
Química del universo

Javier R. Goicoechea y José Cernicharo

«Où finit le télescope, le microscope commence.
Lequel des deux a la vue la plus grande?»

VICTOR HUGO, *Les Misérables* (1862)

Materia: átomos y moléculas

¿De qué está compuesta la materia? ¿En qué se diferencia la materia animada y la inanimada? ¿Acaso no es igual el material de una montaña y el que orbita alrededor de un planeta en forma de anillo? ¿Qué significa que somos polvo de estrellas? ¿De dónde viene toda esta complejidad? ¿Por qué estamos en esta Tierra y alrededor de este Sol? ¿Quién más puede hacerse estas preguntas?

Empecemos por lo más pequeño. La conclusión de que el material más simple, las partículas «fundamentales» que forman el papel de esta revista, las rocas, las estrellas o a nosotros mismos son los átomos (del griego «indivisible»), es uno de los logros intelectuales más importantes del ser humano. El concepto de «átomo» comenzó a fraguarse en la antigua Grecia con Demócrito (siglo VI A.C.) y recibió su impulso formal definitivo con los trabajos de

John Dalton, Ernest Rutherford, Dmitri Mendeleev, Niels Bohr o Wolfgang Pauli entre otros (siglo XIX y principios del XX), que presentaron los primeros modelos teóricos y la primera clasificación o «tabla periódica» de los elementos químicos. En la actualidad conocemos 92 elementos químicos que se encuentran de forma natural en la Tierra, y otros tantos (hasta 117), los llamados «transuránicos», que pueden sintetizarse de forma artificial. Sus propiedades químicas, la forma en que los átomos se «enlazan» para formar moléculas o la forma en la que reaccionan y forman moléculas más complejas, depende únicamente de cómo se distribuye la «nube» de electrones alrededor de su núcleo atómico, formado por protones y neutrones.

Desde los estudios pioneros de Fred Hoyle, Willy Flower y Geoffrey y Margaret Burbidge en los años cincuenta del siglo XX, se sabe que toda la producción significativa de elementos químicos más pesados que el hidrógeno (del griego «engendrador de agua») y que el helio (del griego «Sol») tuvo un escenario muy distinto al de la nucleosíntesis primordial durante los tres primeros minutos del universo (mucho antes de que se formara la primera estrella del universo). En particular, el desarrollo de la física nuclear llevó a la teoría de la nucleosíntesis estelar (dentro de las estrellas) como marco general para la formación de elementos químicos pesados a partir de otros más ligeros. Es difícil hacer entender que *todos* los átomos *pesados* del universo, ya sean los que se encuentran en la atmósfera multicolor de Júpiter, aquellos presentes en la vecindad de un agujero negro o los de nuestra propia epidermis, *todos* se han formado mediante reacciones de fusión nuclear en el interior de las estrellas (carbono, oxígeno, nitrógeno, hierro, etc.) o en la explosión de una estrella muy masiva tipo «supernova» (para los elementos más pesados que el hierro).

Además, si las condiciones son favorables, los átomos se agregan y forman moléculas. De hecho, las moléculas son los «ladrillos»

con los que se construye la materia «ordinaria» dando lugar a la química, ya sea en la atmósfera gaseosa de la Tierra, en el agua líquida de los océanos, en el tubo de escape de un motor de combustión que libera contaminantes como el dióxido de carbono, o en forma de macromoléculas aún más complicadas como las proteínas en los seres vivos. La existencia de moléculas en estos entornos es hoy en día una evidencia casi intuitiva. Sin embargo, la presencia de moléculas más allá del sistema solar es prácticamente desconocida para el gran público, y paradójicamente fue un tema casi extravagante para los astrónomos de principios del siglo pasado.

Moléculas en el espacio

Hasta la fecha los astrónomos hemos detectado unas 160 moléculas diferentes en el espacio, formadas con los elementos químicos primordiales, aquellos sintetizados en los tres primeros minutos del universo (hidrógeno, helio, y trazas deuterio y litio) y sobre todo, con elementos más pesados sintetizados en el interior de las estrellas o en explosiones de supernovas (oxígeno, carbono, nitrógeno, silicio, fósforo, azufre, cloro...). Las moléculas se detectan en entornos muy diferentes, desde las fotosferas de las propias estrellas, incluida la de nuestro Sol (donde aunque parezca imposible hay monóxido de carbono y vapor de agua entre otras moléculas), hasta las gigantescas nubes de gas y polvo que forman los brazos espirales de nuestra galaxia. El estudio de la «luz» (los «fotones») que emite cada molécula al *rotar* o *vibrar*, su «espectro característico», nos proporciona una evidencia irrefutable de su presencia en el espacio, y una vasta información sobre las condiciones físicas y químicas de las regiones donde se detectan. Para ello «sólo» necesitamos telescopios de gran tamaño e instrumentos que puedan *descomponer* la radiación electromagnética (la «luz») en sus componen-

tes fundamentales. Igual que las gotas de agua descomponen los rayos del Sol en un arco iris de colores. Además de servir como herramienta de diagnóstico, analizando la química de cada región podemos estudiar la «historia» de cada objeto, qué edad tiene, cómo se formó, hacia dónde evoluciona, etc. Para ello, necesitamos comprender en detalle los procesos físicos y químicos microscópicos que tienen lugar en el gas y polvo interestelar: el material que existe «entre» las estrellas y que ha ido enriqueciéndose en elementos químicos por diferentes generaciones de estrellas. Estos procesos ocurren en condiciones físicas que generalmente resultan «exóticas» (bajísimas temperaturas, densidades y presiones) comparadas con las condiciones que se dan en el salón de nuestra casa. En general, los procesos químicos dominantes en el medio interestelar también son muy diferentes a los que ocurren en la superficie o en la atmósfera terrestre y su comprensión requiere estudios y herramientas especializadas, tanto teóricas como de laboratorio. De hecho, el desarrollo de la «astroquímica» impulsa y estimula nuevos estudios en una gran variedad de campos, que van desde la cosmología hasta la físico-química cuántica.

La mayor parte de la materia «ordinaria» del universo está «aglomerada» en forma de millones de galaxias, las cuales a su vez contienen otros tantos millones de estrellas y cuya emisión domina el aspecto del cielo nocturno a simple vista. Sin embargo, «entre» las estrellas existe una gran cantidad de materia mucho más fría (moléculas, polvo y hielos) a la que nuestros ojos no son directamente sensibles. En la Vía Láctea, nuestra galaxia, este componente «interestelar» aparece en forma de grandes «nubes moleculares» (con tamaños de varios años-luz) formadas por una colección de diversos *gases moleculares*: hidrógeno molecular (H_2), monóxido de carbono (CO), vapor de agua (H_2O), cianuro de hidrógeno (HCN), etc., y por partículas de polvo de pequeño tamaño (silicatos y también granos ricos en carbono). A pesar de que el polvo re-

presenta sólo el 1 por 100 del material interestelar en masa (el 99 por 100 está compuesto por gases), este material sólido tiene una importante relevancia astronómica, atenuando la luz «visible» que atraviesa el medio interestelar y «ocultando» la luz procedente de estrellas y galaxias. Además, la presencia de granos de polvo tiene una gran repercusión química como «catalizadores» o «aceleradores» de algunas reacciones químicas en su superficie.

Debido a la «atenuación» que provoca el polvo al absorber y dispersar la luz «visible», es prácticamente imposible observar todos los componentes de una galaxia con telescopios que sólo detectan la misma radiación electromagnética que nuestros ojos: la radiación «visible». Sólo los telescopios capaces de captar los fotones de menor energía, la radiación infrarroja y las radio ondas, por ejemplo, pueden detectar la luz «intrínseca» emitida por las moléculas y los granos de polvo, abriéndonos una nueva ventana a la observación del denominado universo «frío» y «molecular».

Pero seamos más concretos, ¿En qué regiones del universo encontramos moléculas? ¿Qué ocurrió en el universo primitivo para pasar de las nubes primordiales ricas en hidrógeno a nubes interestelares ricas en moléculas más complejas como las que observamos en la Vía Láctea? ¿Cómo se pueden formar moléculas en entornos tan adversos?

Empecemos por el principio. Las nubes moleculares del medio interestelar, con densidades que van desde las 100 a la 100.000 moléculas por centímetro cúbico y temperaturas que van desde los 10 a los 100 grados Kelvin (1 grado Kelvin son unos -273 grados Celsius) están formadas por muy diversas moléculas. La mayoría son moléculas de naturaleza «orgánica», es decir que contienen carbono. Muchas de ellas también se detectan en las envolturas circunestelares que forman las estrellas de «poca masa» como nuestro Sol en las últimas etapas de su «vida» y en los discos protoplanetarios alrededor de estrellas en formación.

Además de las 160 especies detectadas también se han observado los «isotopómeros» de muchas especies (p. ej., $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ o $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$), es decir moléculas que incluyen a los isótopos más raros de cada elemento químico según va variando el número de neutrones (^{13}C , ^{18}O , ^{33}S , ^{15}N , etc.).

Un mensaje importante: las moléculas detectadas en el espacio son, de momento, *simples*, al menos comparadas con las estructuras moleculares de los seres vivos (ácidos nucleídos, lípidos, etc.) o las que sintetizamos en la Tierra a nivel industrial (polímeros como los plásticos). Las detectadas en el espacio tienen entre 2 y 13 átomos (p. ej., CN es diatómica, CO_2 es triatómica y el benceno C_6H_6 tiene 12 átomos). Aproximadamente la mitad de las especies orgánicas detectadas son fácilmente sintetizables en laboratorios terrestres (etanol, metanol, formaldehído, etc.). La otra mitad son especies más «exóticas», como cationes, moléculas con carga eléctrica positiva (p. ej., H_3^+ , H_3O^+ , HCO^+); radicales (moléculas muy reactivas e inestables como HCO, OH o C_nH con n hasta 8); isómeros (mismos átomos pero diferentes estructuras, por ejemplo HNC y HCN); cadenas lineales (p. ej., HCCCN o C_5); anillos (p. ej., C_3H o C_3H_2); y sorprendentemente aniones moleculares con carga negativa (p. ej., C_6H^- o C_3N^-). También se detectan moléculas con elementos más pesados, con átomos de la segunda fila de la tabla periódica como el azufre (p. ej., SO, H_2S) o el silicio (p. ej., SiO, SiC_2), e incluso moléculas con «metales» (p. ej., KCl, AlF o NaCl, sí, sal común).

Nótese que los elementos «pesados» (oxígeno, carbono, nitrógeno...) sólo tienen una concentración del 0,1 por 100 respecto al hidrógeno (tanto en las estrellas como en las nubes interestelares). *Es con esta pequeña fracción de átomos «pesados» con la que se construye toda la complejidad química del universo, la vida en nuestro planeta, y quién sabe si en otros.* En cuanto a sus abundancias, el hidrógeno molecular (H_2) es obviamente la molécula más abundante, unas 10.000 veces más abundante que la siguiente molécula en abundancia, el mo-

nóxido de carbono. El resto de moléculas pueden considerarse como «trazas» en el sentido de que su abundancia respecto al H_2 es pequeña, entre cien mil veces y diez mil millones de veces menor. Aun así, la densidad de moléculas de una misma especie en una nube interestelar es enorme, ¡aproximadamente una molécula de CO por centímetro cúbico, pero eso sí, en nubes que pueden tener un tamaño de varios billones de kilómetros!

La naturaleza de las partículas de polvo es mucho menos clara. Debido a los fenómenos de dispersión, absorción y polarización que producen las partículas de polvo en la luz que recibimos de las estrellas, se sabe que los granos de polvo no son esféricos, que son probablemente muy porosos, y con tamaños que van desde menos de una millonésima de metro hasta varios metros de diámetro, como las rocas que componen los anillos de Saturno. Los granos interestelares suelen tener un interior compuesto por elementos refractarios como el silicio, aluminio o hierro, pero también se detectan elementos más ligeros como el carbono y el oxígeno. Además, en las regiones más densas y frías, las observaciones en el infrarrojo muestran la indiscutible presencia de hielos. Hoy en día sabemos que en estas regiones se condensan diferentes tipos de mantos de hielo en la superficie de los granos. Estos mantos están compuestos básicamente por hielo de agua, con trazas de hielo de monóxido de carbono, dióxido de carbono, amoníaco y metanol.

Además de las anteriores moléculas «simples», existe otro tipo de especie química a caballo entre las moléculas poliatómicas en fase gaseosa y los granos de polvo. Son los *hidrocarburos aromáticos policíclicos* (los «PAHs» por sus siglas en inglés). El descubrimiento de unas intensas bandas de emisión en regiones interestelares y nebulosidades brillantes iluminadas por intensos campos de radiación ultravioleta que coincidían con los modos de vibración de moléculas orgánicas aromáticas, llevó a los franceses Puget y Léger a postular que estas bandas estaban producidas por especies orgánicas

poliaromáticas, compuestas de varias unidades aromáticas (como el benceno) con decenas, tal vez centenas, de átomos de carbono. Curiosamente los PAH son muy comunes en la Tierra y aparecen en los derivados del petróleo como los alquitranes, en una llama, o en el humo de los cigarrillos. Debido a su alta concentración en el medio interestelar y en objetos del sistema solar, y a sus diversas geometrías y posibilidades funcionales, algunos investigadores sugieren que los PAH pudieron ser moléculas básicas en el origen de la vida (lo cual aún está por demostrar).

A principios del siglo pasado casi ningún astrónomo pensaba que las moléculas pudieran existir en las duras condiciones del espacio interestelar, «irradiado» por partículas y fotones de alta energía: radiación ultravioleta, rayos X, etc., y casi nadie pensaba que la química pudiera jugar algún papel relevante en la evolución de las galaxias y estrellas e incluso en la propia formación de sistemas planetarios, parecidos o no al nuestro. Un siglo después sabemos que las moléculas se detectan en casi todas las direcciones del universo donde la temperatura desciende por debajo de unos 2.000 grados y la densidad de partículas es suficientemente elevada para permitir que ciertas reacciones químicas puedan ocurrir. Las primeras moléculas fueron detectadas en las nubes del medio interestelar. Puesto que son estas nubes las que «colapsan» por acción de la gravedad para formar nuevas estrellas y sistemas planetarios, las moléculas y los granos de polvo que se detectan en estas regiones pueden eventualmente ser incorporadas a cuerpos sólidos como los cometas, los meteoritos e incluso los planetas. El estudio del ciclo del gas molecular y polvo en el universo es muy relevante porque nos permite responder a preguntas fundamentales: ¿comparten todos los sistemas planetarios una química similar a la del sistema solar? ¿Cómo se forman las moléculas más complejas? ¿Cuál es el límite de la complejidad química? ¿De dónde vino todo el agua que colma los océanos de la Tierra?

Efectivamente, se ha detectado una gran riqueza de compuestos químicos en los más variopintos entornos de la galaxia: en cometas, en los planetas del sistema solar y sus lunas, en el propio Sol, en los discos protoplanetarios alrededor de estrellas en formación, en nubes del medio interestelar, en explosiones de supernovas, en el núcleo de nuestra galaxia y así un largo etcétera. Los últimos objetos en unirse a la lista han sido las galaxias muy lejanas, cuando el universo era mucho más joven y los primeros átomos de carbono y oxígeno de la primera generación de estrellas empezaban a estar disponibles para formar moléculas, y también en las atmósferas de algunos exoplanetas que orbitan alrededor de estrellas diferentes al Sol y en los cuales la presencia de agua podría ser el primer paso para la aparición de la vida.

Astroquímica en acción

La astroquímica intenta comprender qué tipo de moléculas existen y qué reacciones químicas pueden ocurrir en las peculiares condiciones del medio interestelar y circunestelar (muy baja densidad y muy baja temperatura). El fin último es entender como han podido formarse las 160 especies detectadas hasta la fecha, predecir las que podríamos detectar en el futuro, y utilizarlas como herramienta para entender muchos y variados fenómenos astrofísicos, desde la formación de una estrella y su disco planetario hasta la identificación de «biotrazas» en las atmósferas de exoplanetas. A pesar de que aquí nos vamos a centrar fundamentalmente en las reacciones químicas que ocurren en fase gaseosa existe una notable excepción, la formación del hidrógeno molecular. Como hemos visto, el H_2 es de largo la molécula más abundante del universo. Sin embargo, en las condiciones típicas del medio interestelar su formación no puede darse en fase gaseosa ya que las reacciones quí-

micas posibles son altamente ineficaces y ninguna de ellas puede explicar su enorme abundancia.

Vayamos por partes. Los átomos de un gas de hidrógeno son un caso especial en el sentido de que a muy bajas temperaturas (menos de 20 grados Kelvin, unos -250 grados centígrados) pueden adsorberse («quedarse pegados») a la superficie de un sólido. Dependiendo de las propiedades químicas de la superficie, dos átomos «adsorbidos» de hidrógeno pueden «moverse», «encontrarse» y reaccionar químicamente utilizando la superficie del sólido como «catalizador» (para formar H_2 por ejemplo). Si recordamos que el 1 por 100 de la materia interestelar está formada por granos de polvo, aquí tenemos nuestra superficie «catalizadora». En experimentos de laboratorio se comprueba efectivamente como los átomos de hidrógeno que se depositan en la superficie de los granos de polvo a muy bajas temperaturas se evaporan y vuelven a la fase gaseosa en forma de H_2 al calentar la muestra por encima de unos pocos grados K. Es decir, en condiciones normales del medio interestelar, el hidrógeno molecular se forma eficientemente en la superficie de los granos de polvo.

Ahora que tenemos nuestra nube interestelar (H_2 , granos de polvo y átomos de oxígeno, carbono, nitrógeno, etc. en fase gaseosa) empezamos a preguntarnos cuáles son los tipos de reacciones químicas que intervienen en la construcción de la complejidad química observada. Sin entrar en detalle diremos que las reacciones químicas que juegan algún papel relevante en el gas interestelar son bimoleculares («a dos cuerpos») del tipo $A + B \rightarrow M + N$. En general, las «velocidades» de las reacciones químicas, la «velocidad» a la que se forman las especies «producto» (M y N) a partir de los «reactivos» (A y B), aumenta con la temperatura del gas. Este hecho es bastante intuitivo y puede comprobarse cuando en verano la «velocidad» de descomposición de la basura (los «olores») es mucho mayor que en invierno. Una forma obvia de «reducir» la

velocidad de estas reacciones químicas es guardar los alimentos en el congelador (a bajas temperaturas) para que la descomposición química sea más lenta. Por esta regla de tres, uno esperaría que la velocidad de las reacciones químicas en el medio interestelar, ¡con una temperatura unos pocos grados por encima del cero absoluto!, fuera prácticamente nula. ¿Cómo es posible que se formen moléculas a tan bajas temperaturas?

A mediados de los años setenta Eric Herbst, William Klemperer y Alexander Dalgarno entre otros establecieron la importancia de ciertas reacciones bimoleculares en el medio interestelar; son por ejemplo las denominadas reacciones «ión-neutro» ($A^+ + BC \rightarrow AB^+ + A$) y las «recombinaciones» con electrones ($ABC^+ + e^- \rightarrow BC + A$) en las que sorprendentemente la velocidad de reacción es inversamente proporcional a la temperatura del gas, ¡cuanto más frío está el gas son más rápidas! Nada que ver con la conservación de alimentos en el congelador.... El estudio de este tipo de reacciones químicas fue muy importante puesto que estableció las bases para comprender la formación de moléculas en las nubes del medio interestelar. La química basada en este tipo de reacciones es aun así ciertamente «lenta» (cientos de años), al menos comparada con la descomposición química de nuestro cubo de basura (algunos días), pero la evolución del universo es también muy lenta (miles de millones de años) y la intuición nos dice que tenemos tiempo suficiente para que la química interestelar avance. De hecho, cuando las moléculas se destruyen (se «fotodisocian») al absorber la radiación ultravioleta de una estrella cercana (como el ozono en las capas altas de nuestra atmósfera) es fácil calcular que aunque éste es un proceso de destrucción extremadamente «rápido», la vida media de una molécula en una nube interestelar es de unos 300 años antes de fotodisociarse, quizás mucho tiempo para nuestra ajetreada vida diaria, pero un «suspiro» para una nube que puede existir millones de años.

Hoy en día desarrollamos modelos computacionales específicos para simular la evolución química de objetos tan diferentes como regiones de formación estelar como la nebulosa de Orión o los discos de gas y polvo que se forman alrededor de las estrellas más jóvenes y donde tiene lugar la formación de pequeños planetas rocosos como la Tierra y gigantes planetas gaseosos como Júpiter. Gracias a estos modelos podemos comprender cómo se construye la complejidad química del universo, cómo se forman especies tan importantes como el agua, el metano, el amoníaco, y eventualmente aminoácidos sencillos como la glicina ($\text{C}_2\text{H}_5\text{NO}_2$), mucho más allá de los confines de nuestra galaxia. Muchas de estas moléculas tienen un carácter prebiótico, es decir, podrían eventualmente contribuir al surgimiento de la vida o estar más o menos relacionados con su origen. Aunque éste no es el fin último de la astroquímica, ésta sí nos ayuda a censar el contenido molecular del universo y a entender sus mecanismos de regulación. En los próximos años, los nuevos grandes telescopios terrestres y espaciales nos permitirán detectar diferentes especies químicas en las atmósferas de exoplanetas lejanos y detectar las primeras moléculas que se formaron en las galaxias más primitivas antes de que se formara la primera estrella del universo. La astroquímica es hoy en día una rama apasionante de la astronomía moderna, donde converge el conocimiento fundamental del microcosmos (los componentes fundamentales de la materia y sus interacciones físico-químicas), con el conocimiento del macrocosmos y la evolución de las grandes estructuras y objetos del universo en su conjunto. Quizás lo apasionante no sea que podamos detectar diferentes concentraciones de especies químicas en muy diversos entornos de la galaxia, sino lo parecida que es la química en todo el universo. Al fin y al cabo *somos polvo de estrellas*, sí, pero estamos capacitados para comprenderlas.

J.R.G y J. C.