}\right) = (1.7 \pm 0.15) \times 10^{-10}, \quad (12)$$

$$\left(\frac{{}^3\text{He}}{H}\right) = (0.3_{-0.3}^{+1}) \times 10^{-5}. \quad (13)$$

donde  $Y \equiv$  masa total de Helio / masa total del gas, es la fracción de masa del  ${}^4\text{He}$ .

La figura 1 resume las abundancias medidas con sus incertidumbres. En esta figura los rectángulos representan los resultados experimentales, los cuales son comparados con las curvas teóricas (líneas sólidas). En 1980 y hasta recientemente, los cosmólogos introdujeron un intervalo de concordancia para la densidad bariónica, donde las abundancias predichas y medidas

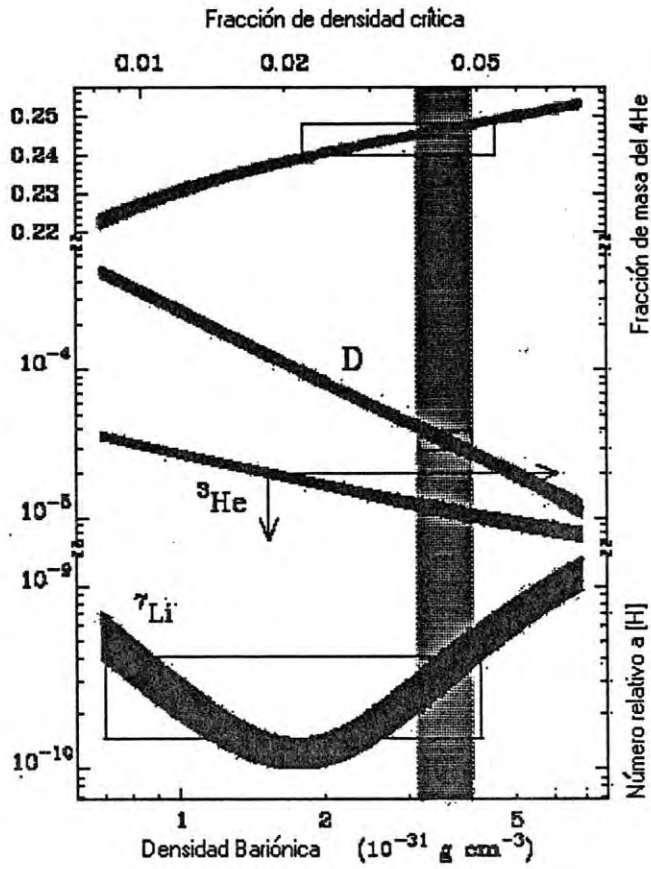


Figure 1: Abundancia relativa de  $\frac{D}{H}$ ,  $\frac{^7\text{Li}}{H}$ ,  $\frac{^3\text{He}}{H}$  y de fracción de masa para el  $^4\text{He}$ . Intervalos de concordancia de los elementos ligeros, y predicción de la densidad bariónica  $\Omega_b$  debido a la medición de deuterio.

para los cuatro elementos ligeros son consistentes; ver Copi *et al.* (1995) quien derivó:

$$0.007 < \Omega_b h^2 < 0.024, \quad (14)$$

donde el término  $h^2$  es un factor de indeterminación que toma valores de  $[0.5, 1]$ .

Un cambio importante ocurrió entre 1998 y 1999 con la determinación exacta de la abundancia del deuterio primordial que permitió la determinación mucho más exacta de la densidad bariónica: La figura 1 muestra los intervalos de concordancia para cada elemento y la densidad bariónica predicha por la medición del deuterio.

De acuerdo con Tyler *et al.* (2000), la abundancia primordial relativa de  $D$  es:

$$\left(\frac{D}{H}\right) = (3.3 \pm 0.5) \times 10^{-5}. \quad (15)$$

Burles *et al.* (2000) proporciona la siguiente determinación de la densidad bariónica:

$$\Omega_b h^2 = 0.0189 \pm 0.0019. \quad (16)$$

Hasta el año 2000, la concordancia entre las predicciones del SBBN y las abundancias observadas, hacían de SBBN una piedra angular de la cosmología del Big Bang.

Sin embargo, las mediciones recientes de los satélites artificiales BOOMERANG y MAXIMA, de la radiación de fondo de microondas cósmicas (de Bernardis *et al.* 2000, Jaffe *et al.* 2000) favorecen el siguiente valor:



$$\Omega_b h^2 = 0.032 \pm 0.005 \quad (17)$$

El cual a priori, no puede ser acomodado dentro el modelo SBBN (Burles *et al.* 2000). Futuros experimentos de satélites (MAP y PLANCK Surveyor) darán una mejor determinación de  $\Omega_b h^2$ . Mientras tanto, el modelo SBBN parece estar en dificultad (Puy D., Signore M., 2001), y los cosmólogos investigan posibles modelos No-Estándar de Nucleosíntesis del Big Bang (NBBN).

Es bien conocido, que hay modelos NBBN que conducen a abundancias considerables de carbón primordial, nitrógeno y oxígeno. Por esta razón, es de gran importancia investigar la posibilidad de detectar la emisión de protoobjetos en líneas de las moléculas basadas en elementos pesados primordiales (por ejemplo, estas moléculas son:  $CH$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ , ...), porque de esta manera podríamos medir las abundancias primordiales de carbón y oxígeno, en épocas antes de que se modifiquen durante su evolución estelar.

Como acaba de mencionarse, en el caso de NBBN, la presencia de abundancias de nitrógeno primordial, carbón y oxígeno, es relativamente alta (arriba de  $10^{-9}$  como fue sugerido por Rauscher *et al.* 1994). Esta posibilidad se debe a la presencia de microinhomogeneidades en la distribución inicial de la materia en  $z = 10^9$  (ver Bradley W. Carroll, Dale A. Ostlie, 1996). En este caso, moléculas tales como  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ , etc. son creadas en cantidades significativas en épocas con corrimiento al rojo  $z < 300$ . Por esta razón, la investigación de estas moléculas en los protoobjetos es de particular importancia. Si pudieran detectarse, o al menos obtenerse límites inferiores a sus abundancias, sería posible restringir los modelos NBBN, así como también estimar el espectro de masa de los primeros objetos, sus parámetros físicos y



la época de formación (Lipovka A., Saucedo J., Campos J., Soto I 2001).

## 1.2 Época de Recombinación

Después del período de nucleosíntesis, el proceso natural que le sigue a este período; es, relativo a la posibilidad de formar átomos por recombinación de núcleos primordiales con electrones libres.

El proceso de recombinación cosmológica no fue instantáneo, debido a que los electrones capturados en diferentes niveles de energía atómica, podrían no bajar en cascada instantáneamente a su estado más bajo. Los átomos alcanzaron el estado más bajo, a través del corrimiento al rojo cosmológico de la línea de fotones Lyman  $\alpha$  o por los procesos  $2s-1s$  de dos fotones. Sin embargo, el universo se expandió y se enfrió tan rápidamente, que la recombinación pudo completarse, y sólo quedó una fracción pequeña de electrones libres y protones.

Es importante mencionar que en esta época de recombinación, el valor de  $z$  para los elementos neutros se encuentra establecido de la siguiente manera:

La recombinación del  $He$  inicia en  $z = 2500$ , el de  $H$  en  $z = 1500$  y para el  $Li$  en  $z \approx 400$ , de acuerdo a sus respectivos potenciales de ionización. Los electrones inician su recombinación en la época correspondiente a  $z > 1500$ , lo que conduce a eliminar todas las fluctuaciones pequeñas de horizonte en la época de  $z = 1500$ . En investigaciones recientes se ha mencionado la importancia de la época de recombinación del  $Li$ , puesto que al parecer tuvo que ver con la impresión de la anisotropía del espectro de la radiación de

fondo de microondas cósmica (CMBR) (ver Phillip C. Stancil *et al.* 2002).

Después de la recombinación del  $H$ , la ionización se conserva a una razón de

$$\frac{[H^+]}{[H]} = \frac{[e^-]}{[H]} \approx 10^{-3} \quad (18)$$

y concluye en la época de reionización.

### 1.3 Moléculas Primordiales

Después de la época de la recombinación, la química primordial comienza, cuando la expansión adiabática hizo que la temperatura de la radiación decreciera por abajo de 4000K. La química del Universo temprano involucra a los elementos hidrógeno, su isótopo deuterio, helio con sus formas isotópicas y el litio. Por otro lado, es importante mencionar que para átomos pesados como el  $C$ ,  $N$ ,  $O$ , la estimación para el cálculo de abundancias en modelos SBBN es de  $\leq 10^{-15}$  con respecto a  $[H]$ , y por lo tanto, los cálculos de cinética para estas especies ( $C$ ,  $N$ ,  $O$ ) no son de interés desde el punto de vista observacional, dentro del modelo SBBN. La literatura sobre la química en la época de post recombinación ha crecido considerablemente en años recientes. Muchos autores han desarrollado estudios de química primordial en diferentes contextos. Por ejemplo Lepp y Shull(1984), Latter y Black (1991), Puy *et al.* (1993), Stancil *et al.* (1996), Galli y Palla (1998) para redes químicas; Palla, Galla y Silk (1995), Puy y Signore (1996, 1997, 1998a, 1998b), Abel *et al.* (1997), y Galli y Palla (1998) y Puy D. (2000), en el contexto de la formación de los primeros objetos.



## 1.4 Formación de Primeros Objetos y Reionización

La época más importante en relación a la primera formación de objetos en el Universo está comprendida en el intervalo de  $z \approx 1400$  y  $z = 6$ , que es el período que se identifica como “época oscura”.

Algunos artículos muy importantes, donde se han realizado cálculos sobre el colapso de diversos objetos primordiales, son los siguientes: M. R. Santos , V. Bromm , M. Kamionkowski (2001), V. Bromm, P. S. Coppi, R. B. Larson (2001), Tegmark M., Silk J., Rees M. J., *et al.* (1997), Puy D., Signore M. (1996), Haiman Z., Thoul A. A., Loeb A. (1996). En estos artículos, se puede encontrar información sobre la masa de colapso (la masa de colapso, es la masa necesaria que necesita mantener un protoobjeto para colapsar gravitacionalmente y así, conformarse como un objeto) de distintos objetos.

En los años de 1960 se empezó a manejar la idea de que el medio intergaláctico con alto corrimiento al rojo podría estar ionizado. La radiación de un objeto muy distante podría ser dispersada por electrones libres (Field 1954, Gunn y Peterson 1965), es decir, en el trabajo de Gunn-Peterson de 1965 se da a conocer el siguiente efecto: Al hacerse observaciones espectroscópicas del objeto quasi-estelar 3C9, el cual tenía un corrimiento  $z = 2.01$ , y para el cual la frecuencia de la línea de Lyman- $\alpha$  estaba en el espectro visible, se hizo posible la determinación de un nuevo valor, muy pequeño para la densidad de hidrógeno neutro en el espacio intergaláctico. Se observó que el espectro de la fuente, continúa (sin embargo, quizá un poco debilitado) más hacia el azul de Lyman- $\alpha$ . Consideremos sin embargo, el destino de dichos fotones. Como nosotros nos encontramos lejos de la fuente, a lo largo de la línea de vista, la radiación hace un recorrido hacia el rojo, para observadores localmente en reposo en la expansión, y para tal observador, la frecuencia de algún fotón que coincida con la frecuencia en reposo de Lyman-

$\alpha$  en su marco de referencia puede ser absorbida por el hidrógeno neutro en su vecindad. Las ondas de radio de baja frecuencia de fuentes extragalácticas podrían ser absorbidas (Field 1954, Sciama 1964a, Ericson y Cronyn 1965), y la radiación de fuentes de radio podría sufrir dispersión (Haddock y Sciama 1965), es decir, en el trabajo de Haddock y Sciama de 1965, se da a conocer que la fuente de radio quasi-estelar CTA 102, debe ser una fuente de radio variable, con un período de alrededor de 100 días, con lo cual habría la posibilidad de detectar el gas intergaláctico ionizado, postulado por ciertas teorías cosmológicas. De acuerdo a estas teorías, la densidad de electrones libres permaneció en el rango de  $10^{-5} - 10^{-4} [cm^{-3}]$ , correspondiente a una frecuencia de plasma  $\nu_p$  en el rango de 30-100  $\dot{H}z$ . Entonces, las ondas de radio de alta frecuencia  $\nu$  podrían propagarse a través del gas, con un tiempo de retraso  $(1/2)\nu_p^2/\nu^2$  por unidad de tiempo. Si CTA 102 tiene un corrimiento al rojo  $z \sim 0.5$ , como su magnitud aparente lo indica, las fluctuaciones en su radio luminoso podrían ser observadas algunos días después (para  $\nu_p \sim 100Hz$ ) a 50  $MHz$ . Muchas regiones ionizadas, locales, podrían haber esperado introducir menos dispersión que esta. Por consiguiente, puede ser posible detectar el gas intergaláctico ionizado, o de otro modo se desaprobarán estas teorías cosmológicas particulares. Sciama (1964a, 1964b) y de ahí en adelante Rees y Sciama (1966) fueron de los primeros en sugerir que el hidrógeno intergaláctico podría estar parcialmente ionizado a larga escala.

La ausencia de un efecto Gunn-Peterson (Gunn y Peterson 1965) en el espectro de cuasares de alto corrimiento al rojo, implica que el medio intergaláctico está altamente ionizado en  $z \sim 5$ . Estas observaciones sugirieron que el medio intergaláctico fue reionizado en el intervalo ( $5 < z < 50$ ). Así, en épocas correspondientes a  $z \sim 1000$  el medio de gas primordial se recombina



y permanece neutro hasta que se desarrollan fuentes de radiación y calor, capaces de reionizarlo. Se han hecho algunas sugerencias sobre posibles fuentes alternativas de fotones ionizantes intergalácticos. Sciama (1993a) hizo una descripción exhaustiva de los escenarios de estas fuentes alternativas. No sabemos cuando empezó la época de reionización y por esta razón, es importante también, desarrollar nuestro conocimiento sobre la formación de los primeros objetos después de la época oscura.

## 2 Reacciones Químicas Básicas en el Espacio

### 2.1 Introducción

Las redes modernas de reacciones, desarrolladas para describir la química en nubes difusas y oscuras contienen arriba de 4000 reacciones diferentes entre cientos de especies (Y.H. Le Teuff, T.J. Millar, and A.J. Markwick 2000, Lee *et al.* 1996a). Sin embargo, son sólo algunos tipos diferentes de reacciones las que ocurren, las cuales están resumidas en la tabla 1. Estas han sido descritas con mucho detalle en revisiones hechas por Dalgarno (1987) y Van Dishoeck (1988). Para bajas densidades de gas interestelar, los procesos de tres-cuerpos son poco importantes, de manera que solamente hay que considerar las reacciones de dos-cuerpos. La razón de una reacción entre dos especies arbitrarias X y Y viene dada por  $Rn(X)n(Y)$  en  $[cm^{-3}s^{-1}]$ , donde  $R$  es la razón del coeficiente de la reacción en  $[cm^3s^{-1}]$  para procesos colisionales dada por  $R_{ijk} = \langle V \sigma_{ijk} \rangle$  donde  $V$  es la velocidad,  $\langle \rangle$  es el promedio como función de la distribución de Maxwell,  $\sigma_{ijk}$  es la sección transversal relativa a las especies en colisión  $i$  y  $j$  que produce una especie  $k$  y  $n$  es la concentración en  $[cm^{-3}]$  (Hartquist T., Williams D., 1998).

Tabla 1.

Tipos de procesos moleculares en la fase gaseosa	
Procesos de formación de enlaces	
Asociación radiativa	$X + Y \rightarrow XY + h\nu$
Formación de superficie de granos	$X + Y : g \rightarrow XY + g$
Desprendimiento asociativo	$X^- + Y \rightarrow XY + e$
Procesos de destrucción de enlaces	
Fotodisociación	$XY + h\nu \rightarrow X + Y$
Recombinación disociativa	$XY^+ + e \rightarrow X + Y$
Disociación colisional	$XY + Z \rightarrow X + Y + Z$
Procesos de reordenamiento de enlaces	
Cambio ion-molécula	$X^+ + YZ \rightarrow XY^+ + Z$
Transferencia de carga	$X^+ + YZ \rightarrow X + YZ^+$
Neutro-Neutro	$X + YZ \rightarrow XY + Z$

La  $g$  en la tabla anterior representa a los granos de polvo y la  $Z$  a otra especie.

En caso de fotorreacciones, como la fotodisociación tenemos que para  $R$ :

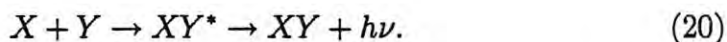
$$R_{ij} = \frac{1}{H} \int U_\lambda \sigma_\lambda \lambda d\lambda \quad [s^{-1}] \quad (19)$$

donde  $U_\lambda$  es la densidad de energía del campo de radiación,  $\sigma_\lambda$  es la sección transversal,  $\lambda$  es la longitud de onda y  $H$  es la constante de Planck.

## 2.2 Procesos de formación molecular

Son dos los procesos básicos mediante los cuales se pueden formar enlaces moleculares. El primero es la asociación radiativa de átomos o moléculas. En este proceso una nueva molécula se estabiliza por la emisión de un fotón.

Es decir, cuando dos especies,  $X$  y  $Y$ , se aproximan una a la otra en el curso de una colisión, se emite un fotón, estabilizando así la compleja colisión:



donde el  $*$  indica que la pareja de especies  $XY$  se encontraba en un estado electrónico excitado antes de la colisión.

Tres ejemplos importantes son las siguientes reacciones:



y



El fotón puede ser emitido de una manera espontánea o su emisión puede ser estimulada por el campo de radiación del ambiente. Hasta ahora, en los diversos casos que se han estudiado, los procesos estimulados no contribuyen (significativamente) a la razón de formación molecular total (Stancil y Dalgarno 1997a, 1997b), en el caso más simple que  $X$  y  $Y$  son átomos, pero también puede tratarse de moléculas neutras. En ciertos casos,  $X$  o  $Y$  pueden estar ionizados, y entonces los procesos de asociación radiativa pueden competir con la transferencia de carga radiativa o no radiativa. Normalmente se considera que  $X$  y  $Y$  permanecen en sus respectivos estados base electrónicos. Sin embargo, si una colisión asociativa se encuentra en un estado electrónico o vibracional excitado, debido a un mecanismo de bombardeo óptico o colisional, la razón para la asociación radiativa podría ser considerablemente



alta. El segundo proceso involucra la formación molecular sobre superficies de granos de polvo, en donde los granos son los portadores de la energía relacionada. Un tercer proceso, llamado desprendimiento asociativo, juega un menor papel en la química de nubes densas, sin embargo es importante, por ejemplo, en la química del Universo temprano. Este es otro mecanismo de reacción de dos-cuerpos al cual se le denomina “reacciones ion-molécula”, que son de gran importancia en la formación de hidrógeno molecular en situaciones donde no hay presencia de polvo:



donde  $H^-$  es ion negativo del hidrógeno.

Para este último proceso, son importantes las condiciones particulares en que se encuentra la formación y estabilidad del ion negativo para que la reacción pueda existir. Por ejemplo, podemos mencionar algunos iones negativos y sus respectivas energías de amarre, las cuales nos proporcionarían una idea de cómo sería su estabilidad durante el proceso.

Entre los diferentes iones que se pueden encontrar, mencionaremos los siguientes:  $H^-$ ,  $He^-$ ,  $Li^-$ ,  $C^-$ ,  $O^-$ , y sus respectivas energías de amarre en eV: 0.75416, 0.075, 0.6, 1.25, 1.46. Obsérvese, que las mayores energías pertenecen a los iones negativos  $C^-$  y  $O^-$ .

Finalmente, el proceso de ionización asociativa, es otro proceso de asociación de dos-cuerpos, que generalmente involucra la colisión de una pareja de partículas, una de ellas está electrónicamente excitada:



donde  $XY^+$  es un ion molecular formado por los átomos  $X$  y  $Y$ .

Este proceso, puede en algunos casos, competir con la asociación radiativa. Se requieren cálculos numéricos detallados para estimar la importancia de estos procesos.

Los procesos de desprendimiento asociativo y de ionización asociativa pueden contribuir a la formación molecular bajo ciertas condiciones. En general, aunque estos procesos han sido incluidos en los modelos astrofísicos, no se ha encontrado que jueguen un papel importante en los procesos de formación molecular. La mayor excepción se encuentra en la formación de  $H_2$  en el Universo temprano (Lepp y Shull 1984; Dalgarno y Fox 1994).

Rawlings, Drew y Barlow (1993) señalaron que es improbable que estos procesos compitan uno con otro, debido al amplio margen de diferencia que existe en las condiciones requeridas para los dos tipos de procesos. En caso de ocurrir la ionización asociativa, debe ser, a través de un medio electrónicamente excitante de parejas de colisiones. Esto usualmente involucra un mecanismo de bombeo óptico, que requiere un campo de radiación significativo.

El proceso de desprendimiento asociativo, puede ser visto formalmente como un proceso de colisiones tal que su descripción teórica ha sido llamada tal vez el problema más difícil en la teoría de colisiones atómicas (Haywood y Delos 1990). Se alcanza una simplificación si el proceso es visto como la formación de un ion molecular negativo  $XY^-$ , seguido por el auto-desprendimiento principal a un electrón libre y una molécula  $XY$  (Bates y Massey 1954).



La exploración de estos mecanismos es de considerable interés para el estudio de la formación de moléculas en el Universo temprano (Puy *et al.* 1993; Dalgarno y Fox 1994; Stancil, Lepp y Dalgarno 1996). Se piensa que esas moléculas pudieron haber jugado un papel crítico en el enfriamiento de las nubes de gas primordial, que hiciera posible el colapso gravitacional, lo cual permitiría la formación de las primeras estrellas. Partiendo de los núcleos atómicos creados en la nucleosíntesis primordial principalmente  $H$  y  ${}^4He$ , con pequeñas cantidades de  $D$ ,  ${}^3He$  y  ${}^7Li$ , sólo una muy limitada variedad de moléculas pudieron ser formadas. La formación molecular pudo ocurrir solamente después de que el Universo se enfrió suficientemente para que una fracción significativa de especies neutrales en el medio ambiente estuvieran presentes.

Los primeros átomos en formarse fueron los de helio, con un potencial de ionización de 24.6 eV. Además, si tomamos en cuenta que la energía de disociación es fundamental para la formación de moléculas, las moléculas con energía de disociación  $E_d$  pequeña se destruyeron rápidamente y no sobrevivieron en el Universo temprano. La molécula  $H_2$  fue formada con abundancias significativas, puesto que su energía de disociación  $E_d = 4.5 eV$ . Por ejemplo, hay algunas moléculas que por su pequeña energía de disociación se destruyeron rápidamente, careciendo de una vida larga y estable en el Universo temprano. Es decir, moléculas tales como  $He_2^+$ ,  $LiH$  y  $OH$ , donde sus respectivas energías de disociación son: 2.24 eV, 2.5 eV y 4.35 eV.

Por otro lado, las razones de reacciones con iones moleculares son muy grandes, por lo tanto, tenemos destrucción muy rápida de  $He_2^+$ ,  $HeH^+$ , etc., mediante choques con  $H$ .

Dos son los principales mecanismos de formación de  $H_2$  en el Universo



temprano. El primero, involucra la formación de  $H_2^+$  por cada asociación radiativa o protón transferido por colisiones de  $HeH^+$  con  $H$ . La asociación radiativa de  $H + H^+$  toma lugar, a través de transiciones desde el estado electrónico repulsivo  $^2\Sigma_u^+(2p\sigma_u)$  al estado ligado  $^2\Sigma_g^+(1s\sigma_g)$  de  $H_2^+$ . El segundo mecanismo para la formación de  $H_2$  involucra el proceso de desprendimiento asociativo. Este proceso solamente puede ocurrir cuando el campo de radiación ha sido enfriado lo suficiente para que los iones  $H^-$  que tienen la energía de amarre  $E = 0.75 \text{ eV}$  no sean instantáneamente fotodesprendidos.

Considerando ambos casos, la asociación radiativa espontánea y estimulada, Stancil y Dalgarno (1997b) calcularon la razón de los coeficientes para la asociación radiativa de  $H$  y  $D$  para formar  $HD$ . La asociación sucede a través del estado  $X^1\Sigma^+$ , conduciéndose solamente por el pequeño momento dipolar de  $HD$  (Hartquist T., Williams D., 1998).

### 2.3 Procesos de destrucción molecular

Las nubes difusas y traslúcidas son penetradas por radiación ultravioleta intensa, que puede destruir enlaces moleculares, a través de procesos de fotodisociación. Para algunas moléculas tales como  $CH$  y  $OH$ , la fotodisociación puede ocurrir por radiación con longitud de onda menor que  $3000 \text{ \AA}$ .

Los procesos de disociación e ionización molecular son de gran interés. En la siguiente tabla se listan las energías de disociación y de ionización para las moléculas  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CN$ ,  $CH$  y  $OH$ , así como las longitudes de onda en las que se realizan tales procesos respectivamente (Kenneth R. Lang, 1974).

Tabla 2. Las energías y correspondientes longitudes de onda para la disociación e ionización de algunas moléculas

Energía y longitud de onda				
moléculas	$E_{disoc}$ (eV)	$E_{ioniz}$ (eV)	$\lambda_{disoc}$ (Å)	$\lambda_{ioniz}$ (Å)
$H_2$	4.4	15.4	2817.6	805
$CO$	11.1	14.0	1116.9	885.5
$CN$	7.5	14.2	1653	873.07
$CH$	3.47	10.6	3572.8	1169.5
$OH$	4.4	13.3	2817.6	932.15

Los fotones ultravioleta son capaces de ionizar átomos, de tal modo que además, se incrementa la abundancia de electrones en una nube.

En el interior de una nube, la radiación ultravioleta es reducida debido a la absorción y dispersión por granos (partículas de polvo) (e.g. Roberge *et al.* 1991). Los iones moleculares son destruidos eficientemente por los procesos de recombinación disociativa, los cuales son muy rápidos a bajas temperaturas. La recombinación disociativa de  $H_3^+$  (una de las especies clave en la química) ha sido objeto de considerable discusión en la última década (Dalgarno 1994), pero experimentos recientes parecen converger en un valor relativamente rápido de  $\sim 10^{-7} [cm^3 s^{-1}]$  a bajas temperaturas (Sundstrom *et al.* 1994; Smith y Spanel 1993). La razón de los coeficientes de recombinación disociativa de otros iones moleculares en gas de 10-30 K es típicamente de  $10^{-7} - 10^{-6} [cm^3 s^{-1}]$  (Hartquist T., Williams D., 1998).

## 3 Cinética Molecular en Cosmología

### 3.1 Introducción

El estudio de la formación molecular en la época de la post recombinación ha aumentado bastante recientemente. Saslaw y Zipoy (1967) y Peebles y Dicke (1968) fueron los primeros en dejar claro la gran importancia de las reacciones en la fase gaseosa para la formación de la molécula simple  $H_2$ . Gracias a sus investigaciones teóricas se logró mostrar que había indicios de cantidades de hidrógeno molecular, del orden de  $10^{-6} - 10^{-5}$ , que podría formarse vía especies intermedias de  $H_2^+$  y  $H^-$  una vez que el campo de radiación no tuviera una alta densidad de fotones con energías por arriba del umbral de disociación (2.64 y 0.75 eV, respectivamente).

La presencia de  $H_2$  es de relevancia directa para las propiedades de enfriamiento del gas primordial que, en su ausencia, sería un radiador extremadamente pobre, es decir, el enfriamiento por fotones Lyman- $\alpha$  es en realidad poco efectivo a temperaturas menores o aproximadamente iguales a 8000 K, bien por encima de la temperatura de la materia y radiación en la era de post-recombinación. Puesto que la evolución de las fluctuaciones de densidad primordial es controlada en parte por la habilidad del gas para enfriar a bajas temperaturas, es muy importante obtener una sólida imagen de la química de la mezcla gas libre-polvo, no limitada a la formación de  $H_2$ , sino también a otras moléculas de gran interés. La composición química del gas primordial consiste de  $e^-$ ,  $H$ ,  $H^+$ ,  $H^-$ ,  $D$ ,  $D^+$ ,  $He$ ,  $He^+$ ,  $He^{++}$ ,  $Li$ ,  $Li^+$ ,  $Li^-$ ,  $H_2$ ,  $H_2^+$ ,  $HD$ ,  $HD^+$ ,  $HeH^+$ ,  $LiH$ ,  $LiH^+$ ,  $H_3^+$  y  $H_2D^+$ . Las abundancias fraccionales de estas especies son calculadas como función del corrimiento al



rojo  $z$ , iniciando en  $z = 10^4$ , donde el  $He$ ,  $H$ ,  $D$  y  $Li$  están completamente ionizados. La red química que contiene 87 reacciones con las razones de los coeficientes tomados a partir de las más recientes conclusiones teóricas y experimentales se muestra en el apéndice al final de este trabajo. También se incluyen dos tablas para reacciones de moléculas pesadas, basadas en el oxígeno y el carbón. Las razones de las reacciones son tabuladas separadamente para cada elemento atómico en las tablas A1, A2, A3, A4, A5, A6 y A7. En cada tabla, la columna 2 señala la reacción y la columna 3 la razón del coeficiente (en  $[cm^3s^{-1}]$  para procesos colisionales en  $[s^{-1}]$  para procesos radiativos). La temperatura del gas y de la radiación son indicados por  $T_g$  y  $T_r$ , respectivamente. El rango de validez de la temperatura de los coeficientes están indicados en la columna 4, junto con algunas observaciones sobre como fue obtenida la razón. La última columna proporciona la referencia para la razón o la sección transversal adoptada (Galli D., Palla F. 1998).

En la parte 3.2 presentamos un modelo mínimo para los respectivos juegos de reacciones.

Se concluye este capítulo presentando los parámetros cosmológicos importantes en el cálculo de cinética molecular en el Universo temprano. Los cálculos de cinética molecular dependen de unos parámetros cosmológicos y por lo tanto, es de gran relevancia, tener determinado cada uno de ellos, ya que se aplicarán en el desarrollo de un modelo cosmológico específico. Dependiendo del modelo a seguir, podremos fijar cada uno los parámetros correspondientes y especificar los valores numéricos adecuados, de tal manera que esto ayude a proporcionarnos los enlaces requeridos entre el resultado que predice el modelo y el que se nos proporciona por medio de la observación

experimental.

En la parte 3.4, empezaremos por describir la definición de cada uno de los parámetros cosmológicos requeridos para lograr desarrollar el modelo. Por ejemplo, entre estos parámetros se encuentra; la constante de Hubble, el parámetro de densidad, la densidad bariónica, etc..

También se describirán los parámetros que dependen de la evolución; como lo es la temperatura cinética  $T_g$ , la temperatura de la radiación  $T_r$ , las funciones de enfriamiento, etc.. Además, se tabularán los parámetros cosmológicos para diferentes modelos, de tal manera que los resultados que se produzcan con nuestro modelo puedan ser comparados con los de otros modelos.

## 3.2 El Modelo Mínimo

En un gas raro (de baja densidad), como el que se estudia en cosmología durante la época pregaláctica, las moléculas complejas (grandes), casi no se forman en choques en que intervengan más de dos átomos. Por esta razón, se puede reducir la red química y escoger sólo los canales más importantes de formación y destrucción de ciertas especies. Así, podemos reducir la red química debido a las condiciones físicas en el universo temprano.

Cuando un sistema de reacciones o una red química ha sido reducida a un sistema de reacciones más pequeño, le denominaremos modelo mínimo. El modelo consta de las reacciones que son más esenciales para el modelo exacto de la formación-destrucción de cada especie molecular.

La ventaja de reducción de la red química de reacciones por medio de este modelo mínimo, es; que se reduce el tiempo de cálculo, y además; se logra mayor claridad en la cinética del gas, por lo que podemos analizar los procesos de formación y destrucción de una manera más profunda.

En el modelo de Galli y Palla (1998) la red química inicial del sistema gas primordial constaba de 87 reacciones, 69 de las cuales eran colisionales y 18 radiativas. En esta red particular, el modelo mínimo consiste de 33 reacciones esenciales, las cuales se muestran en el diagrama de la figura 2.

A continuación, partiendo del modelo mínimo, destacaremos las reacciones dominantes para la formación de  $H_2$ ,  $HD$ ,  $HeH^+$ ,  $LiH$  y  $LiH^+$ .

Para estimar las abundancias moleculares, las cuales dependen de las razones de reacción (descritas explícitamente en las redes químicas completas), es necesario conocer detalladamente la evolución térmica y dinámica del medio en cuestión. Es por eso que enseguida describiremos un modelo de evolución, el cual es aplicable a los distintos sistemas evolutivos existentes. Entonces, consideremos el modelo de evolución del gas pregaláctico en el marco de trabajo de un modelo cosmológico de Friedman, el cual fue utilizado en el trabajo de Galli y Palla (1998). Galli y Palla (1998) iniciaron sus cálculos con un corrimiento al rojo de  $z = 10^4$  con todas las especies atómicas completamente ionizadas y siguiendo su recombinación abajo de  $z = 0$  asumiendo que no hay lugar en el Universo para eventos reionizantes. Para calcular las abundancias de los 21 elementos incluidos en su red química, tuvieron que resolver el conjunto de ecuaciones acopladas de equilibrio químico de la forma



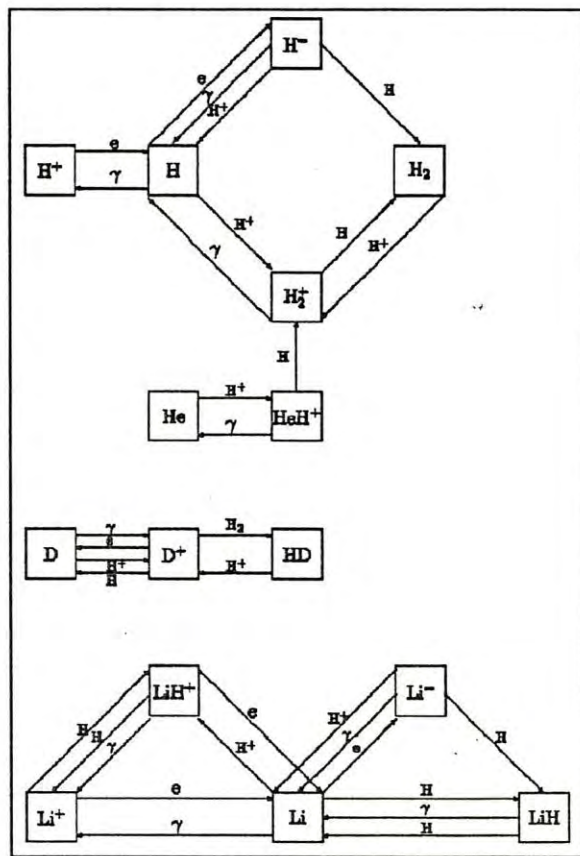


Figure 2: Modelo mínimo para la química de los elementos ligeros que se muestra en las tablas A1, A2, A3, A4 del apéndice.

$$\frac{dn_i}{dt} = R_{form}n_jn_k - R_{dest}n_i + \dots, \quad (26)$$

donde  $R_{form}$  y  $R_{dest}$  son la formación y destrucción de las tasas de velocidad de reacción de los elementos ligeros (hidrógeno, deuterio, helio y litio) las cuales fueron puestos en tablas por Galli y Palla (1998),  $n_i$  es el número de densidad de las especies reactantes  $i$ .

Para empezar, es importante observar que para describir completamente la química del  $H_2$ ; solamente son necesarias 11 reacciones de las 22 posibles. La formación de  $H_2$  involucra dos secuencias de reacciones con iones de  $H^-$  y  $H_2^+$  donde su abundancia es restringida por procesos de fotodestrucción. Sin embargo, para  $H^-$  un canal de destrucción es la neutralización mutua con iones  $H^+$  que contribuye aproximadamente con un 20-40 % a la razón total en corrimientos al rojo menor o igual que 100. El sistema  $H_2$  puede considerarse cerrado si no hay fuente externa de iones  $H_2^+$  que provengan de la destrucción de  $HeH^+$  por átomos  $H$  (reacción He11) en corrimientos al rojo que son menores o aproximadamente iguales que 250. Es de gran importancia considerar este camino puesto que esto modifica substancialmente la evolución de  $H_2^+$  (ver la figura 3), aunque esto no afecta la abundancia final de moléculas  $H_2$ . En ausencia de este canal, la abundancia de  $H_2^+$  podría ser del mismo orden que la de  $H_3^+$ , debido a la importancia de la reacción (H19) de la tabla A1 del apéndice.

Por otro lado, la química del deuterio es mucho más simple, puesto que solo 6 reacciones de las 24 son necesarias en la aplicación del modelo mínimo. La molécula  $HD$  es formada rápidamente por la reacción (D8) mostrada en la tabla A2 del apéndice, la cual involucra al deuterio ionizado. Es importante

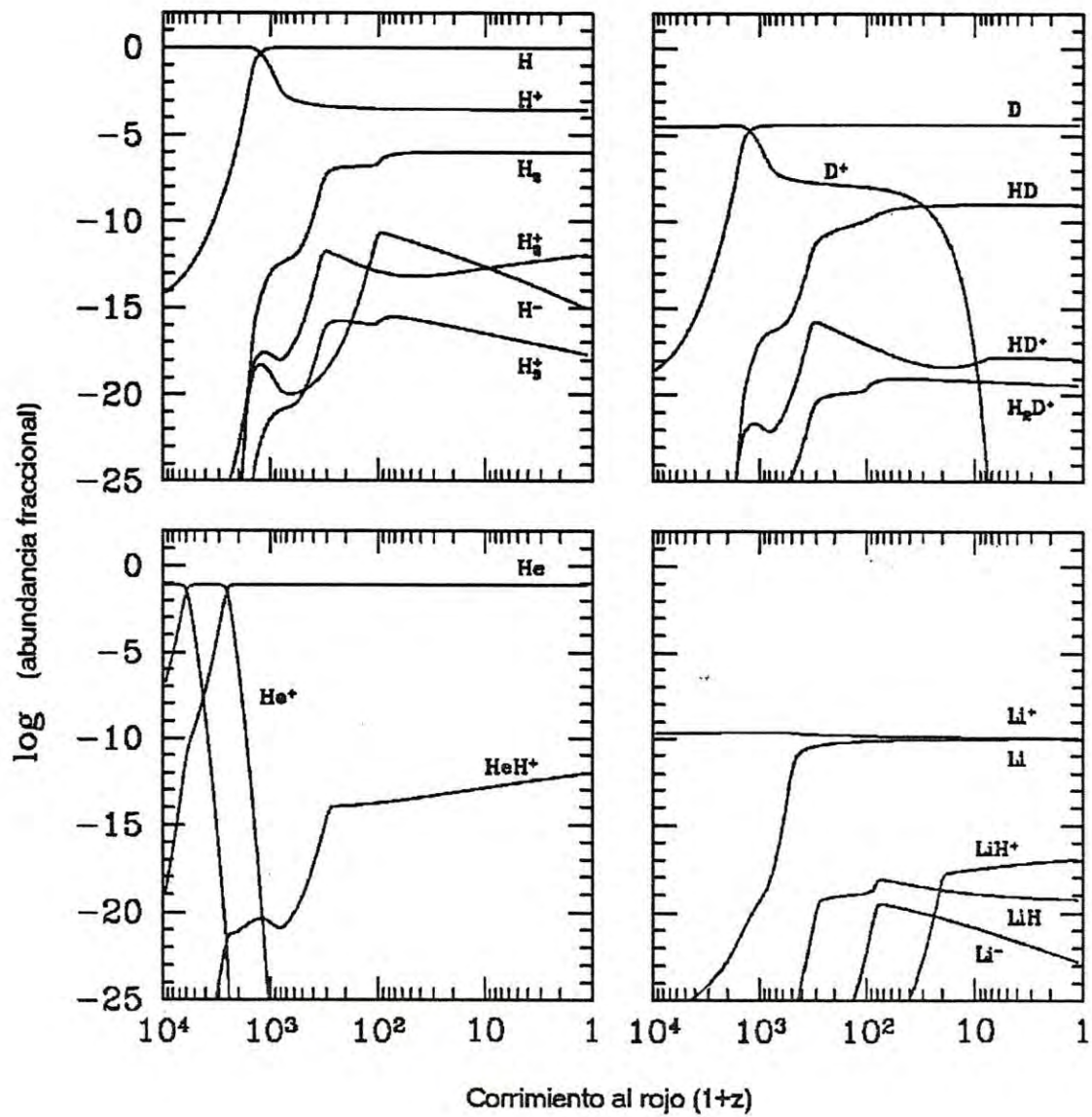


Figure 3: Evolución de las especies ligeras como función del corrimiento al rojo  $z$ , según el modelo estándar.



considerar todas las reacciones que determinan el balance de ionización. La principal ruta de destrucción es proporcionada por la reacción (D10) de la tabla A2, mientras que otras reacciones que involucran  $H_3^+$  (D11) y  $H$  (D9), también de la tabla A2, son mucho menos importantes.

Por último, la química del litio es la más complicada, puesto que aún con el modelo mínimo son indispensables 14 de las 26 reacciones que se tienen. Esta dificultad surge principalmente, debido a que el litio permanece parcialmente ionizado y los caminos que llevan a la formación de  $LiH$  y  $LiH^+$  compiten de manera efectiva una con la otra. Hay que observar también que en corrimientos al rojo menores o aproximadamente iguales a 100, la ruta más importante para formar  $LiH$  es la que se sigue a partir del desprendimiento asociativo de iones de  $Li^-$  con  $H$ . Este proceso, de manera gradual se encontrará removiendo al litio; y de esta manera, la abundancia de  $LiH$  llegará a alcanzar un valor constante (Galli D., Palla F. 1998).

### 3.3 Parámetros del Modelo

Para introducir de una manera sencilla las definiciones respectivas de cada uno de los parámetros cosmológicos, empezaré por describir al Universo partiendo de una cosmología newtoniana, es decir, para poder desarrollar con facilidad un entendimiento de como la expansión del Universo varía con el tiempo, vamos a imaginar un Universo lleno de "polvo" de densidad uniforme,  $\rho(t)$  (el término "polvo" es una expresión figurada, que se usará sólo para visualizar ciertos conceptos cosmológicos, como lo es la expansión del

Universo y la presión  $p = 0$ ; puesto que en realidad en estas épocas tempranas no hay polvo, y elegimos un punto arbitrario de referencia para el origen (este polvo representa el contenido del Universo después de que llega a estar homogenizado y uniformemente dispersado). Sea  $r$  el radio de un cascarón esférico de masa  $m$ , este cascarón esférico de masa se expande junto con el Universo, de tal manera que siempre contiene las mismas partículas de materia. Si la velocidad recesional (de disminución) del cascarón es  $v$ , entonces la energía mecánica del cascarón es

$$K + U = E,$$

donde  $K$  es la energía cinética y  $U$  es la energía potencial gravitacional.

Como el cascarón se expande, el tirón gravitacional desde el interior de la masa causa que la energía cinética disminuya (no sucede así, si el Universo acelera su expansión), mientras que la energía potencial gravitacional,  $U$ , se incrementa (estamos suponiendo que el “polvo” no ejerce presión, y que la gravedad es la única fuerza que actúa). Sin embargo, por conservación de la energía, la energía total  $E$  del cascarón no cambia puesto que él se mueve hacia fuera. De aquí en adelante, por conveniencia, la energía total del cascarón se escribirá en términos de dos constantes,  $E = (-1/2)m\kappa c^2\bar{\omega}^2$ , donde  $m$  es la masa del cascarón,  $k$  es una constante que tiene unidades de  $(longitud)^{-2}$ , además; la especificación cuantitativa de  $\kappa$  nos proporciona la forma geométrica adoptada por el Universo, es decir, la constante  $\kappa$  determina la geometría completa del Universo, tal que:

Si  $\kappa > 0$ , la energía total del cascarón es negativa, y el Universo es cerrado. En este caso, la expansión podría algún día detenerse e invertir el proceso a una contracción.

Si  $\kappa < 0$ , la energía total del cascarón es positiva, y el Universo es abierto.

En este caso, la expansión podría continuar por siempre.

Si  $\kappa = 0$ , la energía total del cascarón es igual a cero, y el Universo sería plano, nunca abierto o cerrado. En este caso, la expansión podría continuar para descender lentamente, y que viene a detenerse solamente cuando  $t \rightarrow \infty$  ( $t$  es el tiempo de expansión del cascarón) entonces el Universo estuviera infinitamente dispersado. La otra constante,  $\bar{\omega}$ , es una etiqueta para esta masa particular del cascarón, tal como  $\bar{\omega} = r(t_0)$ , es decir, es una constante que nos proporciona el radio del cascarón en cada instante de tiempo  $t$ . Entonces, el estado de conservación de la masa-energía del cascarón es

$$\frac{1}{2}mv^2 - G\frac{M_r m}{r} = -\frac{1}{2}m\kappa c^2 \bar{\omega}^2. \quad (27)$$

En el lado izquierdo de la ecuación anterior,  $M_r$  es la masa interior del cascarón, y está dada por  $M_r = (4/3)\pi r^3 \rho$ ,  $G$  es la constante gravitacional.

Aunque el radio del cascarón y la densidad del polvo están cambiando continuamente, la combinación  $r^3 \rho$  no varía debido a que la masa interior a un cascarón específico permanece constante conforme el Universo se expande. Cancelando  $m$  y sustituyendo para  $M_r$  en la ecuación 27, tenemos que

$$v^2 - \frac{8}{3}\pi G \rho r^2 = -\kappa c^2 \bar{\omega}^2. \quad (28)$$

El principio cosmológico requiere que la expansión proceda en el mismo sentido para todos los cascarones; por ejemplo, el tiempo que se requiere para que los cascarones alcancen el doble de su distancia desde el origen, es asumido ser el mismo. Esto permite que el radio de un cascarón particular (identificado por  $\bar{\omega}$ ) en algun tiempo pueda ser escrito como

$$r(t) = R(t)\bar{\omega} \quad (29)$$



En esta expresión, a  $r(t)$  se le denomina distancia coordenada y  $R(t)$  es un factor adimensional de escala (el mismo para todos los cascarones) que describe la expansión. Debido a que  $\bar{\omega}$  etiqueta a un cascarón y lo sigue en su expansión,  $\bar{\omega}$  es una coordenada fija al movimiento del cascarón. En  $t = t_0$ ,  $R(t_0) = 1$  por definición y así el radio presente del cascarón es  $r(t_0) = \bar{\omega}$ , como fue notado previamente. Además, puesto que  $r^3\rho$  permanece constante en el tiempo para un cascarón específico, el valor de  $R^3(t)\rho(t)$  permanece constante para todos los cascarones. Entonces, puesto que  $R(t_0) = 1$ ,

$$R^3(t)\rho(t) = R^3(t_0)\rho(t_0) = \rho_0, \quad (30)$$

donde  $\rho_0$  es la densidad del Universo lleno de “polvo” en el tiempo presente.

La evolución del Universo Newtoniano, puede ahora ser descrito por el comportamiento en el tiempo del factor de escala  $R(t)$ .

Ahora examinaremos el movimiento de los cascarones de masa en los tres casos de un Universo plano, cerrado, o abierto. Primero, consideraremos el caso de un Universo plano ( $\kappa = 0$ ), correspondiente a cada cascarón expandiéndose a exactamente su velocidad de escape. El valor de la densidad que podría resultar en un valor de  $\kappa = 0$  es conocida como la “densidad crítica”,  $\rho_c(t)$ . Dicha densidad puede ser expresada en términos de la constante de Hubble como función del tiempo y de la constante gravitacional (Bradley W.Carroll, Dale A.Ostlie, 1996),

$$\rho_c(t) = \frac{3H^2(t)}{8\pi G}. \quad (31)$$

Para evaluar esto en el tiempo presente, es útil recordar que la constante

de Hubble en unidades convencionales de cgs es

$$H_0 = 100h \text{ [km s}^{-1}\text{ Mpc}^{-1}\text{]} = 3.24 \times 10^{-18}h \text{ [s}^{-1}\text{]}. \quad (32)$$

El parámetro adimensional  $h$  refleja la incertidumbre en esta importante cantidad. Generalmente se piensa que está en el rango de

$$0.5 \leq h \leq 1$$

El valor presente de la densidad crítica,  $\rho_{c,0}$ , es entonces

$$\rho_{c,0} = \frac{3H_0^2}{8\pi G} = 1.88 \times 10^{-29}h^2 \text{ [g cm}^{-3}\text{]}. \quad (33)$$

Ciertas estimaciones de la materia ordinaria en el Universo señalan que la densidad promedio es sólo una pequeña fracción de la densidad crítica, alrededor de

$$\rho_{b,0} \approx 3 \times 10^{-31} \text{ [g] [cm}^{-3}\text{]}. \quad (34)$$

Por materia ordinaria (bariónica), nos referimos a la materia compuesta por bariones (protones y neutrones). La estimación de  $\rho_{b,0}$  puede hacerse al comparar las abundancias observadas y las teóricas de los elementos ligeros, tal como el  ${}^3\text{He}$  y  ${}^7\text{Li}$ ; que fueron formados durante el BBN.

La densidad de materia oscura no bariónica, de composición no conocida, no es incluida en el valor de  $\rho_{b,0}$ . La materia oscura es revelada solamente por su influencia gravitacional sobre materia ordinaria. Probablemente esta interactúe muy débilmente con fotones y partículas cargadas por medio de la fuerza electromagnética, tal que no pueda absorber, emitir o dispersar cantidades apreciables de luz.

La razón de la densidad promedio a la densidad crítica es un importante parámetro en cosmología. Este parámetro es definido como el “parámetro de densidad”,

$$\Omega(t) \equiv \frac{\rho(t)}{\rho_c(t)}, \quad (35)$$

que tiene un valor presente de

$$\Omega_0 = \frac{\rho_0}{\rho_{c,0}}. \quad (36)$$

Ignorando la materia oscura y poniendo  $\rho_0 = \rho_{b,0}$  da

$$\Omega_{b,0} \approx 0.016h^{-2} \quad (37)$$

para materia bariónica (Bradley W. Carroll, Dale A. Ostlie, 1996).

En la sección siguiente mostraré algunos modelos identificados por sus parámetros cosmológicos particulares, los cuales nos podrán servir para comparar los resultados a los que conducen cada uno de ellos. Esto nos permitirá ilustrar la gran dependencia de los parámetros cosmológicos en la determinación de las abundancias finales de las moléculas (Puy D., Signore M., 2001).

### 3.4 Parámetros cosmológicos para distintos modelos

Los valores finales de las abundancias moleculares dependen del cambio de los parámetros cosmológicos. Cada modelo está de hecho especificado por tres parámetros: la razón de barión a foton  $\eta_{10}$ , el parámetro de cerradura  $\Omega_0$  y la constante de Hubble  $H$ . Galli y Palla (1998) resumieron y discutieron



la química del Universo temprano para diferentes modelos cosmológicos.

Las incertidumbres observacionales y teóricas asociadas con cada uno de estos modelos, son sin embargo un tanto grandes. Galli y Palla (1998) han seleccionado al modelo estándar como el más conveniente, bajo las constricciones impuestas por las observaciones de las abundancias de los elementos ligeros. Ese modelo se caracteriza por una constante de Hubble  $H = 0.67$  (Van den Bergh 1989), el parámetro  $\Omega_0 = 1$  y la razón de barión a fotón  $\eta_{10} = 4.5$  (Galli *et al.* 1995). Para normar los efectos que un cambio del parámetro  $\eta_{10}$  induce sobre la red química, se tiene que tomar un modelo con  $\eta_{10} = 8.0$ , el valor máximo, sin embargo compatible con las constricciones sobre el modelo estándar de nucleosíntesis del Big Bang (SBBN) dada por observaciones de litio en estrellas Pop-II (Bonifacio y Molaro 1997). Los resultados están dados en las tablas 3 y 4 para una comparación directa con el caso estándar. Hay que observar que la abundancia de  $H_2$  es la misma en los dos modelos, haciendo de esta molécula una referencia poco adecuada para diagnosticar modelos cosmológicos. Se observa también, que las moléculas de litio son muy sensibles a  $\eta_{10}$ , mostrando un incremento de un factor de 3-4 (Galli D., Palla F., 1998). Para otras especies, sin embargo; un valor alto de  $\eta_{10}$  implica una baja abundancia final, como resultado del bajo valor inicial de cada elemento predicho por el modelo estándar quien compensa el alto valor de densidad bariónica. Como ha sido demostrado por Palla *et al.* (1995), más grandes variaciones de las abundancias moleculares que las que se muestran en las tablas 3 y 4 pueden esperarse para variaciones más drásticas de los otros parámetros cosmológicos: tanto  $LiH$  como  $HD$  pueden variar por 2 ó 3 ordenes de magnitud, permitiendo cambios a  $\Omega_0$  y  $h$  por un factor de 5 y 2, respectivamente. Por otro lado, ciertas observaciones indican

que un valor más alto de la constante de Hubble es improbable, y que un Universo con  $\Omega_0 < 1$ , así como un valor distinto de cero de la constante cosmológica, son valores adoptados por los parámetros y de los cuales son menos favorecidos por modelos teóricos (Galli D., Palla F. 1998). En la tabla 4 el parámetro  $\eta_{10}$  es la razón barión a fotón (parámetro cosmológico equivalente a la densidad bariónica).

Tabla 3.

---

SENSITIVIDAD DE ABUNDANCIAS A  $\eta_{10}$

---

$z = 2000$

---

$\eta_{10}$	<i>X</i>	<i>Y</i>	<i>H</i>	<i>He</i>	<i>D</i>	<i>Li</i>
4.5	0.757	0.243	0.926	7.4(-2)	4.0(-5)	2.2(-10)
8.0	0.751	0.249	0.923	7.6(-2)	1.7(-5)	7.0(-10)

Tabla 4.

---

SENSITIVIDAD DE ABUNDANCIAS A  $\eta_{10}$

---

$z = 1$

---

$\eta_{10}$	$[e]/[H]$	$[H_2]/[H]$	$[HD]/[H]$	$[HeH^+]/[H]$	$[LiH^+]/[H]$	$[LiH]/[H]$
4.5	3.0(-4)	1.1(-6)	1.2(-9)	6.2(-13)	9.4(-18)	7.1(-20)
8.0	1.7(-4)	1.1(-6)	5.0(-10)	4.3(-13)	2.5(-17)	2.3(-19)

## 4 Cálculo De Abundancias

### 4.1 Introducción

Este capítulo está basado en el artículo de Lipovka, Saucedo, Campos RMF 2002 (ver referencias al final del trabajo).

En este capítulo se calculan por primera vez las abundancias de moléculas pesadas para el caso de un gas homogéneo en un Universo con NBBN. En la segunda sección se presenta el sistema de ecuaciones del problema. En la tercera sección se presenta el método para resolver el sistema de ecuaciones y los valores de los parámetros iniciales. Discutimos los resultados, los comparamos con los de otros autores.

Según la teoría del Big Bang (Peebles P.J.E. 1966; Wagoner R., Fowler W., Hoyle F. 1967), inmediatamente después de la explosión, el Universo estaba constituido por un gas extremadamente caliente y denso. Sin embargo, debido a la expansión y al consecuente enfriamiento, el Universo experimentó un gran número de procesos que rápidamente le hicieron modificar sus propiedades. En tan sólo unos cuantos minutos de la vida del Universo, se formaron los núcleos de los elementos primordiales ligeros (hidrógeno, deuterio, helio y litio). Posteriormente, al bajar la energía de la radiación a niveles por debajo de las energías de ionización de estos elementos, da inicio el proceso de recombinación de núcleos con electrones para formar los primeros átomos. Tiempo después, debido a la progresiva disminución de la temperatura, comienzan a presentarse las condiciones para la formación de las primeras moléculas.



El estudio de la formación molecular en épocas posteriores a la recombinación inicia con los trabajos pioneros de Zwicky F. (1959), sobre hidrógeno molecular. Pero sólo en años recientes se ha comenzado a experimentar un fuerte desarrollo en este tipo de investigaciones. Los trabajos de Saslaw W., Zipoy D. (1967) y Peebles P.J.E., Dicke R. (1968), fueron los primeros en indicar la importancia de las reacciones en fase gaseosa en la formación de la molécula  $H_2$ . La primer descripción completa de la química del hidrógeno fue desarrollada por Hirasawa T., Aizu K., Taketani M. (1969), Takeda H., Sato H., Matsuda T. (1969) y Takeda H., Sato H., Matsuda T. (1969), en el contexto de nubes de gas pre-galácticas y de formación de galáxias. La química del deuterio y del litio fue tratada por vez primera por Lepp S., Shull M. (1984). En este último trabajo, se presenta además; la primera red química que incluye moléculas primordiales, tales como el  $H_2$  y el  $HD$ . Posteriormente se publicaron los trabajos de Latter W.& Black J. (1991), Puy D. *et al.* (1993), Galli D., Palla F. (1998) y Stancil P., Lepp S., Dalgarno A. (1998).

La importancia de la razón de enfriamiento radiativo producido por hidrógeno molecular fue puntualizado por Takayanagi y Nishimura (1960), quienes desarrollaron cálculos teóricos de los procesos de enfriamiento debido a la excitación rotacional de la molécula  $H_2$ . Ellos consideraron colisiones con átomos de hidrógeno en el contexto de nubes interestelares. Saslaw y Zipoy (1967) usaron la función radiativa de Takayanagi y Nishimura (1960) en el contexto de nubes de gas pregaláctico.

Las moléculas  $HD$  y  $LiH$  juegan un importante papel térmico, puesto que ellas tienen transiciones rotacionales dipolares que son permitidas, ver Lepp y Shull (1984). Puy *et al.* (1993) calcularon la población de los niveles, la misma proporcionó una función térmica molecular  $\Psi_{mol}$  debida a las

moléculas  $H_2$ ,  $HD$  y  $LiH$ .

Una descripción completa del enfriamiento de medios astrofísicos se encuentra para la molécula  $H_2$  en Le Bourlot *et al.* (1999), y para  $HD$  en Flower *et al.* (2000). Flower (2000) recientemente presentó un estudio sobre la influencia de la molécula  $HD$  en el balance térmico del gas primordial y concluyó que esta molécula es tan importante como la molécula  $H_2$  en el balance térmico del gas primordial. Además, algunas reacciones químicas producen una función térmica química  $\Theta_{quim}$ , a través de la entalpía de la reacción.

Puy *et al.* (1993) toma en cuenta los procesos de transferencia entre radiación y materia vía la dispersión de Thomson, acoplada con el término de la fuente molecular y la entalpía de las reacciones para calcular las abundancias de las especies.

La existencia de una abundancia significativa de moléculas es de suma importancia para la evolución dinámica de objetos que colapsan. Debido a que la temperatura de la nube se incrementa al contraerse, un mecanismo de enfriamiento puede llegar a ser crucial para la formación de estructura. Al disminuir la temperatura, disminuye la presión; lo que permite que la gravedad domine de nuevo, es decir; permite el colapso continuo de protonubes inestables de Jeans. Esto fue especialmente importante para la formación de la primera generación de objetos. La posibilidad de observación directa de protoobjetos remotos (en épocas de  $z > 10$ ) mediante líneas moleculares, ha sido tratada en trabajos recientes (Dubrovich V.K. 1994, De Bernardis P. *et al.* 1993 y Signore M. *et al.* 1994). El interés en este problema se debe en parte, a que dichas observaciones nos brindan la posibilidad de determinar abundancias primordiales de especies tales como el litio y el deuterio, las



cuales permiten imponer restricciones a modelos de nucleosíntesis. Su importancia se debe además, al gran interés que existe por encontrar cantidades observables que proporcionen información sobre la evolución del Universo en épocas tempranas. Dicha información es sumamente útil, ya que es clave para mejorar nuestra comprensión sobre la distribución de materia en el Universo presente. A este respecto, el problema de la influencia de las moléculas primogéneas en el enfriamiento y evolución de los protoobjetos resulta ser de carácter fundamental. Otro problema que resulta ser de gran interés, es el hecho de que la radiación cósmica de fondo (CMBR) interactúa con la estructura ro vibracional (ro vibracional se refiere a una estructura relacionada de niveles vibracionales y rotacionales) de las moléculas. Esto potencialmente puede permitir la observación de protoobjetos, a través de las líneas de las moléculas anteriormente mencionadas.

Las mediciones recientes de CMBR por BOOMERANG y MAXIMA (De Bernardis P. *et al.* 2000, Jaffe A. *et al.* 2000) presentan evidencia a favor de un nuevo valor de  $\Omega_b$ . Este nuevo valor invita a reconsiderar modelos de NBBN (Burles S., Nollett K., Turner M. 2000). Es bien conocido que existe un gran número de modelos NBBN que predicen abundancias considerables de carbón, nitrógeno y oxígeno primordiales; por esta razón es importante investigar la posibilidad de detectar la emisión de protoobjetos en líneas de moléculas basadas en elementos primordiales pesados (estas moléculas son, por ejemplo:  $CH$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ , ...). Este tipo de estudio podría utilizarse para restringir modelos NBBN. A más bajas longitudes de onda, es factible que puedan observarse líneas moleculares emitidas en épocas de  $z \approx 20 - 50$ , por otros tipos de objetos. Estas observaciones proporcionarían restricciones al enriquecimiento del gas primordial debido a elementos pesados, como pro-



ductos de evolución de las primeras estrellas en esas épocas.

El interés por el estudio de objetos pequeños, con masa promedio de  $M < 10^{10} M_{\odot}$ , se debe a su papel en la formación de la estructura actual de distribución de materia y a las particularidades de su evolución. En cosmología estándar, las fluctuaciones primarias de densidad de materia se dividen en adiabáticas y entrópicas. En las adiabáticas, tanto la componente bariónica como la fotónica resultan perturbadas. Durante el período de recombinación del hidrógeno en  $z \sim 1400$  su evolución es fuertemente dependiente de la escala. Por este motivo, las escalas de  $M < 10^{12} M_{\odot}$ , prácticamente desaparecen. Las fluctuaciones entrópicas corresponden únicamente a la perturbación de la componente bariónica. La evolución de estas fluctuaciones es casi independiente del momento de la recombinación; y son estas fluctuaciones entrópicas las que se manifiestan a escalas pequeñas. El espectro de masa de estos objetos es muy interesante debido a que este se formó en un período con muy alto corrimiento y por tanto nos puede dar información acerca de parámetros fundamentales de sobredensidad de materia. Después de la recombinación, la masa de Jeans toma un valor de  $10^5 M_{\odot}$ , con lo cual se hace posible que inicie el colapso de protoobjetos con masas pequeñas de alto corrimiento (Puy D., Signore M. 1996). Como ya se ha mencionado, algunos modelos NBBN, predicen abundancias muy altas de nitrógeno, carbón y oxígeno primordiales (algunos alcanzan valores hasta de  $10^{-9}$ , como ha sido sugerido en Rauscher T., Applegate J.H., Cowan J.J., Thielemann F.K., Wiescher H. 1994). Esta posibilidad se debe a la presencia de micro-inhomogeneidades en la distribución inicial de materia en  $z = 10^9$  (ver Bradley W. Carroll, Dale A. Ostlie, 1996). En cuyo caso, moléculas tales como  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ ,  $OH^+$ , etc., pudieron haber sido creadas en can-

tidades significativas en épocas con corrimiento  $z < 300$ . Por esta razón, la investigación de estas moléculas en protoobjetos es de gran importancia. Si estas fueran detectadas o por lo menos pudieran establecerse límites a sus abundancias, sería posible restringir los modelos NBBN. Pero además, sería posible estimar el espectro de masa de los primeros objetos, sus parámetros físicos y su época de formación. En caso de existir abundancias significativas de oxígeno y carbón en protoobjetos, la fluorescencia podría permitir emisiones observables en las líneas de las moléculas  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ , etc..

En el caso de modelos NBBN (vea por ejemplo el artículo Rauscher T., Applegate J.H., Cowan J.J., Thielemann F.K., Wiescher H. 1994), o trabajos de revisión posteriores (Malney R.A., Mathews G.J. 1993 y Sarkar S., 1996) es muy importante calcular la cinética del gas primordial, incluyendo a moléculas formadas por elementos pesados - carbón y oxígeno. Su importancia se debe a que tales moléculas abren nuevas opciones de investigación. Por un lado, ellas pudieron haber participado en el enfriamiento del gas primordial, y por tanto ser capaces de modificar los procesos de colapso de los primeros objetos (tales como las protonubes) y por lo tanto, la historia del Universo observable. La importancia de las moléculas en procesos de enfriamiento y fragmentación de nubes primordiales ha sido discutido en varios trabajos (vea por ejemplo Silk J. 1977). Por otro lado, las moléculas pesadas poseen una estructura de niveles ro vibracionales muy conveniente para la observación, además de tener momentos dipolares bastantes grandes. Por estas razones, ofrecen la posibilidad de poder observar a los primeros objetos mediante sus líneas de estructura de rotación-vibración.



## 4.2 Cinética Molecular

El sistema de ecuaciones cinéticas que describen la evolución de la abundancia de las especies está dado por:

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j,k} n_j n_k R_{jki} - n_i \sum_{m,n} n_m R_{imn} + \sum_j n_j R_{ji} - n_i \sum_m R_{im}, \quad (38)$$

donde  $t$  es el tiempo,  $n_i$  es la densidad de la especie  $i$ ,  $R_{jki}(T_g)$  son las velocidades o razones de los procesos de choque  $j + k \rightarrow i$  que con especies  $k$ ,  $j$  y a la temperatura cinética  $T_g$  nos producen la especie  $i$ .  $R_{ji}(T_r)$  son las velocidades de los procesos radiativos (formación y destrucción de la especie  $j$ , mediante la ayuda de un fotón de CMBR a la temperatura  $T_r$ ).

En la ecuación (38) los términos positivos son responsables de la creación de la especie  $n_i$ , y los negativos de la destrucción de esta especie.

Para resolver el sistema de ecuaciones es conveniente introducir el corrimiento al rojo  $z$ , las abundancias adimensionales  $x_i$  definidas como:

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}}, \quad (39)$$

donde  $n_{tot} = n_0(1+z)^3$ , y expresar el cambio en el tiempo  $dt$  en términos del cambio en el corrimiento al rojo  $dz$  mediante la siguiente ecuación:

$$dt = -\frac{1}{H_0} \frac{dz}{(1+z)^2 \sqrt{1 + \Omega_0 z}}. \quad (40)$$

En estas ecuaciones los parámetros cosmológicos  $\rho_0 = \Omega_b \rho_{cr}$ ,  $H_0$  y  $\Omega_0$  son la densidad bariónica en la época actual  $z = 0$ , la constante de Hubble

y densidad adimensional respectivamente,  $\Omega_b$  es la densidad bariónica adimensional y  $\rho_{cr}$  es la densidad crítica de materia. Todos estos parámetros ya fueron definidos anteriormente. Con estas nuevas variables, el sistema de ecuaciones (38) toma la forma:

$$\frac{dx_i}{dz} = -\frac{(1 + \Omega_0 z)^{-\frac{1}{2}}}{H_0 (1 + z)^2} \left[ n_0 (1 + z)^3 (\sum_{k,l} x_k x_l R_{kli} - x_i \sum_{m,n} x_m R_{imn}) + \sum_k x_k R_{ki} - x_i \sum_m R_{im} \right]. \quad (41)$$

Como ya se ha mencionado, las velocidades de reacción  $R_{ijk}$  y  $R_{ij}$  dependen de las temperaturas cinética  $T_g$  y radiativa  $T_r$  respectivamente. Las temperaturas a su vez, son funciones de varios parámetros y para encontrarlos se debe resolver otro juego de ecuaciones diferenciales para la temperatura cinética  $T_g$  así como para la temperatura de radiación  $T_r$ . La temperatura de radiación se puede obtener de la ecuación de expansión adiabática

$$\frac{dT_r}{dt} = -T_r H_0 (1 + z) \sqrt{1 + \Omega_0 z}, \quad (42)$$

de donde, con ayuda de la ec. (39) podemos obtener  $T_r = T_0(1 + z)$ , con la temperatura de radiación en la época actual  $T_0 (z = 0) = 2.726 \text{ K}$  (Mather *et al.* 1994).

La evolución de la temperatura del gas  $T_g$  es gobernada por la ecuación (ver Puy *et al.* 1993; Palla *et al.* 1995)

$$\frac{dT_g}{dt} = -\frac{2T_g}{R} \frac{dR}{dt} + \frac{2}{3kn} [(\Gamma - \Lambda)_{Compton} + (\Gamma - \Lambda)_{mol}]. \quad (43)$$

El primer término representa el enfriamiento adiabático asociado con la expansión del Universo, donde  $R$  es el factor de escala. Los otros dos términos representan respectivamente la transferencia de energía neta desde la CMBR



al gas (por unidad de tiempo y por unidad de volumen) vía la dispersión de Compton de fotones CMBR sobre electrones

$$(\Gamma - \Lambda)_{Compton} = \frac{4k\sigma_T a n_c T_r^4 (T_r - T_g)}{m_e c}, \quad (44)$$

y por medio de excitación y desexcitación de transiciones moleculares

$$(\Gamma - \Lambda)_{mol} = \sum_k n_k \sum_{i>j} (x_i C_{ij} - x_j C_{ji}) h\nu_{ij}, \quad (45)$$

donde  $C_{ij}$  y  $C_{ji}$  son los coeficientes de excitación y desexcitación colisional y  $x_i$  son las fracciones de población. La función de transferencia de energía  $(\Gamma - \Lambda)_{mol}$  puede convertirse en una fuente efectiva de calentamiento ó enfriamiento para el gas, si la razón de desexcitación colisional de los niveles molecular ro vibracional es más rápida ó lenta que su decaimiento radiativo (ver Khersonskii 1986, Puy *et al.* 1993). En general, la contribución de moléculas al calentamiento-enfriamiento del gas es muy pequeño en el gas cosmológico homogéneo, pero empieza a tomar un papel importante durante los procesos de formación (colapso) de primeros objetos.

La ecuación general que describe a la temperatura del gas  $T_g$ , puede reescribirse de una manera más particular

$$\frac{dT_g}{dt} = -2T_g H_0 (1+z) \sqrt{1 + \Omega_0 z} + \frac{8\sigma_T a_b T_r^4}{3m_e c} x_e (T_r - T_g) + \left( \frac{dT_g}{dt} \right)_{mol} \quad (46)$$

donde en el primer término, que está relacionado con la expansión del Universo, se tiene que  $T_g$  es la temperatura del gas, en el segundo que se debe a la dispersión de Thomson, el término  $c$  es la velocidad de la luz,  $m_e$  es la masa del electrón,  $x_e$  es la abundancia de los electrones, y el tercer término es el cambio de la temperatura cinética debido a las moléculas primordiales:

$$\left(\frac{dT_g}{dt}\right)_{mol} = \frac{2(\Gamma_{mol} - \Lambda_{mol})}{3nk} + \frac{\Theta_{ch}}{3nk} + \frac{2T_g}{3n\left(\frac{dn}{dt}\right)_{ch}}. \quad (47)$$

En la última ecuación  $\Gamma_{mol}$  y  $\Lambda_{mol}$  son funciones de calentamiento y enfriamiento respectivamente,  $\Theta_{ch}$  es la función de calentamiento y enfriamiento debido a reacciones químicas que tienen entalpía  $\Delta H_k$ , por lo tanto tenemos para  $\Theta$ :

$$\Theta_{ch} = \sum_m R_{ijk} n_i n_j \Delta H_m, \quad (48)$$

donde se suma sobre todas las reacciones químicas.

El multiplicador  $(dn/dt)_{ch}$  que entra en el último término de la ecuación (47) es el cambio de densidad del gas primordial para reacciones químicas que cambian la abundancia total (por ejemplo  $A+B \rightarrow C$ , o  $A+B \rightarrow C+D+E$ ).

La ecuación (46) se puede obtener directamente de la relación

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{2}{3n} \frac{dn}{dt} + \text{otras fuentes de temperatura} \quad (49)$$

donde

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dt} = -3H_0(1+z)\sqrt{1+\Omega_0 z} + \frac{1}{n} \left(\frac{dn}{dt}\right)_{ch}. \quad (50)$$

es el cambio de la densidad con el tiempo debido a la expansión del Universo y a las reacciones químicas (segundo término).

La solución a las ecuaciones (41), (46) y  $T_r = T_0(1+z)$  proporciona la respuesta al problema del cálculo de la abundancia de moléculas cosmológicas como función de  $z$ . Sin embargo, presenta el inconveniente del gran tiempo

de cómputo que se requiere para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales rígidas (41).

### 4.3 Los Cálculos

Se han hecho los cálculos para un Universo con parámetros  $\Omega_0 = 1$ ,  $\Omega_b = 0.1$ ,  $H_0 = 65 [km] [s^{-1} Mpc^{-1}]$ , con  $\rho_{tot} = \Omega_b \rho_{cr}$ , donde  $\rho_{cr} = 9.19 \times 10^{-6} h^2 [cm^{-3}]$  es la densidad crítica. Las velocidades de las reacciones  $R_{ijk}$  y  $R_{ij}$  que entran en la ecuación (41) están dadas por la expresión:

$$R_{ij} = R_{ijk} = \gamma \left( \frac{T}{300} \right)^\alpha \exp \left[ -\frac{\beta}{T} \right], \quad (51)$$

donde los parámetros  $\gamma$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros de los que dependen las velocidades de reacción (Puy D., Signore M., 2001) y se presentan en las tablas A5, A6 y A7 para el hidrógeno, carbón y oxígeno respectivamente.  $T$  es la temperatura cinética  $T_g$  para el caso de  $R_{ijk}$  (reacciones de choques) y es igual a la temperatura de radiación para el caso de  $R_{ij}$  (procesos radiativos). La inscripción  $a(b)$  en las tablas, significa  $a$  multiplicado por 10 a la potencia  $b$ , el término *dex* en las tablas, equivale a escribir la base 10 y las iniciales LTE, indican un equilibrio térmico durante el proceso de la reacción.

Debe enfatizarse, que los términos que aparecen en las ecuaciones (47) y (50), y que dan el cambio de la temperatura cinética debido a procesos químicos (aquellos que tienen subíndice *ch*), sólo son significativos para especies abundantes (tales como  $H_2$  y  $HD$ ). Para las especies que se calculan en este trabajo ( $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$ ,  $OH^+$ , ) los términos que aparecen en el lado derecho de la ecuación (47) son pequeños (debido a que sus abundancias



son pequeñas) y por lo tanto pueden ser ignorados. En tal caso se pueden utilizar los resultados para las funciones de enfriamiento y calentamiento correspondientes a especies ligeras.

Para estos cálculos se utilizan valores iniciales para  $H$  y  $He$ , con abundancias que están de acuerdo con el modelo estándar (vea por ejemplo Smith M.S., Kawano L.H., Malaney R.A., 1993) y no se consideran elementos como el  $D$  y el  $Li$  porque por un lado, no participan en la formación de las moléculas que se están considerando (como  $CH$ ,  $CH^+$ ,  $OH$ ,  $OH^+$  y otras más complejas), ni tampoco en la formación del hidrógeno molecular. Por otro lado, las abundancias moleculares basadas en el deuterio y el litio merecen su propia investigación y existe un buen número de trabajos donde ya han sido tratados (ver, por ejemplo Galli D., Palla F. 1998, y referencias allí contenidas).

De cualquier forma, el helio sí debe ser incluido en los cálculos, porque la molécula  $HeH^+$  resulta ser muy importante en la formación del hidrógeno molecular  $H_2$ , mediante cadenas de reacciones tales como:  $HeH^+ + H \rightarrow H_2^+ + He$ ;  $H_2^+ + H \rightarrow H^+ + H_2$ .

Los parámetros de los procesos elementales (velocidades) para las reacciones moleculares están dados en la Tabla A5 para el hidrógeno y el helio (todas las reacciones de la Tabla A5 se utilizan para calcular las abundancias de las moléculas basadas en el carbón y el oxígeno, pero con la adición de las velocidades que están en las tablas A6 y A7). Para formar el juego de reacciones contenidas en la Tabla A5, se utilizan los datos más recientes (ver la cita en la última columna).



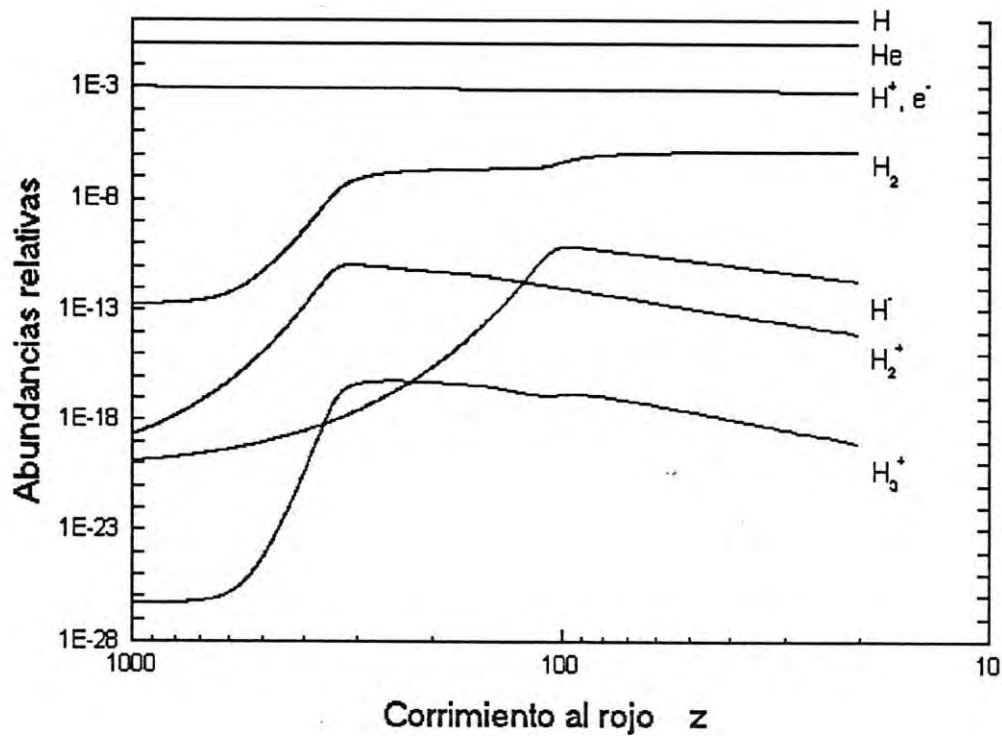


Figure 4: *Resultados de cálculos de abundancias relativas de las moléculas en un Universo temprano, según el modelo estándar.*

Los resultados de la solución numérica al problema de las abundancias moleculares en un Universo temprano, planteado anteriormente, se pueden ver en la Fig. 4. Primeramente se han hecho cálculos para probar el método numérico y el programa que resuelve un sistema de ecuaciones de cinética molecular, con un ejemplo bien conocido, antes de aplicarlo a los cálculos de mayor relevancia para este trabajo. Por otro lado, estos cálculos tienen un interés científico, porque al usar datos más recientes y confiables para describir

los procesos elementales, podríamos encontrar diferencias entre nuestros resultados y los que han sido previamente reportados por otros investigadores. Después de inspeccionar las curvas de abundancias, encontramos que nuestros resultados son muy parecidos a los de otros autores (Galli D., Palla F. 1998), para las especies más importantes ( $H_2$ ,  $H^-$ ,  $H_2^+$ ,  $H_3^+$ ...). Con lo cual puede concluirse que los resultados con parámetros más recientes para secciones transversales y velocidades de reacción no muestran cambios significativos para los cálculos a bajas temperaturas ( $T_g < 1000 K$ ) prevalecen épocas pregalácticas con  $z < 400$ .

El resultado del cálculo de las abundancias de  $CH$  y  $CH^+$  se puede ver en la figura 5. El cálculo se hizo utilizando los parámetros de procesos elementales dados en las tablas A5 y A6 para hidrógeno con helio y carbón (De Bernardis P. *et al.* 2000, Jaffe A. *et al.* 2000, Burles S., Nollett K., Turner M. 2000, respectivamente). La tabla A6, incluye a moléculas y iones más complejos, tales como  $CH_2$ ,  $CH_2^+$ . Con el propósito de explorar que moléculas son relevantes, también se incluyeron a la lista especies tales como  $CH_n$ ,  $CH_n^+$ ,  $C_2$ ,  $C_2^+$ , etc., pero todas las especies complejas resultan tener abundancias relativas tan pequeñas, que no es necesario seguir considerándolas dentro del juego de reacciones.

La figura 5 muestra una abundancia relativa de  $CH$  bastante grande ( $[CH]/[H] \approx 10^{-15}$ ). Pero recordemos que los cálculos fueron hechos con un parámetro inicial  $[C]/[H] = 10^{-10}$ , mientras que el valor que nos permite aceptar la teoría de NBBN es de hasta  $10^{-9}$ . Por lo que dicha abundancia pudiera llegar a ser  $[CH]/[H] \approx 10^{-14}$  para el gas homogéneo. Pero dentro de un protoobjeto, donde la densidad del gas es mucho mayor, la cinética



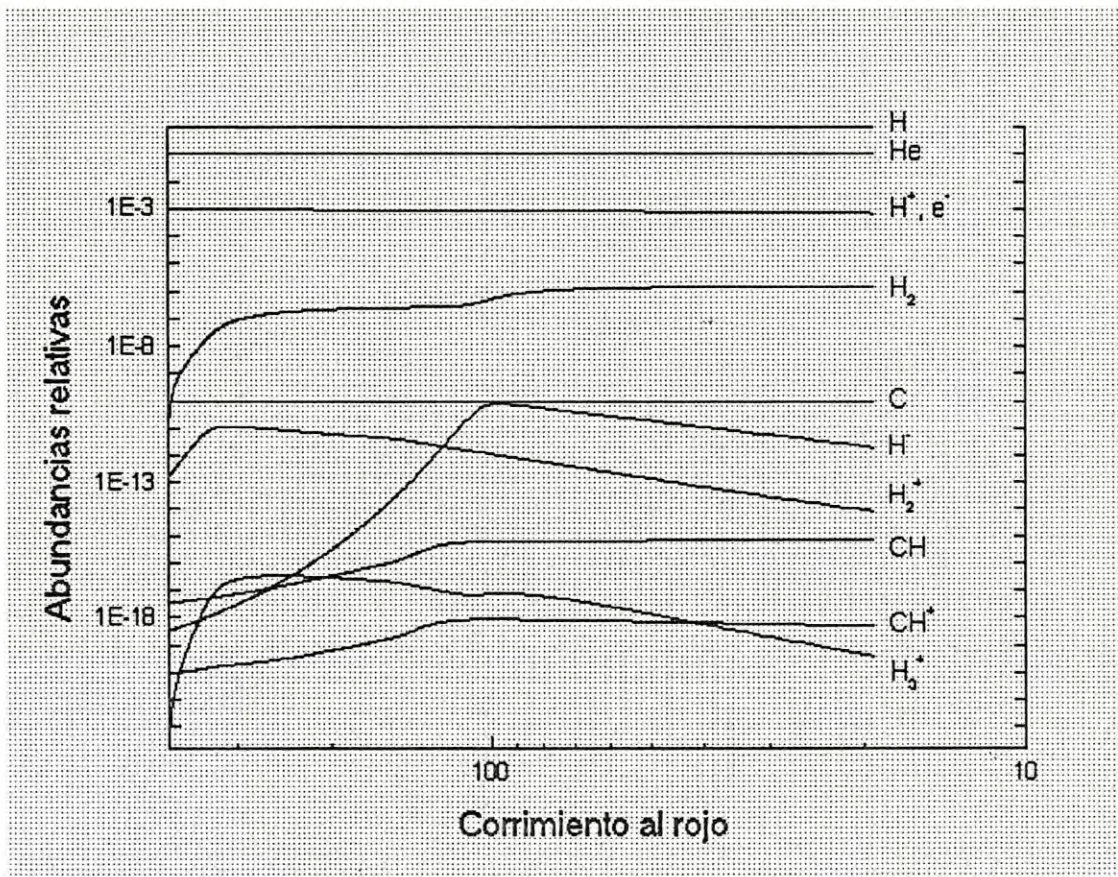


Figure 5: *Resultados de cálculos de abundancias relativas de CH y CH<sup>+</sup> como función del corrimiento al rojo z, según un modelo no estándar.*



molecular debe cambiar y puede esperarse que la abundancia molecular que entra en la expresión de la profundidad óptica de un protoobjeto vaya a tener un valor aún mayor y nuestro resultado en este caso es una estimación a un valor mínimo (límite inferior).

Como puede observarse en las tablas A6 y A7, el número de reacciones para carbón y oxígeno son 24 y 20 respectivamente. El método y el programa no tienen ninguna restricción para el número de especies o el de las reacciones. Tampoco existen restricciones relacionadas con el tiempo de cálculo. Pero como no existe necesidad de encontrar abundancias para especies complejas, por ser tan pequeñas y de poco interés para este estudio, se puede reducir la tabla A6 y dejar sólo las reacciones más importantes. En nuestro caso las especies de mayor interés son  $C$ ,  $C^+$ ,  $CH$  y  $CH^+$ . También es útil encontrar los canales más esenciales de formación y destrucción de dichas especies. El hacer este ejercicio resulta ser muy valioso, a la hora de analizar e interpretar más fácilmente los resultados de los cálculos. Al juego mínimo le pedimos que nos de un error no mayor a 1 - 5 % del valor exacto. Juegos mínimos se ofrecen en Galli D., Palla F. 1998. En esta parte del trabajo se discutirá la cinética de las moléculas diatómicas para el carbón y el oxígeno.

El juego mínimo para el carbón se compone de las 8 reacciones representadas en la figura 6. La notación  $A(B, C)D$  denota a una reacción  $A + B \rightarrow C + D$  (tal como se usa comúnmente en física nuclear), donde las especies  $A$  y  $D$  son las de mayor interés en nuestro caso, por contener al carbón. En esta figura únicamente se incluyen los canales más rápidos y fuertes, que están controlando (definen) las abundancias relativas de  $C$ ,  $C^+$ ,  $CH$  y  $CH^+$ .

Para poder comparar las velocidades, tenemos que fijar la temperatura. Re-

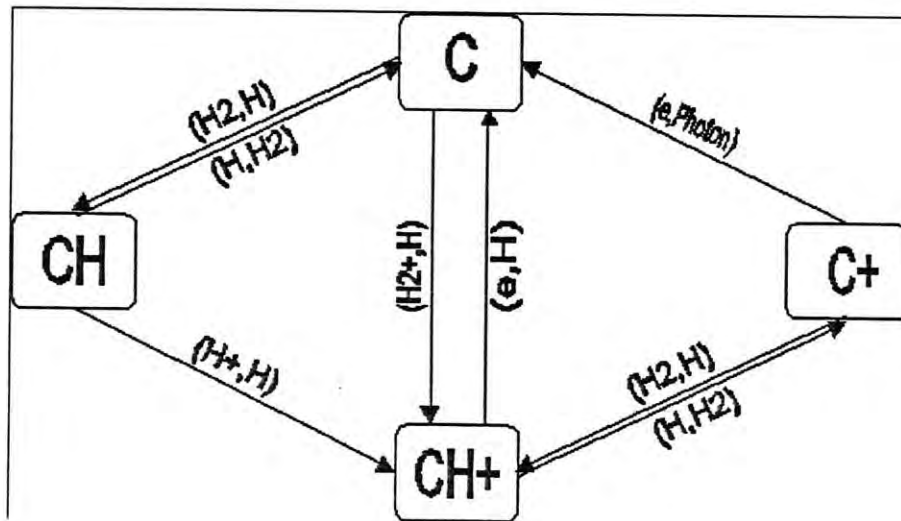


Figure 6: Modelo mínimo para describir la química del Carbón.

sulta ser más comodo tomar  $T_g = 300K$ , que corresponde a  $z \approx 100$ . Se puede ver que el canal de formación de  $CH$  es una reacción  $C(H_2, H)CH$  que en nuestro caso tiene (para  $z \approx 100$ ) la velocidad total  $[C][H_2]R_{C,H_2,CH} = 10^{-10}10^{-6}10^{-9} = 10^{-25}cm^3s^{-1}$ , donde  $[X]$  es la abundancia de la especie  $X$  relativa al hidrógeno. La molécula  $CH$  se destruye más rápidamente mediante su reacción inversa  $CH(H, H_2)C$  que tiene la velocidad total  $[CH][H] \times R_{CH,H,C} = 10^{-15}10^{-9} = 10^{-24}cm^3s^{-1}$ .

La formación de  $CH^+$  es debida a dos canales competitivos:  $CH(H^+, H)CH^+$  con la velocidad total  $[CH][H^+]R_{CH,H^+,CH^+} = 10^{-27}cm^3s^{-1}$ , y  $C(H_2^+, H)CH^+$  con velocidad  $[C][H_2^+]R_{C,H_2^+,CH^+} = 2 \times 10^{-30}cm^3s^{-1}$  (tenemos que considerar este canal, porque la primer reacción depende de  $[CH]$  y, por lo tanto de  $z$ ).

Es muy importante enfatizar que no existe una reacción inversa para  $CH(H^+, H)CH^+$ . Como explicaron en (Karpas Z., Anicich V., Huntress W.T., 1979), esta reacción no fue detectada con un valor de velocidad menor a  $10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$  (y la velocidad del proceso directo es  $R_{CH, H^+, CH^+} = 10^{-9}$ ). Por lo tanto, podemos concluir que existen tres ciclos de flujo para el carbón:

- 1)  $C \rightarrow CH \rightarrow C$ ,
- 2)  $C \rightarrow CH \rightarrow CH^+ \rightarrow C$ , y
- 3)  $C \rightarrow CH \rightarrow CH^+ \rightarrow C^+ \rightarrow C$ .

Como veremos más adelante, para el caso del oxígeno el resultado es completamente similar y no conduce a cambios evidentes, cuando la abundancia de  $OH^+$  es mayor que la de  $OH$ .

La química molecular del oxígeno aplicado al Universo temprano, fue discutido por primera vez por Dubrovich V.K., 1996 para el caso de la molécula de  $H_2O$ . Esta molécula es muy estable (el potencial de ionización es igual a 12.6 eV y su energía de disociación es igual a 2 eV, tal que  $E_d \ll E_{ioniz}$ ) y por lo tanto, como fue mencionado en el artículo de Dubrovich, podría esperarse que su abundancia relativa fuera bastante grande en el caso NBBN, o después de la evolución de las primeras estrellas, cuando la densidad de carbón, oxígeno y nitrógeno aumentaron considerablemente. Por lo tanto, los cálculos de cinética de las moléculas basadas en oxígeno son de gran interés.

En esta sección del trabajo se calcularon las abundancias de  $OH$ ,  $OH^+$ ,  $H_2O$ ,  $H_2O^+$  utilizando los parámetros de las tablas A5 y A7. Como para el caso del carbón, para el oxígeno también fueron consideradas moléculas y iones más complejos, pero los cálculos muestran que las abundancias de especies complejas son insignificantes y por esta razón se han ignorado.



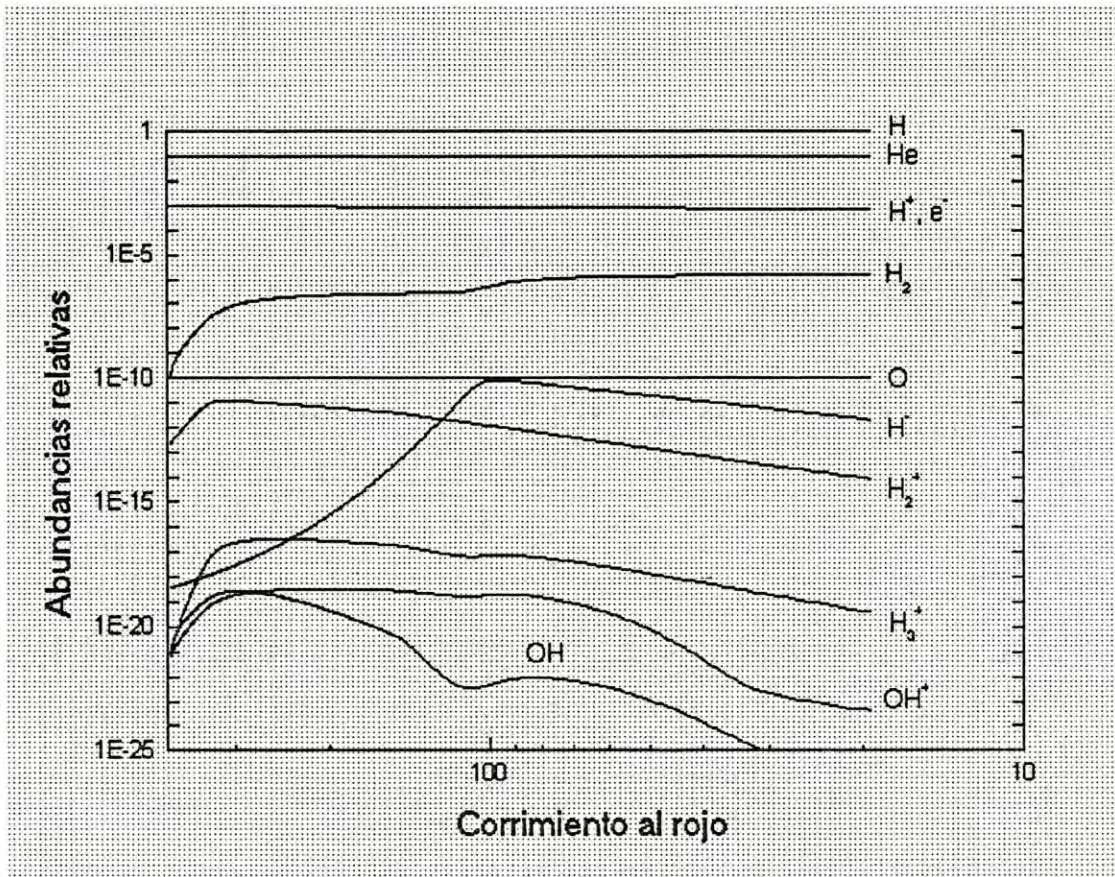


Figure 7: *Resultados de cálculos de abundancias relativas de OH y OH<sup>+</sup> como función del corrimiento al rojo z, según un modelo no estándar.*

La figura 7 muestra las abundancias de OH y OH<sup>+</sup> como función de z. No incluimos en la figura las abundancias calculadas para H<sub>2</sub>O, porque resultaron ser insignificantes (alcanzan un valor máximo en z = 290, como [H<sub>2</sub>O]/[H] = 10<sup>-27</sup>, y después se destruyen rápidamente hasta llegar a un valor inferior a 10<sup>-30</sup> para z < 30).

Puede observarse que las moléculas o iones moleculares que forma el

oxígeno en un Universo homogéneo con abundancias significativas son el  $OH$  y el  $OH^+$ . La abundancia de  $OH^+$  es  $10^{-18}$  en la época de  $z = 200$ , y mientras que la molécula  $OH$  tiene un valor de aproximadamente tres órdenes de magnitud más pequeño.

Este resultado no es tan extraño como pudiera parecer a primera vista. De hecho, la pareja de moléculas  $LiH$  y  $LiH^+$  muestra un comportamiento muy similar. Como comentan en Galli D., Palla F. 1998, la cinética del litio conduce a una abundancia del ion molecular  $LiH^+$  que resulta ser más de dos órdenes de magnitud superior que la abundancia de la molécula neutra  $LiH$ .

Es fácil explicar este resultado con la ayuda de un modelo (juego mínimo) compuesto de manera similar al que hemos hecho para el carbón. En la tabla 11 tenemos 20 reacciones para la cinética molecular del oxígeno, pero por ahora consideraremos sólo las 9 reacciones más importantes que se muestran en la figura 8.

Para comparar las velocidades, tal como se hizo en el caso anterior se fija la temperatura cinética  $T_c = 300K$ . En este caso el canal de formación de  $OH$  es una reacción  $O(H_2, H)OH$  (tal como teníamos para  $CH$ ) con la velocidad total  $[O][H_2]R_{O,H_2,OH} = 10^{-10}10^{-6}10^{-13} = 10^{-29}[cm^3s^{-1}]$  (nótese que esta es cuatro ordenes de magnitud más pequeña que para el caso de la reacción  $C(H_2, H)CH$ ).

La molécula  $OH$  se destruye más rápidamente debido al proceso  $OH(H^+, H)OH^+$ , con velocidad total  $[OH][H^+]R_{OH,H^+,OH^+} = 10^{-21}10^{-32} \times 10^{-9} =$



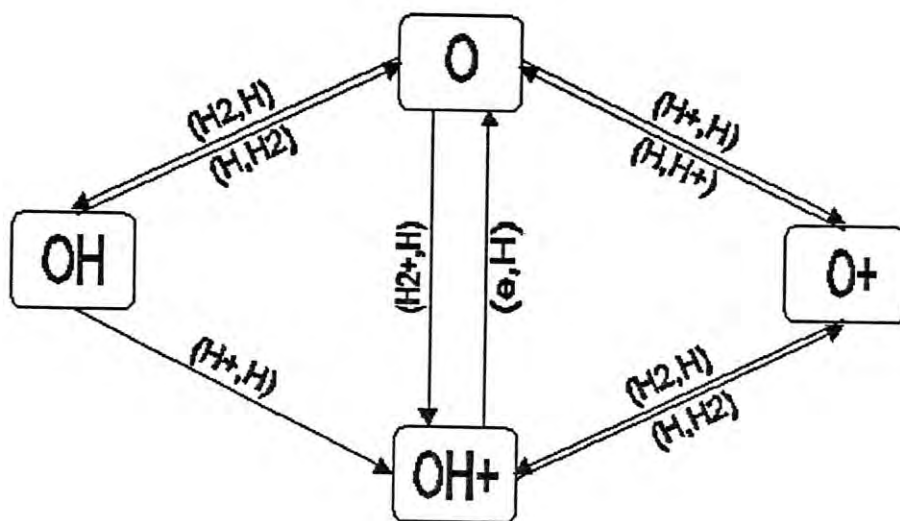


Figure 8: Modelo mínimo para describir la química del Oxígeno.

$2 \times 10^{-33} [cm^3 s^{-1}]$ . Y el canal  $OH(H, H_2)O$  es más débil, como por 4 órdenes de magnitud en comparación con el caso del carbón (el cual tiene la velocidad total  $[OH][H]R_{OH,H,O} = 10^{-21} 7 \times 10^{-14} = 7 \times 10^{-35} [cm^3 s^{-1}]$ ).

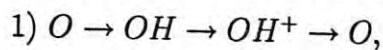
El ion molecular  $OH^+$  está formado por dos canales competitivos. El canal más fuerte es  $O(H_2^+, H)OH^+$  con velocidad  $[O][H_2^+]R_{O,H_2^+,OH^+} = 10^{-31} [cm^3 s^{-1}]$ , y el más débil es  $OH(H^+, H)OH^+$  con la velocidad total  $[OH][H^+]R_{OH,H^+,OH^+} = 2 \times 10^{-33} [cm^3 s^{-1}]$ . Como se ha hecho para el caso de CH, se tiene que tomar en consideración el primer canal.

La destrucción de  $OH^+$  se debe a los canales  $OH^+(H, H_2)O^+$  y  $OH^+(e^-, H)O$ , que tienen velocidades aproximadamente iguales, con un valor de  $10^{-27} [cm^3 s^{-1}]$ . Como se encontró para la cinética del carbón, en el caso del oxígeno tampoco existe la reacción inversa para  $OH(H^+, H)OH^+$ . Esto



puede explicarse de la siguiente manera: usando el principio de balance detallado para los valores de procesos elementales y tomando en cuenta que las velocidades de las reacciones  $CH \rightarrow CH^+$  y  $OH \rightarrow OH^+$  son iguales, se puede concluir que la velocidad del proceso  $OH^+(H, H^+)OH$  es también menor que  $10^{-11} [cm^3 s^{-1}]$  (como se explica en el artículo de Karpas Z., Anich V., Huntress W.T., 1979) para la reacción  $CH^+(H, H^+)CH$ ). Este valor proporciona una velocidad total menor que  $10^{-29} cm^3 s^{-1}$  para el proceso  $OH^+(H, H^+)OH$ , comparándolo con el valor  $10^{-27}$  para  $OH^+ \rightarrow O$  y  $OH^+ \rightarrow O^+$ , determinamos que es insignificante.

Por lo tanto concluimos que existe una diferencia entre la cinética del carbón y del oxígeno. En el caso del oxígeno tenemos dos ciclos de flujos:



De la cinética del oxígeno se concluye que la abundancia de  $OH^+$  está controlada por las reacciones  $OH^+ \rightarrow O \rightarrow OH^+$  con este resultado se pueden explicar los resultados para el oxígeno (que  $OH$  sea mucho menor que  $OH^+$ ).

Para concluir esta sección, tenemos que enfatizar que el juego mínimo ofrecido en las figuras 6 y 7 se puede aplicar sólo para un Universo temprano y homogéneo.

## 5 La Formación de los Primeros Objetos

### 5.1 Introducción

Después de llevarse a cabo los experimentos de los satélites COBE y COBRA, ha quedado claro que un número grande de modelos cosmológicos alternativos están en contradicción con los datos observacionales, y solamente el modelo Big Bang de la evolución del Universo debe ser considerado, debido a que este modelo satisface los resultados de mediciones de las fluctuaciones espaciales de la radiación de fondo cósmica (CMBR). Por esta razón, el estudio de posibles efectos observacionales en el marco de trabajo del modelo del Big Bang se hacen de un interés particular.

El importante papel que en dichos efectos deben jugar las moléculas primordiales, respecto a dos puntos de vista observaciones posibles, y su influencia sobre la evolución del Universo en épocas de  $z < 300$ .

La investigación de la química de las moléculas primordiales en la época de la post recombinación fue iniciada con los artículos de Saslaw W., Zipoy D. (1967), Lepp S., Shull M. (1984), Dalgarno A., Lepp S., *Astrochemistry IAU Symp. 118* (1987), Black J., (1998). En los últimos años se ha legado un gran progreso en la investigación de la química primordial en diferentes contextos y aplicaciones, especialmente para protoobjetos.

La posibilidad de observación directa de los protoobjetos remotos en épocas de  $z > 20$  en líneas moleculares, ha sido mencionado en algunas discusiones recientes (Dubrovich V.K. 1994, De Bernardis P. *et al.* 1993,

Signore M. *et al.* 1994). Por un lado, el interés en este problema se debe a la posibilidad de determinar por este medio las abundancias primordiales de especies clave como el litio o el deuterio y consecuentemente, obtener nuevas restricciones a modelos de nucleosíntesis primordial. Por otro lado, esto es estimulado por la gran importancia que se atribuye a datos concernientes a la evolución del Universo en épocas lejanas, que ha conducido a la distribución de materia observable en el tiempo presente. En este caso, el problema de la influencia de moléculas primarias sobre el enfriamiento de los protoobjetos y, de ahí su evolución, es de carácter fundamental. Sin embargo, es especialmente interesante, el que las moléculas estén interactuando con la radiación de fondo de microondas cósmica (CMBR) en su estructura ro-vibracional (ro, es la abreviatura de rotacional, y el término completo de estructura ro-vibracional se refiere a una estructura de niveles vibracionales, donde ellos a su vez contienen niveles rotacionales) que permite observar los protoobjetos en líneas de las moléculas mencionadas arriba.

Como regla, dentro del marco de trabajo del modelo Estándar de Nucleosíntesis del Big Bang (SBBN), las siguientes moléculas primordiales son de importancia:  $H_2$ ,  $H_2^+$ ,  $H_3^+$ ,  $HD$ ,  $HD^+$ ,  $H_2D^+$ ,  $HeH^+$ ,  $LiH$ ,  $LiH^+$ . Las posibles pruebas observacionales para estas moléculas ya han sido discutidas en varios trabajos (ver por ejemplo los trabajos de Dubrovich V.K., (1997), Signore M. *et al.* 1994). Se han hecho algunos intentos para detectar la emisión de los protoobjetos con grandes corrimientos al rojo, en líneas rotacionales de la molécula  $LiH$  (De Bernardis P. *et al.* 1993). Sin embargo, recientemente este problema ha ganado un valor especial. Este hecho no sólo se debe al considerable incremento de la sensibilidad de las técnicas observacionales, sino también tiene que ver con un mejor entendimiento de la física de estos objetos, lo cual nos ofrece nuevos y más confiables métodos para la



detección de protoobjetos en las líneas moleculares. Alguno de estos nuevos efectos físicos se basan en la ausencia de equilibrio en marcos en reposo del protoobjeto moviéndose y que ocurren en fluorescencia de radiación fuera de equilibrio por las moléculas (Dubrovich V.K. 1994).

Por otro lado, es muy importante que las mediciones recientes de CMBR desde BOOMERANG y MAXIMA (De Bernardis P. *et al.* 2000, Jaffe A. *et al.* 2000) apuntan a favor de un nuevo valor de la cantidad adimensional de densidad bariónica  $\Omega_b$ . Este nuevo dato, brinda la oportunidad de considerar un número de modelos NBBN (Burles S., Nollett K., Turner M. 2000). Existen varios modelos NBBN que sugieren abundancias primordiales considerables de carbón, nitrógeno y oxígeno. Por esta razón, es de gran importancia investigar la posibilidad de detectar la emisión de los protoobjetos en líneas de las moléculas basadas en elementos pesados primordiales (estas moléculas son:  $CH$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ , ...).

En más corto rango de longitud de onda, es posible observar las líneas moleculares emitidas en las épocas de  $z = 20 - 50$  por otro tipo de objetos. Estas observaciones, impondrían restricciones importantes al enriquecimiento del gas primordial por los elementos pesados como productos de evolución de primeras estrellas en estas épocas.

Este capítulo está basado en los resultados originales del trabajo de Lipovka, Saucedo, Campos, Soto (2001).

En la sección 5.2, consideramos la formación de protoobjetos en los cuales se analizan sus parámetros importantes, como lo es su época de formación, masa de Jeans y otros. Además, se destaca la importancia de esas investigaciones.

En la sección 5.3, se muestran algunas investigaciones respecto a la estructura rotacional de la molécula  $CH$ .

## 5.2 Protoobjetos

El interés en objetos pequeños con masa promedio de  $M < 10^{10} M_{\odot}$ , se debe a su papel en la formación de la estructura moderna de distribución de materia y particularidades de su evolución. En cosmología estándar, las fluctuaciones primarias de densidad de materia se dividen en adiabáticas y entrópicas. En las adiabáticas, tanto la componente bariónica como la fotonica son perturbadas. Durante el período anterior a la recombinación del hidrógeno en  $z = 1400$ , su evolución dependía fuertemente de la escala. Por esta razón, escalas de  $M < 10^{12} M_{\odot}$  prácticamente desaparecieron y sólo quedaron fluctuaciones entrópicas que corresponden a la perturbación de la componente bariónica. La evolución de estas fluctuaciones es casi independiente del momento de recombinación, y son estas fluctuaciones entrópicas las que se manifiestan a escalas pequeñas. El espectro de masa de estos objetos es interesante, debido a que fue formado en el período del Universo lejano e incluye información acerca de parámetros fundamentales de sobredensidad de materia. Después de la recombinación, la masa de Jeans (masa de inicio de colapso) llega a un valor alrededor de  $10^5 M_{\odot}$  y esto permite el inicio del colapso de protoobjetos con masas relativamente pequeñas de altos corrimientos al rojo. Esto esencialmente refleja el tamaño de la amplitud de las fluctuaciones del espectro de escala (SSF). El espectro de fluctuaciones primordiales  $\Delta\rho_0$  a escalas pequeñas esta dado por

$$\frac{\Delta\rho_0}{\rho_0} = \left(\frac{M}{M_*}\right)^{-\frac{1}{2} + \frac{n}{6}} (1+z)^{-1}, \quad (52)$$

donde  $n$  es el parámetro del modelo,  $M$  es la masa de la protonube y  $M_* = 10^{15} M_\odot$  (Puy D., 2000). En Gott III R.J., Ress M.J., (1975) se consideraron las condiciones que hacen  $n = 1$ . Este modelo es el que fue utilizado en los cálculos del espectro de masas de los protoobjetos en el artículo de Puy D. & Signore M. (1996). Como fue demostrado por los autores, de acuerdo con el escenario cosmológico estándar, los primeros protoobjetos comenzaron a formarse en épocas  $50 < z < 500$ . La información sobre el espectro de masa es de particular importancia para reconstruir la historia del Universo en épocas muy tempranas, debido a que ellas contienen impresas las condiciones físicas que tuvieron lugar en la materia de alta densidad. Por otro lado, estos objetos con masas de  $M < 10^{10} M_\odot$  (protonubes, protogalaxias y protoestrellas), son los responsables de la formación de estructura a escala observable. Las masas de estos objetos dependen del corrimiento al rojo en la época en que ellos se enlazaron gravitacionalmente, o más estrictamente hablando; cuando la expansión de Hubble fue compensada por la contracción. El corrimiento al rojo alrededor de esta época está dado por la expresión (Puy D., 2000):

$$z_{ta} = \left(\frac{3\pi}{4}\right)^{-\frac{2}{3}} \left(\frac{M}{M_*}\right)^{\left(-\frac{1}{2} + \frac{n}{6}\right)}. \quad (53)$$

Esta dependencia se presenta con mayor detalle en la tabla 5, en la que uno puede observar para diferentes corrimientos, la masa relativa de los objetos, radio  $R$ , concentración  $N$  y temperatura  $T_g$ , cuando la expansión de Hubble es compensada por su misma gravedad, es decir; se detiene el incremento y los objetos comienzan a colapsar (Puy D., Signore M. 1996).



Tabla 5. El corrimiento al rojo  $z$  y los parámetros físicos de los protoobjetos en inicio de su colapso.

Formación de protoobjetos				
$z$	$M (M_{\odot})$	$R (10^{20} \text{cm.})$	$N (\text{cm}^{-3})$	$T_g (k)$
564	$10^6$	1	281	4496
261	$10^7$	4.6	28.1	1536
121	$10^8$	21.6	2.81	447
56	$10^9$	100	0.28	119

Por lo tanto, de acuerdo con los cálculos, objetos caracterizados por valores de la masa  $M = 10^6 M_{\odot}$  en  $z = 260$ . Aproximadamente al mismo tiempo ( $z < 400$  de acuerdo con la ecuación de Saha) inicia la creación de moléculas. Las abundancias relativas del conjunto estándar de moléculas formadas por  $H$ ,  $D$ ,  $He$ ,  $Li$ , han sido discutidas por diversos autores (ver por ejemplo Puy D. *et al.* 1993, Latter W., Black J. 1991, Galli D., Palla F. 1998 y referencias mencionadas en el capítulo 3 de esta tesis). Sin embargo, todos estos cálculos fueron hechos para medios homogéneos en equilibrio, mientras que para las relativamente más altas concentraciones y temperaturas, existentes en protoobjetos, podrían incrementarse las tasas de formación de moléculas, e incrementar significativamente la profundidad óptica en las líneas ro-vibracionales de las moléculas a las que nos estamos refiriendo.

Las moléculas con momento dipolar grande son particularmente interesantes en astrofísica, debido a las altas probabilidades de detección. Algunas de las propiedades de estas moléculas se presentan en la tabla 6.

Tabla 6.

Propiedades de moléculas con altas probabilidades de detección					
Propiedades	<i>LiH</i>	<i>HD</i> <sup>+</sup>	<i>HeH</i> <sup>+</sup>	<i>H<sub>2</sub>D</i> <sup>+</sup>	<sup>12</sup> <i>CH</i>
$D_e$ (eV)	2.43	2.67	1.85	4.3	3.47
$z_{form}$	195	210	150	340	100
$\lambda_r$ ( $\mu m$ )	676	227	149	1920	561 y 149
$\lambda_v$ ( $\mu m$ )	7.1	3.0	3.3	4.5	

Como se mencionó anteriormente, en el caso de modelos NBBN, es factible la presencia de altas abundancias de nitrógeno primordial, carbón y oxígeno (arriba de  $10^{-9}$  Rauscher T., Applegate J.H., Cowan J.J., Thielemann F.K., WiescherH. 1994).

En este caso, moléculas tales como *CH*, *OH*, *H<sub>2</sub>O*, *OH*<sup>+</sup>, etc. tienen que formarse en cantidades importantes en épocas con corrimiento al rojo de  $z < 300$ . Por esta razón, la investigación de estas moléculas en los protoobjetos es de particular importancia. Si ellas pudieran detectarse, o al menos pudiera medirse el límite de abundancia obtenida, sería posible no sólo restringir la variedad de los modelos NBBN, sino también estimar el espectro de masa de los primeros objetos, sus parámetros físicos y época de formación.

En la tabla 7, se presentan las abundancias relativas calculadas para varias moléculas de interés observacional. Los cálculos fueron hechos para protoobjetos localizados en  $z = 100$  y para diferentes temperaturas cinéticas. Para calcular estos datos, hemos considerado las abundancias relativas de oxígeno y carbón como sigue:  $[O]/[H] = [C]/[H] = 10^{-10}$  y la concentración de gas en la nube, aproximadamente de  $1 - 10 \text{ cm}^{-3}$ .

Tabla 7. Abundancias calculadas para varias moléculas en  $z = 100$ , para diferentes temperaturas cinéticas de los protoobjetos

$z = 100$		
$T_{\kappa}(K)$	300	100
$OH$	$10^{-18}$	$10^{-13}$
$H_2O$	$10^{-22}$	$10^{-16}$
$CH$	$10^{-14}$	$10^{-17}$

Como ya se ha hecho mención, la emisión que estamos discutiendo acerca de la posible formación de protoobjetos, se debe a la interacción de las moléculas primordiales con la radiación de fondo de microondas cósmica CMBR con sus líneas moleculares. La intensidad de la radiación se determina en este caso, por el grado de desviación del espectro de cuerpo negro de la CMBR en el marco de referencia en reposo de la protonube, y por la abundancia de moléculas. Esto resulta ser interesante, por las posibles observaciones de la amplificación de líneas observadas debido a fluorescencia, ya que en este caso el valor de  $\Delta T/T$  podría incrementarse de 3 - 5 órdenes de magnitud con respecto a una dispersión simple en la línea (Dubrovich V.K., 1997).

Recientemente, la fluorescencia de fotones fuera de equilibrio de CMBR en la estructura ro vibracional del ion molecular  $H_2D^+$  en la época de reionización fue considerada en Dubrovich V.K., Lipovka A.A., (1995). Para el caso de abundancias significativas de oxígeno y carbón en protoobjetos, la fluorescencia puede permitir una significativa (para observaciones) emisión en líneas de moléculas  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ , etc.. Por ejemplo, en el caso de abundancia relativa de carbón  $[C]/[H] = 10^{-10}$  (esto es de acuerdo con diferentes modelos de NBBN), para protoobjetos, nosotros obtenemos  $[CH]/[H] = 10^{-14}$ ,  $\Delta T/T = 10^{-5}$  y el ancho de la línea es  $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-5}$ . La longitud de onda



para la primer transición vibracional de la molécula  $CH$  en el tiempo presente es  $\lambda = 0.056(1+z)cm$ , y  $\lambda = 0.015(1+z)cm$ . Uno puede observar que para  $z = 100 - 200$  estas líneas podrían aparecer en la región de longitud de onda de  $cm$ .

### 5.3 Estimaciones

La profundidad óptica en la estructura rotacional de la molécula  $CH$  para un protoobjeto de tamaño  $L$  esta dada por

$$\tau_\nu(L) = \int \alpha_\nu(x)dx \approx \alpha_\nu L, \quad (54)$$

donde  $\alpha_\nu(x)$  es el coeficiente de absorción que para las transiciones rotacionales puras tiene la forma:

$$\alpha_\nu = \frac{\lambda^3 (2J' + 1)}{8\pi (2J + 1) V_T} N_J A_{J',J} (1 - e^{-h\nu/kT}). \quad (55)$$

En esta expresión,  $J'$  y  $J$  son los niveles rotacional superior e inferior,  $N_J$  es la abundancia de la molécula en el nivel  $J$ -ésimo,  $A_{J',J}$  es el coeficiente de Einstein para la transición correspondiente caracterizada por la longitud de onda  $\lambda$  o frecuencia  $\nu$ ;  $V_T$  es la velocidad térmica.

Considerando una transición de la banda  $(J'J) = (3/2 - 1/2)$  con  $\lambda = 149\mu m$  (ver la fig. 9) y el coeficiente de Einstein  $A_{J',J} = 2 \times 10^{-2} [s^{-1}]$ . En este caso, para una protonube con corrimiento al rojo  $z = 100$  uno puede obtener una estimación para el coeficiente de absorción de  $\alpha_\nu = 3.98 \times 10^{-14} N_J$ . En esta expresión  $N_J = n_J N_{tot} x_{mol}$ , donde  $n_J$  es la población del nivel  $J$ -ésimo;

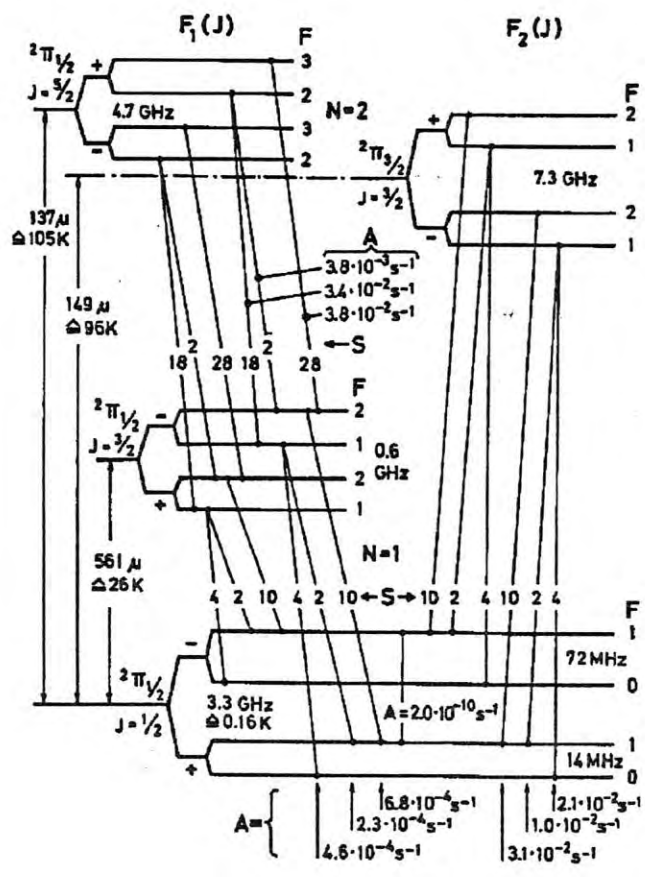


Figure 9: Estructura rotacional de la molécula CH (Rydbeck O.E.H. et al. 1976).

$N_{tot}$  es la densidad de la materia y  $x_{mol} = N_{mol}/N_{tot}$  es la abundancia relativa de la molécula. La fig. 5, que resulta de nuestros cálculos (Lipovka A., Saucedo J., Campos J., 2002), muestra una química estándar de helio y de hidrógeno con presencia de carbón primordial (la abundancia relativa de carbón fue tomada como  $10^{-10}$ ) para los corrimientos al rojo entre  $z = 400$  y  $z = 10$ . Uno puede observar una cantidad significativa de moléculas CH en  $z \approx 100$ . Tomando en cuenta la posibilidad de tener una abundancia relativa de carbón de  $10^{-9}$  (Rauscher T., Applegate J.H., Cowan J.J., Thielemann F.K., Wiescher H. 1994), uno puede aceptar  $x_{CH}(z = 100) \approx 10^{-14}$ . Usando parámetros del protoobjeto para este corrimiento calculado en el artículo (Puy D., Signore M. 1996):  $L \approx 1.3 \times 10^{21}[cm]$ , y  $N_{tot} \approx 10^4[cm^{-3}]$ , uno puede obtener la estimación para la profundidad óptica  $\tau \approx 5 \times 10^{-3}n_J$ . Usando esta estimación, podemos obtener para el contraste de la temperatura:  $\Delta T/T_{CMBR} = \tau V/c = 10^{-5}n_J$  (para el valor de  $V/c = 2 \times 10^{-3}$ , que corresponde a la cosmología estándar). La población  $n_J$ , puede calcularse para el caso fuera de equilibrio con el método sugerido en Lipovka A.A., (1995). Uno puede aceptar este valor como  $10^{-1}$ .

Pudiera haber sido forzado que este valor fuera obtenido bajo suposición de pura reflexión de CMBR en la estructura rotacional, y si consideramos la luminiscencia, el efecto debería ser de 3-4 órdenes de magnitud mayor (ver Dubrovich V.K., 1997).

Por otro lado, bajo las condiciones fuera de equilibrio y de alta densidad que acontecen en los protoobjetos, las moléculas pueden formarse más efectivamente, tal que uno puede suponer que la abundancia relativa de la molécula CH tiene el valor  $[CH]/[H] \approx [C]/[H] = 10^{-9}$  debido al gran potencial de



disociación de la molécula ( $E_D = 3.47eV$ ). Los efectos mencionados anteriormente sugieren que pueden alcanzar valores por arriba de  $\Delta T/T_{CMBR}$  de  $10^{-3} - 10^{-2}$  en la estructura rotacional de  $CH$  para el caso de NBBN, esto tendería a permanecer igual en el caso de SBBN, la posibilidad de detección de  $CH$  primordial es, sin embargo razonable.

Bandas a ser observadas: La molécula  $CH$  tiene dos bandas centradas en las longitudes de onda 0.561 mm y 0.149 mm. Para un protoobjeto con corrimiento al rojo  $z = 100$ , uno puede obtener para el centro de las bandas 5.61 cm y 1.5 cm respectivamente, y para  $z = 200$  nosotros tenemos 11.2 cm y 3 cm. Cada banda consiste de 6 líneas (ver fig. 9), lo que permite observar con un ancho de banda de aproximadamente 50 MHz.

El tamaño angular es (Sahni V., Starobinsky A., 1999):

$$\theta = \frac{H_0 L (1+z)}{c} \int [\Omega_m (1+z)^3 + \Omega_\Lambda^{-1/2}] dz \approx 1.1' L_{MPC} (1+z), \quad (56)$$

donde, si tomamos  $L_{MPC} = 3 \times 10^{-4}$  y  $z = 100$ , obtenemos un tamaño angular  $\theta = 2''$ . Pero para el grupo de estos objetos que tienen igual velocidades, uno puede obtener una estimación de  $\theta = 6'$ . La investigación de estos objetos es más conveniente (más fácil) en el polo galáctico, ya que ahí se reduce el ruido debido a fuentes galácticas.

## 5.4 Primeras Estrellas

Los ejemplos y estimaciones discutidos anteriormente, corresponden a objetos con corrimientos al rojo  $z = 100$ . Sin embargo, para épocas posteriores

de la evolución del Universo  $z = 50 - 20$ , las condiciones físicas en el gas ya no seguían siendo homogéneas ni estaban en cuasi-equilibrio, debido a que para este tiempo ya habían sido formadas las primeras estrellas.

Las moléculas primordiales pueden reemitir no solamente la peculiaridad de la CMBR, sino también; la radiación fuera de equilibrio de las primeras estrellas. Por otro lado, la evolución de las primeras estrellas ( $z = 20 - 50$ ) y la reionización del Universo conduce a una formación activa de las moléculas ( $CH, OH, H_2O, \dots$ ). Suponiendo que la inyección de materia por las primeras estrellas es pequeña (aproximadamente  $10^{-5} M_{\odot}$ ), la abundancia relativa de oxígeno y carbón puede llegar a ser de un orden de magnitud de  $10^{-9}$ , y entonces podemos decir que la profundidad óptica en líneas ro vibracionales es  $\tau \approx 1$ .

Aún considerando que el enriquecimiento de materia por elementos pesados debido a las primeras supernovas hubiera sido insignificante, sí fue de gran importancia la reionización de la mayor parte del hidrógeno primordial. En este caso, la abundancia de moléculas tales como  $H_2^+$ ,  $HeH^+$ , se podría incrementar y la temperatura del gas puede alcanzar un valor mayor que  $10^3 K$ . La molécula  $HeH^+$  tiene un momento dipolar grande, de tal manera que las primeras dos transiciones rotacionales podrían producir SSF a longitudes de onda  $\lambda_1 = 0.149(1+z)mm.$ ,  $\lambda_2 = 0.075(1+z)mm.$

Esta SSF podría reflejar la estructura inhomogénea a gran escala en la etapa no lineal de evolución. Los perfiles de líneas de  $HeH^+$  en este caso podrían conocerse mediante la distribución de velocidad del gas en proto-galaxias.

Como se observa, las longitudes de onda de líneas moleculares de interés, se encuentran en la región milimétrica (mm) del espectro, por lo que, es posible discutir acerca de observaciones con radiotelescopio de 30 m en IRAM, y elaborar proyectos para observaciones con el radiotelescopio de 50 m que se encuentra en construcción en México. Para concluir, podemos insistir que las radioobservaciones de las moléculas primordiales son de vital importancia para construir el modelo autoconsistente del Universo en Evolución, y es actualmente la única posibilidad para observar los protoobjetos (Lipovka A., Saucedo J., Campos J., Soto I., 2001).



## 6 Conclusiones

1) Para calcular las abundancias relativas de las especies más conocidas, se han utilizado los datos para velocidades de reacción más recientes. Se ha encontrado que a bajas temperaturas no hay un cambio significativo de las abundancias para las especies importantes y que nuestros resultados concuerdan con los de otros autores (fig. 4).

2) Se calculan por primera vez las abundancias de moléculas pesadas basadas en carbón y oxígeno que posiblemente se encuentren en cantidades significativas en la época pregaláctica debido a nucleosíntesis primordial no-estándar. Las abundancias se obtuvieron para un gas homogéneo en expansión, como solución a un conjunto de ecuaciones diferenciales (ecuaciones cinéticas para cada una de las especies en cuestión y ecuaciones para las temperaturas).

3) Las moléculas pesadas más abundantes (y por lo tanto más interesantes) en el Universo homogéneo, resultan ser:  $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$ ,  $OH^+$ . Las demás moléculas que se observan en el medio interestelar no resultaron tener abundancias significativas en dicho Universo.

4) La sugerencia de Dubrovich V.K., 1996 de que la molécula  $H_2O$  es muy abundante en relación con otras moléculas pesadas porque tiene una gran energía de disociación, resulta ser incorrecta para el caso del gas homogéneo en el Universo temprano. Encontramos que durante los procesos evolutivos estudiados no hay suficiente tiempo para formarlo en cantidades significativas y por lo tanto resultan ser más abundantes las moléculas que

tienen energías de amarre más pequeñas, como es el caso de las siguientes moléculas:  $CH$ ,  $OH$ ,  $CH^+$  y  $OH^+$ .

5) Encontramos que la abundancia del ion molecular  $OH^+$  es más grande que la abundancia de la molécula neutra  $OH$ . Este resultado se debe a dos factores. El primero, es que no existe (o si existe, es muy lenta) la reacción  $OH^+(H, H^+)OH$ . El segundo es que la reacción de formación de  $OH$  por medio de  $O(H_2, H)OH$ , es muy débil (cuatro órdenes de magnitud menor que la reacción  $CH^+(H, H^+)CH$  para el caso de carbón) y tiene una velocidad de  $10^{-13}$ . Por lo que es muy difícil formar a la molécula  $OH$  en el Universo temprano para el caso homogéneo.

6) Enfatizamos que en casos cuando existen inhomogeneidades en la densidad o en la temperatura de cualquier tipo (como es el caso de los protoobjetos), las abundancias moleculares deben ser mucho más grandes, y por lo tanto nuestros cálculos son un límite inferior para las abundancias en protonubes.

7) Si se tiene que para el caso de abundancias significativas de oxígeno y carbón en protoobjetos, la fluorescencia puede permitir una (para observaciones) emisión significativa en líneas de moléculas  $CH$ ,  $OH$ ,  $H_2O$ , etc.. Por ejemplo, en el caso de la abundancia relativa (para observaciones) de carbón  $\frac{[C]}{[H]} = 10^{-10}$ , esta puede producir (de acuerdo a diferentes modelos de NBBN) en protoobjetos una abundancia de  $\frac{[CH]}{[H]} = 10^{-14}$ . Aquí se obtiene una fluctuación de la temperatura de  $\frac{\Delta T}{T} = 10^{-5}$  y el ancho de línea  $\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = 10^{-5}$ .

## 7 Apéndice



Tabla A1. Reacciones para la química del hidrógeno y sus razones

N	reacción	razón( $cm^3 s^{-1}$ o $s^{-1}$ )	notas	ref.
H1)	$H^+ + e \rightarrow H + \gamma$	$R_{c2}$	ver texto	
H2)	$H + \gamma \rightarrow H^+ + e$	$R_{2c}$	ver texto	
H3)	$H + e \rightarrow H^- + \gamma$	$1.4 \times 10^{-18} T_g^{0.928} e^{-T_g/16200}$		
H4)	$H^- + \gamma \rightarrow H + e$	$1.1 \times 10^{-1} T_r^{2.13} e^{-8823/T_r}$		
H5)	$H^- + H \rightarrow H_2 + e$	$1.5 \times 10^{-9}$	$T_g \leq 300$	
		$4.0 \times 10^{-9} T_g^{-0.17}$	$T_g > 300$	
H6)	$H^- + H^+ \rightarrow H_2^+ + e$	$6.9 \times 10^{-9} T_g^{-0.35}$	$T_g \leq 8000$	
		$9.6 \times 10^{-7} T_g^{-0.9}$	$T_g > 8000$	
H7)	$H^- + H^+ \rightarrow 2H$	$5.7 \times 10^{-6} T_g^{-0.5} + 6.3 \times 10^{-9.2} \times 10^{-11} T_g^{0.5} + 4.4 \times 10^{-13} T_g$		
H8)	$H + H^+ \rightarrow H_2^+ + \gamma$	$dex\{-19.38 - 1.523 \log T + 1.118(\log T)^2 - 0.1269(\log T)^3\}$	$T_g < 32000$	
H9)	$H_2^+ + \gamma \rightarrow H + H^+$	$2.0 \times 10^1 T_r^{1.59} e^{-82000/T_r}$	$v = 0, \text{aprox}$	
		$1.63 \times 10^7 e^{-32400/T_r}$	LTE, aprox	
H10)	$H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	$6.4 \times 10^{-10}$		
H11)	$H_2^+ + e \rightarrow 2H$	$2.0 \times 10^{-7} T_g^{-0.5}$	$v = 0, \text{aprox}$	
H12)	$H_2^+ + \gamma \rightarrow 2H^+ + e$	$9.0 \times 10^1 T_r^{1.48} e^{-335000/T_r}$	aprox	
H13)	$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	$2.0 \times 10^{-9}$		
H14)	$H_2^+ + H \rightarrow H_3^+ + \gamma$	irrelevante		
H15)	$H_2 + H^+ \rightarrow H_2^+ + H$	$3.0 \times 10^{-10} e^{-21050/T_g}$	$T_g < 10000$	
		$1.5 \times 10^{-10} e^{-14000/T_g}$	$T_g > 10000$	
H16)	$H_2 + e \rightarrow H + H^-$	$2.7 \times 10^{-8} T_g^{-1.27} e^{-43000/T_g}$	$v = 0$	
H17)	$H_2 + e \rightarrow 2H + e$	$4.4 \times 10^{-10} T_g^{0.35} e^{-102000/T_g}$		
H18)	$H_2 + \gamma \rightarrow H_2^+ + e$	$2.9 \times 10^2 T_r^{1.56} e^{-178500/T_r}$		
H19)	$H_3^+ + H \rightarrow H_2^+ + H_2$	$7.7 \times 10^{-9} e^{-17560/T_g}$		
H20)	$H_3^+ + e \rightarrow H_2 + H$	$4.6 \times 10^{-6} T_g^{-0.65}$		
H21)	$H_2 + H^+ \rightarrow H_3^+ + \gamma$	$1.0 \times 10^{-16}$		
H22)	$H_3^+ + \gamma \rightarrow H_2^+ + H$	irrelevante		

Tabla A2. Reacciones para la química del deuterio y sus respectivas razones

N	reacción	razón ( $cm^3 s^{-1}$ o $s^{-1}$ )	notas
D1)	$D^+ + e \rightarrow D + \gamma$		
D2)	$D^+ \rightarrow D^+ + e$		
D3)	$D + H^+ \rightarrow D^+ + H$	$3.7 \times 10^{-10} T_g^{0.28} e^{-43/T_g}$	aprox
D4)	$D^+ + H \rightarrow D + H^+$	$3.7 \times 10^{-10} T_g^{0.28}$	aprox
D5)	$D + H \rightarrow HD + \gamma$	$1.0 \times 10^{-25}$	
D6)	$D + H_2 \rightarrow H + HD$	$9.0 \times 10^{-11} e^{-3876/T_g}$	$T_g > 250$
D7)	$HD^+ + H \rightarrow H^+ + HD$	mismo que para $H_2^+ + H$	
D8)	$D^+ + H_2 \rightarrow H^+ + HD$	$2.1 \times 10^{-9}$	
D9)	$HD + H \rightarrow H_2 + D$	$3.2 \times 10^{-11} e^{-3624/T_g}$	$T_g > 200$
D10)	$HD + H^+ \rightarrow H_2 + D^+$	$1.0 \times 10^{-9} e^{-464/T_g}$	
D11)	$HD + H_3^+ \rightarrow H_2 + H_2 D^+$	$(2.1 - 0.4 \log T_g) 10^{-9}$	aprox
D12)	$D + H^+ \rightarrow HD^+ + \gamma$	mismo que para $H^+ + H$	
D13)	$D^+ + H \rightarrow HD^+ + \gamma$	mismo que para $H^+ + H$	
D14)	$HD^+ + \gamma \rightarrow H + D^+$	mismo que para $H_2^+ + \gamma$	
D15)	$HD^+ + \gamma \rightarrow H^+ + D$	mismo que para $H_2^+ + \gamma$	
D16)	$HD^+ + e \rightarrow H + D$	$7.2 \times 10^{-8} T_g^{-0.5}$	aprox
D17)	$HD^+ + H_2 \rightarrow H_2 D^+ + H$	mismo que para $H_2^+ + H_2$	
D18)	$HD^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + D$	mismo que para $H_2^+ + H_2$	
D19)	$D + H_3^+ \rightarrow H_2 D^+ + H$	$2.0 \times 10^{-8} T_g^{-1}$	
D20)	$H_2 D^+ + e \rightarrow H + H + D$	$1.0 \times 10^{-6} T_g^{-0.5} \times 0.73$	
D21)	$H_2 D^+ + e \rightarrow H_2 + D$	$1.0 \times 10^{-6} T_g^{-0.5} \times 0.07$	
D22)	$H_2 D^+ + e \rightarrow HD + H$	$1.0 \times 10^{-6} T_g^{-0.5} \times 0.2$	
D23)	$H_2 D^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + HD$	$4.7 \times 10^{-9} e^{-215/T_g}$	$T_g < 100$
		$5.5 \times 10^{-10}$	$T_g > 100$
D24)	$H_2 D^+ + H \rightarrow H_3^+ + D$	$2.0 \times 10^{-8} T_g^{-1} e^{-632/T_g}$	

Tabla A3. Reacciones para la química del helio y sus razones

N	reacción	razón( $cm^3 s^{-1}$ o $s^{-1}$ )	notas
He1)	$He^{++} + e \rightarrow He^{+} +$	$1.891 \times 10^{-10} \left\{ \left( \frac{T_g}{9.37} \right)^{1/2} \left( 1 + \left( \frac{T_g}{9.37} \right)^{1/2} \right)^{0.2476} \right.$ $\left. \times \left( 1 + \left( \frac{T_g}{2.774 \times 10^6} \right)^{1/2} \right)^{1.7524} \right\}^{-1}$	$T_g > 8000$
He2)	$He^{+} + \rightarrow He^{++} + e$	$5.0 \times 10^1 T_r^{1.63} e^{-590000/T_r}$	
He3)	$He^{+} + e \rightarrow He +$	$3.294 \times 10^{-11} \left\{ \left( \frac{T_g}{15.54} \right)^{1/2} \left( 1 + \left( \frac{T_g}{15.54} \right)^{1/2} \right)^{0.309} \right.$ $\left. \times \left( 1 + \left( \frac{T_g}{2.676 \times 10^7} \right)^{1/2} \right)^{1.691} \right\}^{-1}$	$T_g > 8000$
He4)	$He + \gamma \rightarrow He^{+} + e$	$1.0 \times 10^4 T_r^{1.23} e^{-280000/T_r}$	aprox
He5)	$He + H^{+} \rightarrow He^{+} + H$	$4.0 \times 10^{-37} T_g^{4.74}$	$T_g > 8000$
He6)	$He^{+} + H \rightarrow He + H^{+}$	$3.7 \times 10^{-25} T_g^{2.06} [1 + 9.9e^{-T_g/2570}]$	$T_g > 6000$
He7)	$He + H^{+} \rightarrow HeH^{+} + \gamma$	$5.0 \times 10^{-21}$	
He8)	$He + H^{+} \rightarrow HeH^{+} + \gamma$	$7.6 \times 10^{-18} T_g^{-0.5}$	$T_g < 1000$
He9)	$He + H_2^{+} \rightarrow HeH^{+} + H$	$3.0 \times 10^{-10} e^{-6717/T_g}$	
He10)	$He^{+} + H \rightarrow HeH^{+} + \gamma$	$1.6 \times 10^{-14} T_g^{-0.33}$	$T_g < 4000$
He11)	$HeH^{+} + H \rightarrow He + H_2^{+}$	$9.0 \times 10^{-10}$	
He12)	$HeH^{+} + e \rightarrow He + H$	$1.7 \times 10^{-7} T_g^{-0.5}$	
He13)	$HeH^{+} + H_2 \rightarrow H_3^{+} + He$	$1.3 \times 10^{-9}$	
He14)	$HeH^{+} + \gamma \rightarrow He + H^{+}$	$6.8 \times 10^{-1} T_r^{1.5} e^{-22750/T_r}$	
He15)	$HeH^{+} + \gamma \rightarrow He^{+} + H$	$7.8 \times 10^3 T_r^{1.2} e^{-240000/T_r}$	



Tabla A4. Reacciones para la química del litio y sus razones

N	reacción	razón( $cm^3 s^{-1}$ o $s^{-1}$ )	notas
Li1)	$Li^+ + e \rightarrow Li + \gamma$	$1.036 \times 10^{-11} \left\{ \left( \frac{T_g}{107.7} \right)^{1/2} \left( 1 + \left( \frac{T_g}{107.7} \right)^{1/2} \right)^{0.612} \right.$ $\left. \times \left( 1 + \left( \frac{T_g}{1.177 \times 10^7} \right)^{1/2} \right)^{1.388} \right\}^{-1}$	$T_g > 8000$
Li2)	$Li + \gamma \rightarrow Li^+ + e$	$1.3 \times 10^3 T_r^{1.45} e^{-60500/T_r}$	
Li3)	$Li^+ + H^- \rightarrow Li + H$	$6.3 \times 10^{-6} T_g^{-0.5} - 7.6 \times 10^{-9} + 2.6 \times 10^{-10} T_g^{0.5}$	
Li4)	$Li^- + H^+ \rightarrow Li + H$	mismo que para $Li^+ + H^-$	
Li5)	$Li + e \rightarrow Li^- + \gamma$	$6.1 \times 10^{-17} T_g^{0.58} e^{-T_g/17200}$	
Li6)	$Li^- + \gamma \rightarrow Li + e$	$1.8 \times 10^2 T_r^{1.4} e^{-8100/T_r}$	aprox
Li7)	$Li + H^+ \rightarrow Li^+ + H$	$2.5 \times 10^{-40} T_g^{7.9} e^{-T_g/1210}$	
Li8)	$Li + H^+ \rightarrow Li^+ + H + \gamma$	$1.7 \times 10^{-13} T_g^{-0.051} e^{-T_g/282000}$	
Li9)	$Li(^2S) + H \rightarrow LiH +$	$(5.6 \times 10^{19} T_g^{-0.15} + 7.2 \times 10^{15} T_g^{1.21})$	
Li10)	$LiH + \gamma \rightarrow Li(^2S) + H$	$8.3 \times 10^4 T_r^{0.3} e^{-29000/T_r}$	
Li11)	$Li(^2P) + H \rightarrow LiH + \gamma$	$2.0 \times 10^{-16} T_g^{0.18} e^{-T_g/5100}$	
Li12)	$Li(^2P) + H \rightarrow LiH + \gamma$	$1.9 \times 10^{-14} T_g^{-0.34}$	
Li13)	$Li + H^- \rightarrow LiH + e$	$4.0 \times 10^{-10}$	
Li14)	$Li^- + H \rightarrow LiH + e$	$4.0 \times 10^{-10}$	
Li15)	$LiH^+ + H \rightarrow LiH + H^+$	$1.0 \times 10^{-11} e^{-67900/T_g}$	
Li16)	$LiH + H^+ \rightarrow LiH^+ + H$	$1.0 \times 10^{-9}$	
Li17)	$LiH + H \rightarrow Li + H_2$	$2.0 \times 10^{-11}$	
Li18)	$Li^+ + H \rightarrow LiH^+ +$	$\text{dex}(-22.4 + 0.999 \log T_g - 0.351(\log T_g)^2)$	
Li19)	$Li + H^+ \rightarrow LiH^+ +$	$4.8 \times 10^{-14} T_g^{-0.49}$	
Li20)	$LiH + H^+ \rightarrow LiH^+ + H$	$1.0 \times 10^{-9}$	
Li21)	$LiH + H^+ \rightarrow Li^+ + H_2$	$1.0 \times 10^{-9}$	
Li22)	$LiH^+ + e \rightarrow Li + H$	$3.8 \times 10^{-7} T_g^{-0.47}$	
Li23)	$LiH^+ + H \rightarrow Li + H_2^+$	$9.0 \times 10^{-10} e^{-66400/T_g}$	
Li24)	$LiH^+ + H \rightarrow Li^+ + H_2$	$3.0 \times 10^{-10}$	
Li25)	$LiH + \gamma \rightarrow Li^+ + H$	$7.0 \times 10^2 e^{-1900/T_g}$	
Li26)	$LiH + \gamma \rightarrow Li + H^+$	$3.35 \times 10^7 T_r e^{-97000/T_r}$	

Tabla A5. Parámetros importantes para las reacciones del hidrógeno

N	Reacción				$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta H$	Citas
1	H <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	H	$\nu$	3.61(-12)	-.75	.00		PH
2	H	e <sup>-</sup>	H <sup>-</sup>	$\nu$	3.00(-16)	1.00	.00		D
3	H	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$\nu$	1.80(-18)	1.5	.00		RP, SBD
4	H <sup>-</sup>	H <sup>+</sup>	H	H	2.30(-07)	-0.50	.00		PB
5	H <sup>-</sup>	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	8.83(-15)	-0.32	.00		PB
6	H <sup>-</sup>	H	H <sub>2</sub>	e <sup>-</sup>	1.50(-09)	.00	.00		LL
7	H <sub>2</sub>	e <sup>-</sup>	H	H	e- 1.11(-10)	0.50	139000.00		SD
8	H <sub>2</sub>	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	3.00(-10)	.00	21050.00	-1.827	HM
9	H <sub>2</sub>	H	H	H	H 1.16(-07)	-0.50	51944.00		
10	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	H	2.08(-09)	.00	.00	1.694	TH
11	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	H	H	1.68(-08)	-0.29	.00	10.947	SD
12	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	6.40(-10)	.00	.00	1.827	KA
13	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sup>-</sup>	H <sub>2</sub>	H	2.30(-07)	-0.50	.00		PH
14	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	H <sub>2</sub>	H	1.50(-07)	-.50	.00	9.252	TH
15	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	H	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	2.08(-09)	.00	19700.00	-1.694	SM
16	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$\nu$	H <sup>+</sup>	H	1.63(07)	.00	32400.0		ST
17	H <sup>-</sup>	$\nu$	H	e <sup>-</sup>	1.35(04)	2.4	8750.0		W
18	HE	H <sup>+</sup>	HEH <sup>+</sup>	$\nu$	1.00(-20)	.00	.00		KL
19	HEH <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	HE	H	2.00(-08)	-0.50	.00		YM
20	HEH <sup>+</sup>	H	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	HE	9.10(-10)	.00	.00		KA
21	HEH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	HE	1.26(-09)	.00	.00		O
22	HEH <sup>+</sup>	$\nu$	H <sup>+</sup>	HE	3.53(03)	1.5	22750.00		RD

PH: Prasad S. S., Huntress W. T., (1980); D: De Jong T., (1972); RP: Ramaker D. E., Peek J.M., (1976); SBD: Stancil P. C., Babb J. F., Dalgarno A., (1993); PB: Poulaert G., Brouillard F., (1978); LL: Launay J. M., Le Dourneuf M., (1991); SD: Schneider I. F., Dulieu O., (1994); HM: Holliday M. G., Muckerman J. T., (1971); TH: Theard L. P., Huntress W. T., (1974); KA: Karpas Z., Anicich V., (1979);

SM: Sundström G., Mowat J. R., (1994); ST: Sidhu K. S., Tennyson J., (1992);  
W: Wishart A. W., (1979); KL: Kimura M., Lane N. F., (1993); YM: Yousif F.  
B., Mitchell J. B. A., (1989); O: Orient O. J., (1997); RD: Roberge W., Dalgarno  
A., (1982).



Tabla A6. Parámetros importantes para las reacciones del carbón

N	Reacción			$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta H$
1	C	H	CH	$\nu$	1.00(-17)	.00	.00
2	C	H <sub>2</sub>	CH	H	1.16(-09)	.50	14100.00 -1.008
3	CH	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	H	2.38(-10)	.00	1760.00 -0.170
4	CH	H	C	H <sub>2</sub>	1.16(-09)	.50	2200.00 1.008
5	CH <sub>2</sub>	H	CH	H <sub>2</sub>	4.70(-10)	.00	370.00 .170
6	C <sup>+</sup>	H	CH <sup>+</sup>	$\nu$	7.00(-17)	.00	.00
7	C <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$\nu$	4.00(-16)	-.20	.00
8	C <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	CH <sup>+</sup>	H	1.50(-10)	.00	5000.00 -0.387
9	CH <sup>+</sup>	H	C <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	8.00(-10)	.00	.00 .387
10	CH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	1.20(-09)	.00	.00 .189
11	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	CH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.20(-09)	.00	2700.00 -0.189
12	H <sup>+</sup>	CH	CH <sup>+</sup>	H	1.90(-09)	.00	.00 2.956
13	H <sup>+</sup>	CH <sub>2</sub>	CH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.40(-09)	.00	.00 3.126
14	H <sup>+</sup>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	1.40(-09)	.00	.00 3.316
15	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	C	CH <sup>+</sup>	H	2.40(-09)	.00	.00 3.775
16	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	CH	CH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	7.10(-10)	.00	.00 4.783
17	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	CH	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H	7.10(-10)	.00	.00 4.972
18	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.00(-09)	.00	.00 5.143
19	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	C	CH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	2.00(-09)	.00	.00 2.081
20	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	CH	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.20(-09)	.00	.00 3.278
21	C <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	C	$\nu$	4.00(-12)	-.61	.00
22	CH <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	C	H	2.89(-07)	-.50	.00 7.172
23	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	CH	H	2.50(-07)	-.50	.00 5.974
24	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	C	H <sub>2</sub>	2.50(-07)	-.50	.00 6.982

Tabla A7. Parámetros importantes para las reacciones del oxígeno

N	Reaction				$\gamma$	$\alpha$	$\beta$	$\Delta H$
1	O	H <sub>2</sub>	OH	H	1.55(-13)	2.80	2980.00	-.082
2	OH	H	O	H <sub>2</sub>	7.00(-14)	2.80	1950.00	.082
3	OH	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	H	9.54(-13)	2.00	1490.00	.638
4	H <sub>2</sub> O	H	OH	H <sub>2</sub>	5.24(-12)	1.90	9265.00	-.638
5	O <sup>+</sup>	H	H <sup>+</sup>	O	6.00(-10)	.00	.00	.020
6	O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	OH <sup>+</sup>	H	1.20(-09)	.00	.00	.536
7	OH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H	1.01(-09)	.00	.00	1.026
8	OH <sup>+</sup>	H	O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.20(-09)	.00	4060.00	-.536
9	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O	8.20(-09)	.00	11460.00	-.987
10	H <sup>+</sup>	O	O <sup>+</sup>	H	6.00(-10)	.00	227.00	-.020
11	H <sup>+</sup>	OH	OH <sup>+</sup>	H	2.10(-09)	.00	.00	.599
12	H <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H	8.20(-09)	.00	.00	.987
13	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	O	OH <sup>+</sup>	H	1.50(-09)	.00	.00	2.344
14	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	OH	OH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	7.60(-10)	.00	.00	2.426
15	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	3.90(-09)	.00	.00	2.814
16	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	O	OH <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	8.00(-10)	.00	.00	.650
17	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	OH	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub>	1.30(-09)	.00	.00	1.758
18	O <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	O	$\nu$	3.40(-12)	-.63	.00	
19	OH <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	O	H	7.50(-08)	-.50	.00	8.603
20	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	e <sup>-</sup>	OH	H	4.00(-07)	-.50	.00	7.494

## 8 Referencias

- Acosta V., Cowan C., Graham B., "Curso de Física Moderna", Editorial Harla (1975).
- Bates D. R. y Massey H. S. W. (1954). *Phil Mag.*, **45**,111.
- Bieniek R. J. y Dalgarno A. (1979). *Ap. J.*, **228**, 635.
- Black J., "Molecular Astrophysics", Cam. Univ. Press (1998) p. 473.
- Bradley W. Carroll, Dale A. Ostlie. (1996). *Modern Astrophysics*, Addison Wesley.
- Bromm V., Coppi P.S., Larson R.B.,(2001), astro-Ph/0110459.
- Burles S., Nollett K., Turner M. (2000), astro-Ph/0008495.
- Carroll B.W., Ostlie D.A., "An Introduction to Modern Astrophysics", pag. 1221, (1996), Editorial Addison-Wesley.
- Dalgarno A., Lepp S.,(1987), *Astrochemistry IAU Symp.* 118 p. 109.
- De Bernardis P. et al. (1993), *Astron. Astrophys.* **271**, 683.
- De Bernardis P. et al. (2000), *Nature* **404**, 955.
- De Jong T., (1972), *Astron. Astroph.*, **20**, 263.
- Dubrovich V.K. (1994), *Astron. Astroph. Transactions* **5**, 57.
- Dubrovich V.K., (1996), *Proceeding of the IAU Symp. No. 178 (Leiden, The Netherlands)*.
- Dubrovich V.K.,(1997), *Astron. Astrophys.*, **324**, p. 27.
- Dubrovich V.K., Lipovka A.A.,(1995), *Astron. Astrophys.*, **296**, p.301.
- Galli D., Palla F. (1998), astro-Ph/9803315 V1.
- Gott III R.J., Ress M.J.,(1975), *Astron. Astrophys.*, **45**, p. 265.
- Gunn J., Peterson B. (1965), *ApJ.*, **142**, 1633.
- Haddock F., Sciama D.W. (1965), *Phys. Rev. Lett.*, **14**, 1007.
- Haywood S. E. y Delos J. B. (1990). *Chem. Phys.*, **145**, 253.



- Haiman Z., Thoul A.A., Loeb A. (1996), *ApJ.*, **464**, 523.
- Hartquist T., Williams D., "The Molecular Astrophysics of Stars and Galaxies", Clarendon Press Oxford, (1998).
- Hirasawa T., Aizu K., Taketani M. (1969), *Prog. Theor. Phys.*, **41**, 835.
- Holliday M.G., Muckerman J.T., Friedman L., (1971), *J. Chem. Phys.*, **54**, 1058.
- Jaffe A. et al. (2000), astro-Ph/0007333.
- Karpas Z., Anicich V., Huntress W.T., (1979), *J. Chem. Phys.*, **70**, 2877.
- Kennet R. Lang, "Astrophysical Formulae", Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, (1974).
- Kimura M., Lane N.F., Dalgarno A., Dixon R.G., (1993), *ApJ.*, **405**, 801.
- Latter W., Black J. (1991), *Ap. J.* **372**, 161.
- Launay J.M., Le Dourneuf M., Zeippen C.J., 1991, *Astron. Astroph.*, **252**, 842.
- Lee et al. (1996a), *A & AS*, **119**, 111.
- Lepp S., Shull M. (1984), *ApJ.*, **280**, 465.
- Le Teuff Y. H. et al. (2000). *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **146**, 157-168.
- Lipovka A.A., (1995), *Astronomy Reports*, **39**, 347.
- Lipovka A., Saucedo J., Campos J., Soto I., "Cosmological Chemistry and the Formation of the First Objects", Proceeding of the "Congreso Nacional de SMF" (2001), Kluwer Academic Publishing.
- Lipovka A., Saucedo J., Campos J., *Rev. Mex. Fís.* (2002), in press.
- Malney R.A., Mathews G.J. (1993), *Phys. Pep.*, **229**, 145.
- Matsuda T., Sato H., Takeda H. (1969), *Prog. Theor.*, **41**, 219.
- Orient O.J., (1997), *Chem. Phys. Lett.*, **52**, 264.
- Peebles P.J.E. (1966), *Phys. Rev. Lett.*, **16**, 410.
- Peebles P.J.E., Dicke R. (1968), *ApJ.*, **154**, 891.

Phillip C. Stancil et al. (2002), astro-ph/0201189 V1.

Poulaert G., Brouillard F., Claeys W., Mc Gowan J.W., Van Wassenhove G., (1978), J. Phys., **B 11**, L 671.

Prasad S.S., Huntress W.T., (1980), ApJS., **43**,1.

Puy D. et al. (1993) Astron. Astroph., **267**, 337.

Puy D., Signore M. (1996), Astron. Astroph., **305**, 371.

Puy D. (2000), astro-Ph/0011496.

Puy D., Signore M., (2001), astro-Ph/0101157.

Ramaker D.E., Peek J.M., (1976), Phys. Rev. **A 13**, 58.

Rauscher T., Applegate J.H., Cowan J.J., Thielemann F.K., Wiescher H. (1994), ApJ., **429**, 499-530.

Rawlings J. M. C., Drew J. E. y Barlow M. J., (1993). Mon Not. R. Astron. Soc., **265**, 968.

Roberge W., Dalgarno A., (1982), ApJ., **255**, 489.

Rydbeck O.E.H. et al. (1976), ApJ. Suppl. Ser. 31, 333-415.

Sahni V., Starobinsky A.,(1999), astro-Ph/9904398.

Santos M. R. et al. (2001), ph/0111467 V1.

Sarkar S.,(1996), Rept. Prog. Phys. **59**,1493.

Saslaw W., Zipoy D.,(1967), Nature **216**, 967.

Schneider I.F., Dulie O., Giusti-Suzor A., Roueff E., (1994), ApJ **424**,983 (errata in ApJ **486**, 580).

Sidhu K.S., Miller S., Tennyson J.,(1992), Astron. Astroph. **255**, 453.

Signore M. et al.,(1994), Ap. J Supp **92**, 535.

Silk J.,(1977), Ap. J. **211**, 638.

Smith M.S., Kawano L.H., Malaney R.A., (1993), ApJS **85**, 219.

Stancil P.C., Babb J.F., Dalgarno A., (1993), ApJ **414**, 672.

Stancil P. C. y Dalgarno A., (1997a). Ap. J., **479**, 543.

- Stancil P. C. y Dalgarno A., (1997b). *Ap. J.*, **490**.
- Stancil P., Lepp S., Dalgarno A., (1998), *Ap. J* **509**, 1.
- Sundstrom G., Mowat J.R., Danared H., et al., (1994), *Science* **263**, 785.
- Takayanagi K., Nishimura S. (1960). *Pub. Astr. Soc. Jap.* **12**, 77.
- Takeda H., Sato H., Matsuda T., (1969), *Prog. Theor. Phys.* **41** 840.
- Tegmark M. et al. (1997), *Ap. J* **474**, 1.
- Theard L.P., Huntress W.T., (1974), *J. Chem. Phys.* **60**, 2840.
- Von Busch F., Dunn G.H., (1972), *Phys. Rev.* **A5**, 1726.
- Wagoner R., Fowler W., Hoyle F., (1967), *Ap. J* **148**, 3.
- Wishart A.W., (1979), *MNRAS* **187**, 59.
- Yousif F.B., Mitchell J.B.A., (1989), *Phys. Rev.* **A 40**, 4318.
- Zwicky F., (1959), *PASP* **71**, 468.