# BÚSQUEDA Y ANÁLISIS ROTACIONAL DE METANOL

Identificación de moléculas prebióticas en objetos estelares jóvenes de tipo solar: metanol

Juan José Maldonado Portilla

Trabajo de Grado para Optar por el Título de Químico

Directora

Heidy Mayerly Quitián Lara

Doctora en Ciencias-Astronomía

Co-director

Enrique Mejía Ospino

Doctor en Ciencias Químicas

Universidad Industrial de Santander

Facultad de ciencias

Escuela de química

Programa de pregrado en química

Bucaramanga

2024

# Dedicatoria

A mi mamá y mi papá, que me apoyaron económicamente, emocionalmente, tuvieron paciencia conmigo durante todo este proceso y siempre estuvieron a mi lado.

# Agradecimientos

A Heidy Mayerly Quitián Lara, por su constante apoyo, guía, incontables enseñanzas, motivación, y sobre todo por darme esperanza de volver a creer en la ciencia.

Al profesor Enrique Mejía, por su prontitud al momento de darme asesoría, y por sus puntuales correcciones y comentarios.

A mis amigos, a mi familia por su comprensión, compañía en los momentos más difíciles y darme la confianza que necesitaba cuando más dudaba de mí.

Y finalmente a mí por no haberme rendido.

# Tabla de contenido

# Pág.

Introducción	9
1. Objetivos	. 14
1.1 Objetivo general:	. 14
1.2 Objetivos específicos:	. 14
2. Marco teórico	. 15
2.1 Nube molecular	. 15
2.2 Elementos y moléculas prebióticas	. 16
2.3 Formación de elementos en estrellas	. 18
2.4 Objetos estelares jóvenes (YSO – Young stellar objects)	. 20
2.4.1 Primer núcleo o primer núcleo hidrostático (FHSC-First Hydrostatic Core)	. 23
2.4.2 Fuente de química cálida de cadenas de carbono	. 23
2.4.3 Clase 0 y corinos calientes	. 24
2.5 Disco protoplanetario	. 24
2.6 Radioastronomía (Espectros de radio frecuencia)	. 26
2.7 Radio telescopio	. 28
2.8 Espectroscopía rotacional	. 31
2.9 Superficies de hielos	. 37
2.10 Metanol	. 39
3. Parte observacional	. 41
3.1 Adquisición rigurosa de datos y análisis en profundidad	. 41
3.2 Instalación y familiarización con el software CASSIS	. 41
4. Resultados	. 43
4.1 Asignación y anotación de líneas espectrales	. 43
4.2 Análisis estadístico de las poblaciones de líneas espectrales	. 46
4.3 Ecuación del diagrama rotacional	. 48
5. Discusión	. 51
5.1 Análisis del diagrama rotacional	. 51
5.2 Tendencias de temperatura:	. 57
5.3 Análisis comparativo	. 58
5.4 Discernimiento de la ruta de formación interestelar	. 60

6.	Conclusiones	66
7.	Recomendaciones	67
8.	Divulgación de resultados	69
Refe	erencias Bibliográficas	70

# Lista de Figuras

# Pág.

Figura 1 Imágenes de la Nube molecular Barnard 68. Izquierda: Espectro visible, tomada con el espectrógrafo	
FORS1 del Very Large Telescope (VLT). Centro: Infrarrojo cercano, tomada con el espectrógrafo SOFI, del New	
Technology Telescope (NTT). Derecha: Contornos de la emisión de CO, tomada con el Submillimeter Wave	
Astronomy Satellite (SWAS). Fuente: ESO.org	15
Figura 2 diagrama Hertzprung-Russell tomado de https://astronomy.swin.edu.au/cosmos/h/hertzsprung-	
russell+diagram	19
Figura 3 Ilustración de las clases evolutivas de los objetos estelares jóvenes, tomada de	
http://www.reinervogel.net/index_e.html?/YSO/YSO_e.html	21
Figura 4 Ilustración tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Protoplanetary_disk#/media/File:Soot-line1.jpg para	
visualización del concepto de disco protoplanetario	25
Figura 5 Telescopio IRAM 30m imagen tomada de https://iram-institute.org/observatories/30-meter-telescope/	29
Figura 6 A la izquierda, transiciones de Etanolamina en la nube molecular G+0.693–0.027, a la derecha el	
diagrama rotacional de la Etanolamina tomado de Discovery in space of ethanolamine, the simplest phospholipid	
head group de Víctor M. Rivilla https://doi.or	32
Figura 7 Hielos astrofísicos tomados de https://www.astrochem.org/sci/Master_Residues.php	37
Figura 8 archivos de uso libre .fits trabajados	43
Figura 9 Primer paso al abrir el software CASSIS	43
Figura 10 Parámetros previos al tratamiento de señales	44
Figura 11 Vista de la ventana de espectros rotacionales	44
Figura 12 Demostración base polinomial en el Software CASSIS	45
Figura 13 Demostración línea Gaussiana en el software CASSIS	45
Figura 14 Ejemplo señal de ruido alto en el software CASSIS	46
Figura 15 Líneas guardadas, previo al filtro realizado	47
Figura 16 Opción de diagrama rotacional dentro del software CASSIS	49
Figura 17 Diagrama rotacional graficado	49
Figura 18 Diagrama rotacional del metanol en la fuente Barnard 1	52
Figura 19 Diagrama rotacional del metanol en la fuente L1527	54
Figura 20 Diagrama rotacional del metanol en la fuente NGC 1333 - IRAS4A	55

#### Resumen

Título: Identificación de moléculas prebióticas en objetos estelares jóvenes de tipo solar: metanol\*

Autor: Maldonado Portilla, Juan José\*\*

Palabras Clave: Astroquímica, Metanol, Protoestrellas, Radioastronomía.

**Descripción:** El metanol, un alcohol simple compuesto por átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno, desempeña un papel crucial en el estudio de la química del medio interestelar y de la química prebiótica. Debido a su estructura molecular simple y a su gran abundancia en el espacio, el metanol es considerado un precursor indispensable para la síntesis de compuestos orgánicos más complejos, incluidos los aminoácidos, componentes fundamentales para la vida.

Esta investigación tiene como objetivo identificar las líneas rotacionales del metanol y determinar su abundancia en objetos estelares jóvenes de tipo solar, utilizando para ello la elaboración y análisis de diagramas rotacionales. Los objetos seleccionados para este estudio son **Barnard 1**, **L1527** y **NGC 1333 IRAS 4A**. Estas fuentes proporcionar una muestra representativa de las etapas tempranas en la formación de estrellas tipo solar. Esta muestra de objetos preestelares ofrece una visión detallada de los posibles procesos implicados en la síntesis de moléculas orgánicas complejas en los ambientes extremos del espacio. Además, esta investigación arroja luz sobre los entornos químicos donde emergen las moléculas prebióticas, fundamentales para el surgimiento de la vida en sistemas planetarios, por ejemplo, los orígenes químicos del sistema solar.

Para esta investigación, usamos los datos espectrales de acceso libre del *Astrochemical Surveys At IRAM* (ASAI), obtenidos con el radiotelescopio IRAM 30m. La identificación espectral se realizó mediante el software CASSIS y las bases de datos espectrales *Cologne Database for Molecular Spectroscopy* (CDMS) y *Jet Propulsion Laboratory* (JPL). Se consideraron para este estudio todas las líneas espectrales del metanol, detectadas con una relación señal ruido igual o superior a  $3\sigma$ , asegurando un examen exhaustivo de las transiciones rotacionales de la molécula, en las fuentes seleccionadas. Como resultado identificamos 62 líneas rotacionales en **Barnard 1**, 37 en L**1527** y 171 en **NGC 1333 IRAS 4A**. Los diagramas rotacionales obtenidos a partir de las líneas identificadas proporcionaron un mecanismo para evaluar la distribución térmica y la densidad del metanol, así como información detallada sobre las propiedades físicas y evolutivas de las fuentes seleccionadas.

<sup>\*</sup> Trabajo de Grado

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup> Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Programa pregrado en química. Director: PhD Heidy Mayerly-Quitián Lara. Codirector: PhD Enrique Mejía Ospino.

## Abstract

Title: Prebiotic molecules identification in young solar-type stellar objects: methanol\*

Author: Maldonado Portilla, Juan José \*\*

Key Words: Astrochemistry, Methanol, Protostars, Radioastronomy.

**Description:** Methanol, a simple alcohol composed of carbon, hydrogen and oxygen atoms, plays a crucial role in the study of the chemistry of the interstellar medium and prebiotic chemistry. Due to its simple molecular structure and high abundance in space, methanol is considered an indispensable precursor for the synthesis of more complex organic compounds, including amino acids, fundamental building blocks for life.

This research aims to identify the rotational lines of methanol and to determine its abundance in young solar-type stellar objects, using rotational diagrams. The objects selected for this study are Barnard 1, L1527 and NGC 1333 IRAS 4A. These sources provide a representative sample of the early stages of solar-type star formation. This sample of pre-stellar objects offers a detailed insight into the possible processes involved in the synthesis of complex organic molecules in the extreme environments of space. In addition, this research sheds light on the chemical environments where prebiotic molecules emerge, which are fundamental for the emergence of life in planetary systems, e.g. the chemical origins of the solar system.

For this research, we used open-access spectral data from the Astrochemical Surveys At IRAM (ASAI), obtained with the IRAM 30m radio telescope. Spectral identification was performed using CASSIS software and the spectral databases Cologne Database for Molecular Spectroscopy (CDMS) and Jet Propulsion Laboratory (JPL). All methanol spectral lines detected with a signal-to-noise ratio equal to or higher than  $3\sigma$  were considered for this study, ensuring an exhaustive examination of the rotational transitions of the molecule in the selected sources. As a result, we identified 62 rotational lines in Barnard 1, 37 in L1527 and 171 in NGC 1333 IRAS 4A. The rotational diagrams obtained from the identified lines provided a mechanism to assess the thermal distribution and density of methanol, as well as detailed information on the physical and evolutionary properties of the selected sources.

<sup>\*</sup> Dissertation

<sup>&</sup>lt;sup>\*\*</sup> Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Programa pregrado en química. Advisors: Ph. D. Heidy Mayerly-Quitián Lara, Ph. D. Enrique Mejía Ospino.

#### Introducción

El estudio de las moléculas prebióticas en el contexto de los objetos estelares jóvenes de tipo solar ha recibido una gran atención en los últimos años (Sandford et al., 2020). Estos objetos, caracterizados por sus similitudes con nuestro Sol, constituyen un laboratorio único para investigar los procesos químicos que tienen lugar durante la formación y evolución temprana de los sistemas planetarios. Entre la multitud de moléculas orgánicas observadas en estos entornos, el metanol (CH<sub>3</sub>OH) ha surgido como una especie particularmente atractiva debido a su abundancia e importancia potencial en astroquímica.

Fuera de nuestra atmósfera, la primera molécula identificada fue el CH, a finales de 1937 (Swings, 1937). Al día de hoy, alrededor de 300 moléculas han sido identificadas en el medio interestelar y casi una centena en fuentes extra galácticas (McGuire B. A., 2022). A medida que los instrumentos de análisis han ido mejorando, la cantidad de moléculas identificadas ha ido incrementando con el pasar de los años. Los avances tecnológicos han permitido que en un lapso de 80 años pasemos de una molécula como CH, al descubrimiento de una molécula como lo es la etanolamina, especie que hace parte de la cabeza polar de los fosfolípidos (Rivilla et al., 2021).

El estudio de objetos estelares jóvenes de tipo solar, llamados así por presentar características análogas a nuestro Sol (J. I. González Hernández, 2010), puede dar información acerca de la química presente en las primeras etapas de formación de sistemas planetarios como el nuestro (Caselli P. C., 2012) (Lefloch, 2018). Sin embargo, a pesar de los numerosos esfuerzos, solo unos pocos objetos presolares han sido estudiados. Por ejemplo, el TMC-1 (Burkhardt et al., 2021;

Kelvin Lee, Changala, et al., 2021; Kelvin Lee, Loomis, et al., 2021; Siebert et al., 2022), IRAS 16293 (Caux, 2011) (Jørgensen et al., 2016) (Blake et al., 1994), IRAS 4A (Blake et al., 1995), L1527 (Takano et al., 2011), y R CrA IRS7B (Watanabe et al., 2012), han sido estudiados en un rango muy limitado de radio frecuencias.

En nuestro día día, el metanol es usado como aditivo para combustibles y anticongelantes. El metanol un biocombustible modélico y un constituyente atmosférico traza (Gao et al., 2018) además, es el precursor de la mayoría de las metilaminas simples, los haluros de metilo y los éteres de metilo (Fiedler, Grossmann, Burkhard Kersebohm, & Weiss, 2005). El metanol es a su vez, es un compuesto omnipresente, biogeoquímicamente activo y un componente importante del carbono orgánico volátil de la atmósfera (Yuri L. Dorokhov, 2015). Este además juega un papel importante en la síntesis de aminoácidos como la glicina (Cotton et al., 2020).

El metanol, un alcohol simple formado por átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno, es una de las moléculas orgánicas detectadas con más frecuencia en el espacio interestelar. Su detección en regiones que rodean estrellas jóvenes ha abierto posibilidades para comprender la interacción entre la química y la astrofísica en las primeras etapas de la formación de estrellas y planetas. La identificación y caracterización del metanol en estos entornos puede aportar valiosos conocimientos sobre las vías químicas que conducen a la formación de moléculas orgánicas más complejas, incluidas las relevantes para la aparición de la vida.

En el curso de esta investigación se emplearon técnicas de espectroscopia rotacional para estudiar el metanol en una muestra de objetos estelares jóvenes de tipo solar, incluidos objetos preestelares como Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A. El objetivo era identificar las líneas rotacionales del metanol y medir sus abundancias a lo largo de varias etapas evolutivas.

Barnard1 es un núcleo pre estelar donde la nube estelar está en pleno colapso, L1527 por otro lado es una estrella clase cero que se encuentra en un punto más intermedio de su evolución estelar, ambos son objetos altamente carbonados. IRAS 4A es un objeto en donde la estrella como tal ya empezó su etapa de formación, pero esta no ha sido formada, este es un objeto rico en moléculas oxigenadas donde el metanol es abundante, lo cual hace del objeto relevante para el trabajo que se llevó a cabo. Al tratar con objetos estelares jóvenes de tipo solar en diferentes etapas de formación y con características que los diferencian, pero un marcador común, es posible comparar la abundancia e importancia de la molécula de metanol.

En concreto, las líneas rotacionales del metanol se obtuvieron mediante un análisis detallado de los datos espectrales. Barnard 1 mostró 62 líneas identificadas, mientras que L1527 presentó 37 líneas, y NGC 1333 IRAS 4A mostró la notable cifra de 171 líneas. Estas observaciones proporcionaron una gran cantidad de transiciones rotacionales a partir de las cuales se pudieron deducir las propiedades físicas y la abundancia del metanol.

Además, se construyeron diagramas rotacionales utilizando las líneas identificadas. Al trazar el logaritmo de la densidad de columna del estado superior frente a los niveles de energía, estos diagramas ofrecieron información sobre la distribución de la temperatura y la abundancia del metanol en los objetos estudiados. Los diagramas rotacionales resultantes proporcionaron una

valiosa herramienta para comprender las condiciones de excitación rotacional y las abundancias de metanol en Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A.

La importancia del metanol en el contexto de la química prebiótica es considerable. Su estructura molecular simple y su gran abundancia lo convierten en un precursor prometedor de compuestos orgánicos más complejos, incluidos los aminoácidos, que son los componentes básicos de la vida tal y como se conoce. En astronomía, el metanol es una molécula orgánica compleja de especial interés porque es una importante especie precursora de moléculas más grandes en el gas y el hielo, a la vez une las especies simples C, CO, H2O con las consideradas de importancia prebiótica, por ejemplo, los aminoácidos (Catone et al., 2021). El objetivo de la investigación era identificar posibles vías de producción de moléculas orgánicas que pudieran haber desempeñado un papel crucial en los orígenes de la vida en la Tierra mediante el estudio de la abundancia y las señales espectrales características del metanol en objetos preestelares como Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A.

Esta investigación presenta un análisis detallado de las líneas rotacionales del metanol obtenidas mediante espectroscopia rotacional en una muestra de objetos estelares jóvenes de tipo solar, incluyendo los objetos preestelares Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A. Se utilizaron técnicas de observación de avanzadas para determinar la abundancia y la distribución de temperatura del metanol en estos objetos.

Para este trabajo, se llevó a cabo un estudio espectral en el rango submilimétrico, que dio cumplimiento a los objetivos planteados en la propuesta. Para lograr estos se hizo necesario el uso

del paquete de software de libre acceso CASSIS, que permitió la identificación de las moléculas de interés (CESR/IRAP, 2005) en los espectros rotacionales de las fuentes utilizadas en el desarrollo de esta investigación. Los datos espectrales fueron descargados de la base de datos, también de libre acceso, del Institut de radioastronomie millimétrique (IRAM). Y fueron medidos con el radio telescopio de treinta metros IRAM 30m ubicado en Pico Veleta en la Sierra Nevada de España. Siendo este uno de los radio telescopios de disco único más sensibles, los datos ofrecidos por este representan una gran oportunidad para la investigación en (Max-Planck-Gesellschaft, Centre National de la Recherche Scientifique, & Instituto Geográfico Nacional, 1979).

Gracias a esta investigación, se han realizado valiosas contribuciones a nuestra comprensión de la compleja química que tiene lugar en los objetos estelares jóvenes de tipo solar y se ha arrojado luz sobre los procesos que impulsan la formación de moléculas prebióticas como el metanol. Al explorar las abundancias específicas y las señales espectrales del metanol en objetos preestelares como Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A, se descubrieron características únicas y posibles vías asociadas a la formación de metanol, mejorando nuestro conocimiento del panorama químico en las primeras etapas de la formación de estrellas y planetas.

# 1. Objetivos

## 1.1 Objetivo general:

Identificar las líneas rotacionales del metanol en una muestra seleccionada de objetos preestelares de tipo solar.

# **1.2 Objetivos específicos:**

- Realizar la búsqueda e identificación de metanol, por medio de espectros en radio frecuencias adquiridos por el radio telescopio IRAM 30m, utilizando el software CASSIS.
- Identificar una posible ruta de formación química de esta estructura (metanol) en el medio interestelar.
- Determinar las abundancias químicas de la molécula identificada (metanol) respecto a un marcador molecular como H<sub>2</sub>, CO.
- Realizar una lista de las frecuencias rotacionales no identificadas en cada una de las fuentes.

#### 2. Marco teórico

#### 2.1 Nube molecular

Es un tipo de nube interestelar cuya densidad y tamaño permiten la formación de nebulosas de absorción, la formación de moléculas y la formación de regiones con hidrógeno molecular (H2). Esto contrasta con otras zonas del medio interestelar que contienen predominantemente gas ionizado (HII). La formación de estrellas se produce exclusivamente dentro de las nubes moleculares. Esto es una consecuencia natural de sus bajas temperaturas y altas densidades, ya que la fuerza gravitatoria que actúa para colapsar la nube debe superar las presiones internas que actúan "hacia fuera" para evitar un colapso. Se han observado pruebas de que las grandes nubes de formación estelar están confinadas en gran medida por su propia gravedad y no por la presión externa. (Ferrière, 2001)



Figura 1 Imágenes de la Nube molecular Barnard 68. Izquierda: Espectro visible, tomada con el espectrógrafo FORS1 del Very Large Telescope (VLT). Centro: Infrarrojo cercano, tomada con el espectrógrafo SOFI, del New Technology Telescope (NTT). Derecha: Contornos de la emisión de CO, tomada con el Submillimeter Wave Astronomy Satellite (SWAS). Fuente: ESO.org

En la *figura 1* mostramos un ejemplo de lo que se puede detectar en una misma nube molecular, Barnard 68 (B68) en diferentes longitudes de onda. La imagen superior corresponde al espectro visible, donde observamos las estrellas del campo alrededor del B68, pero el objeto se ve como una mancha obscura. En la imagen central, observamos una vista en el infrarrojo, en esta imagen se evidencian la luz emitida por las partículas de polvo que rodea a los objetos estelares al interior de B68. En la imagen inferior, observamos el objeto en radio frecuencias. Cada contorno evidencia los componentes físicos de polvo y gas, trazados por la molécula de CO en B68. Las imágenes fueron tomadas de la página del European Southern Observatory (ESO).

#### 2.2 Elementos y moléculas prebióticas

Los compuestos orgánicos son relativamente comunes en el espacio, formados por "fábricas de síntesis molecular compleja" que se dan en las nubes moleculares y en las envolturas circumestelares, y evolucionan químicamente después de que las reacciones se inicien principalmente por la radiación ionizante.

El entorno cósmico está repleto de "complejas fábricas de síntesis molecular", regiones en las que la interacción de fuerzas físicas y radiación impulsa reacciones químicas para crear moléculas cada vez más complejas. Las nubes moleculares y las envolturas circumestelares, enriquecidas con polvo y gas, sirven de incubadoras para estos procesos. Las ondas de choque de las estrellas en explosión y la radiación ionizante de las estrellas masivas contribuyen al inicio de las reacciones químicas. Estas reacciones, que se producen en la superficie de los granos de polvo y en el interior de las nubes de gas, dan lugar a la formación de moléculas orgánicas que van de simples a complejas. (Herbst, Complex organic interstellar molecules, 2009)

En el interior de los discos protoplanetarios se desarrolla una gran variedad de procesos físicos y químicos. Los granos de polvo sirven de catalizadores para la formación de moléculas, ya que las moléculas de gas se adhieren a sus superficies y reaccionan entre sí. En las regiones frías exteriores, los compuestos volátiles se congelan en los granos de polvo, dando lugar a la creación de moléculas más complejas. Cuando se forman planetas en el interior de estos discos, los materiales

que contienen pueden llegar a las superficies planetarias tempranas, proporcionando los componentes básicos para la vida a medida que evolucionan los planetas. (Ciesla, 2012)

El medio interestelar, que abarca las vastas regiones entre las estrellas, alberga una gran variedad de moléculas orgánicas complejas. Estas moléculas se identifican mediante observaciones radioastronómicas, que revelan su presencia en diversos entornos cósmicos. Desde las regiones de formación estelar hasta las atmósferas de los planetas, estas moléculas persisten a distintas escalas, lo que hace evidente su resistencia y abundancia. Las observaciones también subrayan los procesos químicos compartidos que se desarrollan en todo el universo, tendiendo un puente entre el medio interestelar y el potencial para la vida. (McGuire B. A., 2018)

La importancia de los elementos y las moléculas prebióticas va mucho más allá de sus estructuras moleculares. Elementos como el carbono, el oxígeno y el nitrógeno, entre otros, constituyen los cimientos sobre los que se construyen las bases de la vida. La capacidad única del carbono para formar diversas estructuras moleculares y su papel en la formación de biomoléculas como los aminoácidos y el ADN subrayan su importancia vital. Estos elementos y moléculas permiten la formación de atmósferas, océanos y complejas redes químicas que sientan las bases para la aparición de la vida tal y como la conocemos. (Chyba, 1992)

El concepto de evolución química subraya el desarrollo gradual de moléculas orgánicas complejas en la joven tierra. La atmósfera y los océanos primigenios proporcionaron el entorno perfecto para que se produjeran reacciones químicas. Bajo la influencia de los rayos, la radiación solar y la actividad volcánica, empezaron a surgir moléculas como los aminoácidos y los azúcares. Estos compuestos orgánicos primitivos sufrieron una serie de transformaciones, impulsadas por las interacciones entre el calor, la radiación y la composición química del entorno. A lo largo de eones, estos procesos prepararon el camino para la aparición de los precursores de la vida. (Holland, 2006)

La exploración de moléculas prebióticas en entornos cósmicos alimenta la curiosidad por el origen de la vida y su posible existencia más allá de la Tierra. La astroquímica, el estudio de las moléculas en el espacio ofrece una ventana a las posibilidades químicas que podrían aprovecharse para la aparición de la vida. Al descifrar las huellas dactilares de estas moléculas en regiones distantes del espacio, se obtiene información sobre la habitabilidad potencial de otros mundos y la naturaleza universal de los procesos que impulsan la formación de los componentes básicos de la vida. (Botta, 2007)

## 2.3 Formación de elementos en estrellas

La nucleosíntesis estelar es el mecanismo central responsable de la producción de elementos más allá del hidrógeno y el helio en el universo. Este elaborado proceso opera en las condiciones físicas extremas que se dan en el núcleo de las estrellas, donde las altas temperaturas y presiones facilitan las reacciones de fusión nuclear. La síntesis de elementos más pesados a través de sucesivas generaciones de estrellas contribuye al enriquecimiento del medio interestelar y a la composición final de los planetas y los sistemas que sustentan la vida. (Ryan, 2011)

En las estrellas, la fusión del hidrógeno tiene lugar en el núcleo, dando lugar a la formación de helio mediante la cadena protón-protón y el ciclo CNO. La síntesis de helio sirve de trampolín para reacciones de fusión más complejas, que dan lugar a la creación de elementos progresivamente más pesados, como el carbono, el oxígeno y otros. Estos procesos han sido ampliamente estudiados y modelizados mediante redes de reacciones nucleares y simulaciones astrofísicas. (Arnett D., 1996)

Para los elementos más allá del hierro en la tabla periódica, la vía de nucleosíntesis se vuelve más compleja. El proceso se produce mediante la captura rápida de neutrones, o proceso r, que requiere condiciones de energía y densidad extremas. Se cree que las supernovas y las fusiones de estrellas de neutrones son lugares primarios para la nucleosíntesis del proceso r, que conduce a la formación de elementos como el oro, el platino y el uranio. (Cowan, 2019)



Figura 2 diagrama Hertzprung-Russell tomado de https://astronomy.swin.edu.au/cosmos/h/hertzsprung-russell+diagram

En la *figura 2* se puede observar cómo se agrupan las estrellas según su etapa de evolución, en un diagrama HR que las clasifica según su luminosidad y temperatura. Durante la secuencia principal las estrellas transforman hidrógeno, por medio de reacciones termonucleares, en helio. Cuando el hidrógeno de su núcleo es agotado, salen de la secuencia principal y entran en las siguientes etapas evolutivas en donde pueden ser formados los siguientes elementos hasta hierro. Durante la muerte estelar, dependiendo de la masa estelar, estas pueden producir elementos más pesados a través de reacciones muy energéticas promovidas por las explosiones de supernova.

A medida que las estrellas agotan su combustible nuclear, pasan por varias etapas de evolución, dependiendo de su masa inicial. Las estrellas de menor masa evolucionan hacia gigantes rojas, durante las cuales se desprenden de sus capas externas y dispersan material enriquecido en el espacio circundante. Las estrellas de gran masa culminan en supernovas explosivas que liberan energía y elementos sintetizados en el medio interestelar. Estos materiales enriquecidos proporcionan los bloques de construcción para las siguientes generaciones de estrellas y sistemas planetarios. (Heger, 2010)

La dispersión de estos elementos por las galaxias, combinada con el reciclaje del material interestelar a través de los ciclos de nacimiento y muerte estelar, da como resultado el enriquecimiento gradual de las composiciones elementales de las galaxias a lo largo del tiempo cósmico. Este enriquecimiento es evidente en la composición de las estrellas, los sistemas planetarios e incluso el sistema solar. El estudio de estas composiciones, tanto desde el punto de vista observacional como teórico, ha permitido comprender mejor los orígenes nucleosintéticos de los elementos y la historia de la evolución química galáctica. (Frebel, 2018)

#### 2.4 Objetos estelares jóvenes (YSO – Young stellar objects)

Un objeto estelar joven o protoestrella es una estrella que se encuentra en su fase inicial de formación puede referirse a los objetos estelares recién formados a partir de nubes moleculares y a las estrellas un poco más evolucionadas pero que no han llegado a su fase de secuencia principal (estrellas de pre-secuencia principal). Los objetos estelares jóvenes suelen ser divididos en etapas evolutivas en función de la pendiente de su distribución de energía espectral en el infrarrojo medio (Adams F. C., 1987), la cual muestra como la envoltura estelar disminuye hasta perderse por completo, dando paso a una estrella con su sistema planetario en su etapa final. En la *figura 3* se puede visualizar la distribución de estas clases de objetos estelares jóvenes.



Figura 3 Ilustración de las clases evolutivas de los objetos estelares jóvenes, tomada de http://www.reinervogel.net/index\_e.html?/YSO/YSO\_e.html

La ilustración presentada en la *figura 3* muestra las diversas clases evolutivas de objetos estelares jóvenes, proporcionando una representación visual del complejo viaje que experimentan las estrellas desde su formación inicial hasta etapas más avanzadas. Estas clases, clasificadas en función de sus características y fases evolutivas, ofrecen una visión de los procesos que conforman el desarrollo de las estrellas. (Hartmann, 1996) (Stahler, 2005)

La progresión a través de estas clases evolutivas corresponde a etapas clave de la nucleosíntesis estelar, el proceso por el que las estrellas sintetizan elementos mediante fusión nuclear. A medida que las estrellas evolucionan, sus núcleos se calientan y densifican lo suficiente como para desencadenar reacciones nucleares que conducen a la fusión de elementos ligeros en otros más pesados. (Arnett D., 1996) (Woosley, 1995)

La clase 0, por ejemplo, representa la fase más temprana, caracterizada por la presencia de núcleos densos en nubes moleculares. Aquí, las protoestrellas aún se están formando y acumulando material, sentando las bases para futuras reacciones nucleares. Al pasar a la Clase I, los objetos estelares jóvenes están rodeados activamente por material circumestelar, sufriendo eyecciones de masa que enriquecen el entorno con elementos recién sintetizados.

El entorno químico de cada clase, influido por la radiación, la temperatura y las abundancias elementales, tiene un impacto directo en el potencial de formación de moléculas orgánicas. Estas clases sirven de laboratorio para comprender cómo pueden surgir moléculas complejas en medio de entornos estelares en evolución. (Herbst, Complex organic interstellar molecules, 2009) (Chiar, 2006)

Los YSO de clase I marcan una fase en la que la protoestrella central ha desarrollado un disco circunestelar. La envoltura sigue presente, pero es menos masiva que en la Clase 0. Estos objetos presentan una fuerte emisión infrarroja. Estos objetos presentan una fuerte emisión infrarroja debida al calentamiento del polvo en las regiones circundantes. Los YSO de clase I están acrecionando activamente material de sus discos, y se sigue observando la presencia de flujos moleculares (Lada, 1987).

Los YSO de clase II tienen un disco circunestelar bien definido y la acreción desde la envoltura ha disminuido significativamente. Estos objetos se consideran estrellas previas a la secuencia principal. El fuerte exceso infrarrojo observado en las YSO de clase II se atribuye a la presencia de polvo en el disco (Kenyon, 1995).

Los YSO de clase III se han desprendido en su mayor parte de la envoltura que los rodea, dejando tras de sí un disco circunestelar bien definido. La protoestrella se encuentra ahora en la fase previa

a la secuencia principal y la acreción ha disminuido considerablemente. Estos objetos están a punto de convertirse en estrellas completas y sus propiedades son más parecidas a las de las estrellas T Tauri clásicas (Wilking, 1989).

#### 2.4.1 Primer núcleo o primer núcleo hidrostático (FHSC-First Hydrostatic Core)

Durante esta breve fase de la evolución estelar entre el inicio del colapso del núcleo y la aparición de una "verdadera" protoestrella, el creciente núcleo central de hidrógeno molecular (H2) se calienta hasta el punto de obtener el equilibrio hidrostático. Cuando la temperatura central del primer núcleo alcanza aproximadamente 2000 K, el H2 se disocia y un segundo colapso forma la verdadera protoestrella. Esta fase es previa al comienzo de la fase 0 y las simulaciones predicen la formación de un objeto de hidrógeno molecular en equilibrio hidrostático, que aparece justo después del colapso del núcleo y antes del comienzo de la fase de clase 0 (Larson, 1969). El objeto Barnard1 estudiado en esta investigación concuerda con esta descripción.

#### 2.4.2 Fuente de química cálida de cadenas de carbono

Las líneas de alta excitación detectadas de moléculas de cadenas de carbono muestran una nueva química en una región cálida y densa cerca de las protoestrellas, que se denomina "química cálida de cadenas de carbono (WCCC-Warm Carbon Chemistry)" (Sakai N. S., 2008). La química de las cadenas de carbono se produce en una región de gas caliente y denso alrededor de una protoestrella. En el WCCC, varias moléculas de cadena de carbono se producen por reacciones del CH4, que se ha evaporado de los mantos de granos en una región tibia. En estas regiones, las moléculas de cadena de carbono se producen eficazmente en las primeras etapas de la evolución preestelar, cuando el carbono atómico no se ha convertido completamente en CO (Sakai N. S., 2009). El objeto L1527 estudiado en esta investigación concuerda con esta descripción.

#### 2.4.3 Clase 0 y corinos calientes

Las protoestrellas de clase 0 aún se encuentran en su fase principal de acreción y también impulsan los flujos de salida más potentes. El impacto del material expulsado sobre la nube circundante provoca frentes de choque. Estos provocan cambios en la composición química y el aumento de la abundancia de varias especies en los alrededores. Durante el colapso, la radiación procedente de la protoestrella en formación calienta las partes internas de la envoltura haciendo que los radicales superficiales sean móviles y altamente reactivos

Durante la fase fría y densa previa al colapso, la complejidad molecular aumenta por las rápidas reacciones iónico-moleculares en fase gaseosa, seguidas por la congelación gradual y la acumulación de hielos (H2O, CO, NH3) y procesos superficiales. Durante el colapso, la radiación procedente de la protoestrella en formación calienta las partes internas de la envoltura haciendo que los radicales superficiales sean móviles y altamente reactivos. Más tarde, estos hielos complejos recién formados se desorbitan térmicamente, impulsando aún más los procesos químicos ricos en el gas y creando un "corino caliente" (E. Koumpia, 2017). El "corino caliente" sirve como denominación para identificar las regiones interiores cálidas de la envoltura que rodea a las protoestrellas de baja masa.

El objeto NGC 1333 IRAS 4A estudiado en esta investigación, correspondería con la descripción de los corinos calientes.

## 2.5 Disco protoplanetario

Un disco protoplanetario es un disco circumestelar giratorio de gas denso y polvo que rodea a una estrella joven recién formada, una estrella T Tauri o una estrella Herbig Ae/Be. El disco protoplanetario también puede considerarse un disco de acreción para la propia estrella, ya que los gases u otros materiales pueden caer desde el borde interior del disco sobre la superficie de la

estrella. Las protoestrellas se forman a partir de nubes moleculares compuestas principalmente por hidrógeno molecular. (Pringle, 1981)



Figura 4 Ilustración tomada de https://en.wikipedia.org/wiki/Protoplanetary\_disk#/media/File:Soot-line1.jpg para visualización del concepto de disco protoplanetario

La ilustración de la *figura 4* muestra un disco protoplanetario, una estructura fundamental que desempeña un papel crucial en la formación de los sistemas planetarios. Este disco es un entorno dinámico y complejo que rodea a una estrella joven y contiene los componentes básicos y los materiales a partir de los cuales emergen planetas, lunas y otros cuerpos celestes. (Andrews, 2005) (Cieza, 2007)

Desde una perspectiva astroquímica, el disco protoplanetario constituye un laboratorio único para estudiar la intrincada interacción entre los procesos químicos y las condiciones físicas. En el interior del disco puede formarse una rica variedad de moléculas complejas a través de reacciones en fase gaseosa, la química de la superficie de los granos e incluso la fotoquímica iniciada por la radiación ultravioleta de la estrella central. Estas moléculas van desde especies simples como el

agua y el monóxido de carbono hasta compuestos prebióticos más complejos como las moléculas orgánicas. (Öberg, 2020) (Herbst, 2009)

La ilustración ofrece una visión de la variabilidad de las composiciones químicas en las distintas regiones del disco. El gradiente de temperatura entre la estrella central y las regiones exteriores da lugar a distintos entornos químicos, lo que se traduce en diferentes abundancias moleculares e incluso relaciones isotópicas. Esta variabilidad permite comprender mejor la evolución química de los discos protoplanetarios y cómo influye en la composición final de los sistemas planetarios. (Aikawa, 2012) (Willacy, 2009)

## 2.6 Radioastronomía (Espectros de radio frecuencia)

La radioastronomía es un subcampo de la astronomía que estudia los objetos celestes en radiofrecuencias. Se lleva a cabo mediante grandes antenas de radio, denominadas radiotelescopios, que se utilizan de forma individual o con múltiples telescopios conectados que utilizan las técnicas de radio interferometría y síntesis de apertura. El uso de la interferometría permite a la radioastronomía alcanzar una alta resolución angular, ya que el poder de resolución de un interferómetro viene determinado por la distancia entre sus componentes, más que por el tamaño de estos.

La ecuación matemática correspondiente a la mencionada descripción de la radioastronomía, en la que destaca especialmente el uso de la interferometría para lograr una alta resolución angular, viene dada por la fórmula de la resolución angular ( $\theta$ ) de un interferómetro:

$$\theta = \frac{\lambda}{D}$$

Donde:

 $\theta$  es la resolución angular,

 $\lambda$  es la longitud de onda de las ondas de radio observadas,

D es la línea de base o distancia entre los componentes del interferómetro.

La resolución angular es inversamente proporcional a la longitud de la línea de base. Por lo tanto, al aumentar la línea de base, la radiointerferometría permite una mayor resolución angular en las observaciones radioastronómicas.

Los radioastrónomos utilizan diferentes técnicas para observar objetos en el espectro radioeléctrico. Los instrumentos pueden simplemente apuntar a una fuente de radio energética para analizar su emisión. Para "fotografiar" una región del cielo con más detalle, se pueden registrar múltiples escaneos superpuestos y unirlos en una imagen de mosaico. El tipo de instrumento utilizado depende de la intensidad de la señal y de la cantidad de detalles necesarios.

Las observaciones desde la superficie terrestre se enfrentan a limitaciones debidas a las longitudes de onda que pueden penetrar la atmósfera. A frecuencias más bajas o longitudes de onda más largas, la ionosfera restringe la transmisión al reflejar las ondas con frecuencias inferiores a la frecuencia característica de su plasma. La radioastronomía de alta frecuencia se ve obstaculizada por el vapor de agua, lo que ha llevado al establecimiento de radioobservatorios que realizan observaciones en longitudes de onda milimétricas en lugares elevados y áridos para minimizar el vapor de agua a lo largo de la línea de visión. Por último, los dispositivos de transmisión terrestre pueden causar interferencias de radiofrecuencia, lo que ha llevado a la construcción de muchos radioobservatorios en lugares remotos para mitigar estas influencias no deseadas.

La radioastronomía ha permitido aumentar considerablemente los conocimientos astronómicos, sobre todo con el descubrimiento de varias clases de objetos nuevos, como los púlsares, los cuásares y las radiogalaxias. Esto se debe a que la radioastronomía nos permite ver cosas que no son detectables en la astronomía óptica. Estos objetos representan algunos de los procesos físicos más extremos y energéticos del universo. (Shields, 1999).

Los espectros rotacionales constituyen la espina dorsal de la radioastronomía, ya que permiten a los investigadores sondear las transiciones rotacionales únicas de las moléculas en el espacio. Estos espectros se derivan de la interacción entre las moléculas y la radiación electromagnética, concretamente en el rango de radiofrecuencia. Estas transiciones se producen cuando una molécula cambia su estado energético rotacional al absorber o emitir un fotón. (Wilson, 1994) (Lovas F. J., 2004)

#### 2.7 Radio telescopio

Un radiotelescopio es una antena especializada y un receptor de radio utilizados para detectar ondas de radio procedentes de radiofuentes astronómicas en el cielo.

La antena astronómica más grande del mundo para todo el rango de los milímetros, el telescopio IRAM de 30 metros, es operada en Sierra Nevada (España) por el Instituto de Radioastronomía Milimétrica (IRAM). El IRAM está patrocinado por el Instituto Geográfico Nacional español, la Max-Planck Gesellschaft (Alemania) y el CNRS francés. La antena está situada a una altitud de casi 3000 m, muy por encima de la mayor parte del vapor de agua atmosférico. Su gran precisión superficial ( $\sim 50\mu$  m) permite observaciones hasta una longitud de onda de 1 mm (correspondiente a 280 Ghz).



Figura 5 Telescopio IRAM 30m imagen tomada de https://iram-institute.org/observatories/30-meter-telescope/

La ilustración de la *figura 5* corresponde al telescopio IRAM de 30 metros, una poderosa herramienta en el ámbito de la radioastronomía. Este telescopio sirve de conducto para explorar el cosmos a través del espectro de radiofrecuencias, lo que permite a los investigadores descubrir los procesos químicos que tienen lugar en el medio interestelar.

Desde un punto de vista astroquímico, el telescopio IRAM de 30 metros actúa como puerta de entrada para comprender las composiciones químicas de diversos objetos celestes. Al detectar y analizar las emisiones de radiofrecuencia de moléculas como los compuestos orgánicos complejos, los investigadores obtienen información sobre la riqueza molecular del espacio y se pueden hacer estudios que logren proponer diversas reacciones químicas que dan forma a las regiones de formación estelar.

La sensibilidad del telescopio a las emisiones de radio es especialmente valiosa en la búsqueda de moléculas prebióticas, es decir, aquellas que sientan las bases para la aparición de la vida. Las

moléculas orgánicas complejas, como las que podrían servir de precursoras de los aminoácidos u otros componentes esenciales, emiten frecuencias de radio específicas que el telescopio IRAM de 30 metros puede detectar. Esta capacidad impulsa las investigaciones sobre los orígenes químicos de los entornos que sustentan la vida.

El telescopio está equipado con una cámara bolométrica de 117 píxeles para la ventana atmosférica de 1,3 mm (MAMBO), que se utiliza principalmente para detectar la emisión térmica del polvo interestelar, pero también de objetos del sistema solar. Existen varios sistemas receptores heterodinos refrigerados que pueden utilizarse para observaciones de líneas espectrales. En primer lugar, hay ocho receptores heterodinos de un solo píxel para los principales rangos espectrales utilizados en el telescopio de 30 m (3 mm: 67-116 Ghz, 2 mm: 130-183 Ghz, 1,3 mm 194-266 Ghz y 1 mm: 241-282 Ghz). Estos receptores se pueden combinar de forma flexible, de manera que se puede observar con 4 receptores simultáneamente (las cuatro bandas en polarización única, o dos bandas respectivamente en polarización dual). El receptor de línea espectral EMIR (Eight MIxer Receiver) opera en las ventanas atmosféricas de 3, 2, 1,3 y 0,9 mm. Estas cuatro bandas se designan como E 090, E 150, E 230 y E 330 según sus frecuencias centrales aproximadas en GHz. El ancho de banda instantáneo de cada receptor heterodino es de hasta 1 Ghz (500 Mhz en el rango de 3mm). Los espectrómetros de autocorrelación y los bancos de filtros con una gran variedad de resoluciones espectrales y anchos de banda se adaptan a las necesidades de investigación de diferentes objetos astronómicos (en las nubes oscuras el ancho de línea Doppler puede ser de 111 km/s, mientras que en las galaxias externas los anchos de línea típicos están en el rango de 200 km/s). (Mauersberger, 2003, Enero).

## 2.8 Espectroscopía rotacional

La espectroscopia es el estudio de la interacción entre la materia y la luz. La espectroscopia rotacional de las moléculas suele producirse en la región de microondas del espectro. En los sólidos, las moléculas no suelen ser libres de rotar, y en los líquidos las colisiones normalmente hacen que la absorción no sea característica; por lo tanto, sólo se considera la espectroscopia rotacional de las moléculas gaseosas (Iain R. McNab, 1999). Esta se ocupa de medir las energías de las transiciones entre estados rotacionales cuantificados de las moléculas.

Los espectros de las moléculas polares pueden medirse en absorción o emisión mediante espectroscopia de microondas. La espectroscopia rotacional se utiliza habitualmente para identificar moléculas en el espacio (Ali-Haïmoud, 2014).

La energía asociada a las transiciones rotacionales en una molécula puede describirse mediante la siguiente ecuación:

$$E(J)=B\cdot J\cdot (J+1)$$

E(J) es la energía del estado rotacional,

B es la constante de rotación de la molécula,

J es el número cuántico de rotación.

La frecuencia (v) de una transición rotacional viene dada por la ecuación:

$$v=2B\cdot(J+1)$$



Figura 6 A la izquierda, transiciones de Etanolamina en la nube molecular G+0.693-0.027, a la derecha el diagrama rotacional de la Etanolamina tomado de Discovery in space of ethanolamine, the simplest phospholipid head group de Víctor M. Rivilla https://doi.or

La ilustración presentada en la *figura 6* muestra las transiciones rotacionales de la etanolamina dentro de una nube molecular, proporcionando una perspectiva visual del análisis espectroscópico de esta compleja molécula. Estas transiciones ofrecen una perspectiva única de la composición química y la dinámica de la nube molecular, permitiendo la identificación y caracterización de especies moleculares clave como la etanolamina.

En la ilustración, las líneas espectrales representan las transiciones de la etanolamina entre distintos niveles de energía rotacional. Estas transiciones aportan información valiosa sobre las propiedades estructurales de la molécula, su abundancia y las condiciones físicas dentro de la nube molecular.

En la ilustración, las líneas espectrales representan las transiciones de la etanolamina entre distintos niveles de energía rotacional, cuantizados por el número cuántico J. Estos niveles de energía rotacional reflejan los diferentes estados de rotación que la molécula puede ocupar. Cada transición entre niveles, como J1 y J2, se manifiesta en la absorción o emisión de energía a

frecuencias específicas durante la espectroscopia rotacional. La distinción entre estos niveles se deriva del momento de inercia de la molécula, relacionado con su forma y tamaño molecular. En consecuencia, las transiciones entre niveles de baja energía a niveles más altos proporcionan información detallada sobre la estructura, la abundancia y las condiciones físicas dentro de la nube molecular que alberga la etanolamina. Este enfoque permite una comprensión más profunda de la complejidad molecular y el entorno químico en estas regiones celestes.

Pasando al diagrama rotacional de la derecha, esta representación gráfica ofrece una visión concisa de las transiciones rotacionales observadas. El diagrama muestra el logaritmo de la densidad de columna del estado superior frente a los niveles de energía correspondientes. Al trazar estos puntos y conectarlos, podemos comprender mejor la distribución de la temperatura, la abundancia y las condiciones de excitación rotacional de la etanolamina en la nube molecular.

La densidad de columna se refiere a una medida del número de moléculas a lo largo de la línea de visión a través de un medio particular, como una nube molecular o una región en el espacio. Representa la cantidad total de moléculas por unidad de superficie integrada a lo largo de la línea de visión. En el contexto de la espectroscopia rotacional y el texto proporcionado, la densidad de columna (N) de un estado rotacional específico (N(J)) es crucial para comprender la población de moléculas en ese estado.

$$N(\mathcal{J}) = \frac{3k}{8\pi^3} \cdot \frac{Z}{gu} \cdot \frac{Q_{rot}}{B} \cdot e^{-E(J)/(kT)} \cdot \int \tau(v) dv$$

Esta ecuación tiene en cuenta varios factores, como la constante de Boltzmann (k), la función de partición (Z), el peso estadístico (gu), la función de partición rotacional (Qrot), la constante rotacional (B), la energía del estado rotacional E(J), la temperatura (T) y la profundidad óptica en

función de la velocidad ( $\tau(v)$ ). La integración sobre la velocidad (v) tiene en cuenta toda la distribución de velocidades de las líneas espectrales observadas.

Desde una perspectiva astroquímica, la ilustración de las transiciones etanolamina y el diagrama rotacional ofrecen una visión directa del complejo entorno químico de la nube molecular. La presencia de transiciones específicas indica las especies moleculares presentes en la nube, lo que contribuye a nuestra comprensión de la complejidad molecular y la posible química prebiótica que tiene lugar en estas regiones.

El análisis del diagrama rotacional permite evaluar cuantitativamente la abundancia de etanolamina y su distribución de temperatura. Al ajustar los puntos de datos a un modelo, podemos extraer parámetros cruciales que iluminan las condiciones físicas y los procesos químicos que tienen lugar en la nube molecular. Este enfoque cuantitativo nos permite desentrañar la riqueza molecular oculta en estos entornos interestelares.

La característica única de los espectros rotacionales es su capacidad para identificar moléculas basándose en sus huellas espectrales. Cada molécula tiene un conjunto de transiciones rotacionales asociadas a sus niveles de energía rotacional. Estas transiciones se producen a frecuencias bien definidas que corresponden a cambios específicos en el movimiento de rotación. Al observar estas transiciones, se pueden identificar con seguridad la presencia de moléculas específicas en nubes de gas interestelar, envolturas estelares o discos protoplanetarios. (Gottlieb, 1975) (Lovas F. J., 1979)

Los patrones en forma de huella dactilar de los espectros rotacionales son el resultado de los niveles de energía rotacional cuantizados de las moléculas. Las diferentes estructuras moleculares provocan variaciones en estos niveles de energía, lo que da lugar a transiciones rotacionales específicas a frecuencias concretas. Este principio de niveles de energía cuantizados constituye la base para distinguir entre varias especies moleculares. (Müller, 2019)

A diferencia de los espectros vibracionales infrarrojos, que implican cambios en los niveles de energía vibracional molecular, los espectros rotacionales giran en torno a cambios en la rotación molecular. Los niveles de energía rotacional vienen determinados por el momento de inercia de la molécula. Los espectros vibracionales son sensibles a los enlaces y los grupos funcionales, mientras que los rotacionales se centran en la forma y el tamaño molecular. (Herbst, Complex organic interstellar molecules, 2009)

Los espectros rotacionales son fundamentales para estudiar las especies gaseosas debido a su sensibilidad a la rotación molecular. Los gases presentan transiciones rotacionales prominentes, lo que hace que sus espectros sean muy adecuados para detectar y caracterizar la composición molecular en diversos entornos astronómicos. Esto incluye el análisis de la composición de los flujos estelares, las nubes moleculares y las regiones de formación estelar. (White, 1995)

La aplicabilidad de los espectros rotacionales abarca una amplia gama de condiciones de temperatura. Las regiones cálidas cercanas a las estrellas emiten líneas de rotación cuando las moléculas experimentan excitación térmica. En las nubes interestelares más frías, las moléculas emiten líneas de rotación a través de procesos radiativos. La posibilidad de estudiar las moléculas en distintos entornos térmicos permite comprender mejor los procesos químicos en las diferentes etapas de la formación de estrellas y planetas. (Lis, 1991)

Los radiotelescopios de alta sensibilidad son herramientas esenciales para observar espectros rotacionales. Telescopios como ALMA proporcionan una potente combinación de sensibilidad y resolución para detectar y resolver las transiciones rotacionales de numerosas especies

moleculares. Estos telescopios recogen la radiación electromagnética emitida o absorbida durante las transiciones rotacionales, permitiendo estudiar el movimiento rotacional de las moléculas proporcionando datos valiosos para su posterior análisis. (Wootten, 2009)

Las herramientas informáticas como CASSIS permiten analizar e interpretar los datos de los espectros rotacionales. Estas herramientas facilitan la comparación de los espectros observados con bases de datos que contienen espectros rotacionales calculados para diversas especies moleculares. Al comparar las líneas espectrales observadas con las de la base de datos, se pueden identificar las moléculas presentes en las regiones observadas. (Pickett, 1998)

La intensidad de las líneas espectrales rotacionales proporciona información sobre la abundancia de moléculas que emiten o absorben radiación a frecuencias específicas. Comparando las intensidades de las líneas observadas con las de las bases de datos, se pueden estimar las concentraciones relativas de distintas especies moleculares. Este proceso permite determinar la abundancia de moléculas específicas en diversos entornos astronómicos. La intensidad de la línea proporciona información sobre el número de moléculas que emiten o absorben radiación. Esta técnica permite comprender mejor las variaciones de la abundancia molecular en distintas regiones astronómicas. (Pagani, 2013)

El estudio de los espectros rotacionales en radioastronomía proporciona información valiosa sobre la química y las condiciones físicas de los entornos celestes. Ayuda a comprender la composición química, la temperatura, la densidad y la dinámica de las nubes moleculares, las regiones de formación estelar y las atmósferas planetarias. Analizando los espectros rotacionales, se puede deducir información sobre los procesos moleculares e incluso el potencial de formación de moléculas orgánicas complejas esenciales para la vida. (Caselli P. &., 2012)
### 2.9 Superficies de hielos

Los procesos químicos en entornos astrofísicos dan lugar a la producción de una gran variedad de moléculas, la mayoría de las cuales son de naturaleza orgánica y muchas de ellas son de interés directo para la astrobiología, es decir, el estudio de los orígenes, la evolución, la distribución y el futuro de la vida en el universo. Aunque la química en fase gaseosa en estos entornos tiene lugar y conduce a la formación de pequeños compuestos, debido a las bajísimas densidades en el ISM y a los altos campos de radiación que probablemente fotodisocien los compuestos recién formados, la química en fase gaseosa es un proceso ineficiente para hacer moléculas complejas, incluso en las escalas de tiempo de la vida de las nubes moleculares.



Figura 7 Hielos astrofísicos tomados de https://www.astrochem.org/sci/Master\_Residues.php

La *figura* 7 ilustra la evolución astrofísica de los granos de silicato en el espacio. Inicialmente desnudos, los granos acumulan un manto de hielo, seguido de un manto orgánico refractario. La exposición a los fotones UV indica la influencia de la radiación estelar. Dentro del manto refractario, varios componentes orgánicos sufren transformaciones, concretamente se convierten en quinona. Esta secuencia capta etapas clave de la compleja química de los entornos interestelares, mostrando la formación y evolución de moléculas orgánicas en granos de silicato.

Los hielos astrofísicos, presentes en entornos como las nubes interestelares y las regiones protoestelares, presentan una composición diversa que incluye agua, monóxido de carbono, metano y moléculas orgánicas complejas. Formados por reacciones en fase gaseosa y química superficial en granos de polvo en regiones frías, estos hielos aportan firmas espectrales únicas en el espectro infrarrojo, lo que permite su identificación. La presencia de gruesos mantos de estos hielos sobre granos de polvo en nubes moleculares densas influye en el campo de radiación interestelar, afectando al balance energético de su entorno. Las principales características y observaciones de los hielos astrofísicos se tratan ampliamente en obras como "The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium", de Tielens, y "Interstellar Ice: The Infrared Space Observatory Legacy", de Boogert et al.

La química de los hielos inducida a través de la radiación ionizante en la superficie de los granos pequeños y fríos parece, por tanto, una forma más eficiente de formar compuestos nuevos y más complejos, porque las especies están más cerca unas de otras y, por tanto, pueden reaccionar más eficazmente entre sí, y porque las matrices de hielo pueden comportarse como un escudo para las moléculas recién formadas.

Por lo tanto, se cree que el procesamiento de los hielos con fotones energéticos y/o se cree que es una fuente importante para las moléculas orgánicas que se incorporan al Sistema Solar, así como como probablemente en otros sistemas planetarios.(Sandford et al., 2020)

La materia orgánica atrapada en el agua el hielo se ioniza con los fotones de longitud de onda visible que predominan en todo el Universo y llegan a los lugares a los que no pueden acceder los fotones UV de alta energía. Esta materia orgánica ionizada en el hielo constituye el punto de partida punto de partida para una evolución compleja en entornos que van desde el medio interestelar hasta las partículas de hielo atmosférico en la Tierra. Los procesos de nucleación

mediada por cargas de carga pueden entenderse ahora a la luz de nuestro trabajo de que las impurezas atrapadas en el hielo pueden ionizarse eficazmente dando lugar a partículas de hielo cargadas incluso en entornos de fotones de baja energía.

Muchas moléculas biológicas y contaminantes aromáticos absorben fuertemente en el rango visible-UV, lo que las convierte en las especies más reactivas en el hielo a través de la ionización. especies más reactivas en el hielo a través de la ionización por la luz solar. La coexistencia del agua y las moléculas orgánicas es crítica para la vida, pero bajo la radiación un delicado equilibrio entre la captación de energía y el daño fotoquímico se mantendría en función de los entornos en los que coexisten estos compuestos orgánicos, la vida, el agua y la energía. (Lignell et al., 2021)

#### 2.10 Metanol

El metanol, representado por la sencilla fórmula CH<sub>3</sub>OH, es un compuesto de interés en astroquímica debido a su estructura relativamente simple. Compuesto por un grupo metilo (CH<sub>3</sub>) y un grupo hidroxilo (OH), el metanol es un alcohol básico. A pesar de su simplicidad, el metanol es un actor crucial en la astroquímica, al ser precursor de moléculas orgánicas más complejas. Esta molécula es considerada compleja para estudios relacionados con la astronomía ya que tiene seis átomos diferentes.

Esta simplicidad lo convierte en un punto de partida útil para estudiar los componentes básicos de compuestos más intrincados que se encuentran en el espacio. El grupo metilo del metanol actúa como unidad fundamental, iniciando vías hacia la formación de moléculas complejas, lo que lo convierte en un tema de interés en el estudio de la evolución molecular en entornos interestelares. (Turner, 1991)

La importancia del metanol en astroquímica radica en su prevalencia en distintos entornos astronómicos. Abunda en las nubes moleculares y en las regiones de formación estelar, lo que permite comprender mejor los procesos químicos asociados al nacimiento de las estrellas. El papel del metanol como precursor de moléculas más grandes y biológicamente relevantes lo sitúa como un marcador para comprender las primeras etapas de la evolución química en el espacio. (Bergman, 2011)

En entornos interestelares, el metanol experimenta diversas reacciones químicas tanto en fase gaseosa como en superficies sólidas. Estas reacciones contribuyen a la riqueza química del medio interestelar, dando lugar a la formación de moléculas orgánicas más complejas. El metanol actúa como catalizador en estas reacciones, participando en redes que contribuyen a la diversidad molecular observada en el espacio. (Garrod, 2013)

El metanol es un alcohol simple que comparte similitudes estructurales con moléculas orgánicas más complejas que se encuentran en los organismos vivos. Aunque el metanol en sí no sea un precursor directo de la vida, puede servir como punto de partida para la síntesis de moléculas orgánicas más complejas. En entornos astrofísicos, la presencia de metanol en regiones de formación estelar proporciona una base para la formación de moléculas más grandes y biológicamente relevantes.

Uno de los posibles vínculos es la formación de moléculas orgánicas complejas (COM) en el medio interestelar. El metanol puede someterse a diversos procesos químicos, como la hidrogenación y la fotoquímica, que conducen a la creación de COM. Algunas de estas moléculas, como el formaldehído y el ácido acético, se consideran componentes básicos de compuestos orgánicos más complejos. Comprender las vías que conducen del metanol a estas moléculas precursoras es esencial, ya que proporciona información sobre las fuentes potenciales de compuestos orgánicos que son vitales para la vida en la Tierra. Aunque la conexión directa entre el metanol en entornos astrofísicos y la formación de moléculas biológicas es compleja y polifacética, la investigación de estos procesos químicos contribuye a nuestra comprensión más amplia de los orígenes de la vida.

### 3. Parte observacional

### 3.1 Adquisición rigurosa de datos y análisis en profundidad

Se llevó a cabo la adquisición y el análisis riguroso de los datos libres obtenidos del programa Astrochemical Surveys At IRAM. Que fueron recolectados utilizando el radiotelescopio de 30 metros del IRAM junto con los receptores E090, E150 y E230, se capturan y decodifican las señales celestes. Tras la captura, los datos adquiridos se someten a un tratamiento de la señal mediante la técnica de Transformada Rápida de Fourier (FFT). Este enfoque matemático descompone eficazmente los espectros en diferentes componentes de frecuencia, lo que facilita una identificación precisa de las firmas moleculares para su posterior análisis. (Lefloch, 2018)

La transformada rápida de Fourier (FFT) es un algoritmo matemático que convierte los datos del dominio temporal al dominio de la frecuencia. Este proceso permite descifrar los componentes de frecuencia subyacentes en los espectros rotacionales. Empleando esta técnica, se extrajo valiosa información sobre las frecuencias de vibración de las moléculas y sus resonancias.

# 3.2 Instalación y familiarización con el software CASSIS

Se instaló y se aprendió a usar el software CASSIS. Esta herramienta desempeña un papel fundamental en la identificación y anotación de espectros rotacionales. El dominio de sus funciones permite explorar e identificar eficazmente los espectros rotacionales en los datos de observación adquiridos. La familiaridad con el software permitió extraer información valiosa de los complejos espectros, que sirvió de base para los análisis e interpretaciones posteriores. (Vastel et al., 2015)

La integración de la FFT con el software CASSIS permitió identificar las distintas frecuencias moleculares presentes en los espectros. Este paso fue crucial para desvelar las características únicas de cada especie molecular, como su abundancia y su distribución térmica.

Aprovechando bases de datos como The Cologne Database for Molecular Spectroscopy (CDMS) y Jet Propulsion Laboratory (JPL), el software comparó las frecuencias observadas con transiciones moleculares conocidas. Este paso se llevó a cabo para identificar eficazmente la presencia de moléculas específicas en los objetos estelares observados.

# 4. Resultados

# 4.1 Asignación y anotación de líneas espectrales

Se exploraron los archivos .fits que contienen los espectros en limpio de las tres fuentes en los rangos de 72 GHz a 276 Ghz en un rango de temperatura de 0K a 600K.

iras4a_72_80.fits	iras4a_80_112.fits	iras4a_125_133.fits	iras4a_130_173.fits
iras4a_200_276.fits	11527_200_276.fits	11527_130_172.fits	11527_125_133.fits
11527_80_112.fits	11527_72_80.fits	b1_82_112.fits	b1_130_173.fits
b1_200_276.fits			

Figura 8 archivos de uso libre .fits trabajados

Desde el software CASSIS se selecciona el análisis de línea para acceder al menú en donde se

eligen los parámetros que van a ser tenidos en cuenta cada vez que se hace el proceso de análisis.



Figura 9 Primer paso al abrir el software CASSIS

A partir de aquí se selecciona el archivo .fits con el que se va a trabajar, cargando estos datos por cada fuente. Se selecciona el rango de GHz que permite el archivo, se selecciona el rango de temperatura a trabajar y se selecciona el telescopio iram\_EMIR, y finalmente en la base de datos se selecciona la molécula de interés a ser trabajada. En este caso el metanol.

C:\WINDOW5\system32\cmd. × + v		- 0
Running without arguments, Cassis starts with default memory 1024 MB Welcome to Cassis-6.3-221011-build6954 CASSIS Interactive Spectrum Analyzer - IRAP - 2022 18:47:29.520 WARN [AWT-EventQueue-0] eu.omp.irap.cassis.gui.menu.actionpectrummun 	w Scypts Wedows Database Preferences VO Help Millin A. A. J. C. C. C. Song State Preferences A Help State Preferences A	
Line Analysis 1 - D		
Template Tamp Tamp Tamp Tamp Tamp Tamp Tamp Tamp	(au     (au     (bectrum Manager (Line Analysis 1)     (assis Spectrum Cassis Metadata Ostalina     (Cassis Spectrum     (Cassis Metadata Ostalina	• ×
Range min: 200.51943331 max: 276.03212916 GHz T Band: 60.0 km/s T CH30H 32003 JPL H20048 32004 (P)	Resources	
Directory         Directory <thdirectory< th="">         Directory         <thdirectory< th="">         Directory         <thdirectory< th=""> <thdirectory< th=""> <thdir< td=""><td></td><td></td></thdir<></thdirectory<></thdirectory<></thdirectory<></thdirectory<>		
LTE-RADEX	NAXIS3 1 NAXIS4 1	
Telescope Observing Mode Background Noise Oversampling team_SABR Tmb>Ta* PswcDiSw + Teg: 273 K + msc 0.0 mK + Factor: 0.0	BLOCKED         Itrue         Blanking v           BLANK         21474430447         Blanking v           BIOCALE         2.570271773166-6         Blanking v           BIOCALE         2.57024773166-6         Blanking v	alue
Continuum Component 1 X +	DATAMAX 8.63924217224	
Mode: Full LTE   Image: Interacting N(H_2) [cm-7]: 7.5E22 Tex[K]: 100.0	CTYPE1 K CTYPE1 00 000000000000000000000000000000000	
Species/Operations         w         Geometry:         Species/         Willing         Size[T]:         3.0           Name ▲         Id         Database         Compute         N(Sp) (cm <sup>-4</sup> )         Abundance (H2)         FVMHA (km/s)	COEL11 195313.006639     CRPV1 195313.0     CRPV1 193313.0	resolution
CH30H [32003 [JPL 7.00E14] 9.33E-9	1.00 Open URL resource EQUINOX 2000.0	
	Open ASCII parser CDELT2 0.0	
	Close resource         000 02 <th< td=""><td></td></th<>	
	CUELIA 100	
Load config Save config Help Displa	alay	

Figura 10 Parámetros previos al tratamiento de señales

Lo que nos lleva a los espectros rotacionales captados por el telescopio, desde los cuales se puede hacer el procedimiento matemático para reducir los datos empleando la transformada rápida de Fourier.



Figura 11 Vista de la ventana de espectros rotacionales

A partir de esta ventana se seleccionaba cada espectro rotacional para ejecutar el procedimiento estadístico a mano. Trazando una línea de base polinomial para descartar el ruido de la señal, y

luego aplicando una línea Gaussiana para transformar la señal en una línea espectral que pudiese ser guardada en un archivo para su posterior análisis.



Figura 12 Demostración base polinomial en el Software CASSIS

Este proceso se llevó a cabo para todas las señales que se encontraban en cada archivo .fits, trabajando señales con poco ruido que se pueden describir como limpias.



Figura 13 Demostración línea Gaussiana en el software CASSIS

Y este proceso también se llevó a cabo con señales con un nivel de ruido mucho más alto. Todas las líneas espectrales fueron guardadas para su posterior análisis.



Figura 14 Ejemplo señal de ruido alto en el software CASSIS

En total sin contar las líneas de <sup>13</sup>CH3OH o metanol deuterado CD<sub>3</sub>OD que fueron estudiadas y posteriormente descartadas. Se hizo el procedimiento matemático en 464 señales para la fuente Barnard1, en la fuente L1527 se realizó el procedimiento con 510, y finalmente para la fuente NGC1333-IRAS4A en 512 señales se realizó el procedimiento. Todas estas 1486 señales fueron estudiadas en los rangos de 72GHz a 276GHz y en un rango de temperatura de 0K a 600K. Este proceso fue necesario hacerlo quince veces en la medida en la que el investigador se familiarizaba con las herramientas del software CASSIS y se obtenían cada vez resultados más significativos de las líneas espectrales.

Partiendo de la sólida base establecida, se asignaron y anotaron con precisión las líneas espectrales.

# 4.2 Análisis estadístico de las poblaciones de líneas espectrales

Se empleó el cálculo sistemático de las disparidades energéticas entre las distintas poblaciones moleculares. Para la simulación, se parte de un equilibrio termodinámico local, temperaturas y

velocidades uniformes. Este paso fundamental requirió la incorporación de una ecuación que captase la esencia de las disparidades en los niveles de energía

$$\Delta E = E_{superior} - E_{inferior}$$

Este sofisticado análisis ayuda a descifrar la compleja interacción de las interacciones moleculares dentro de los entornos astroquímicos.

El software CASSIS colabora con las amplias bases de datos CDMS y JPL, facilitando la identificación y clasificación de las firmas espectrales. Entra en juego un criterio de discernimiento, guiado por la inclusión de líneas espectrales que presenten intensidades superiores al umbral de 3 desviaciones estándar ( $3\sigma$ ). Este filtro garantizó la retención de sólo los rasgos más pertinentes y característicos en el análisis posterior.



Figura 15 Líneas guardadas, previo al filtro realizado

De las 1465 señales reducidas y convertidas a líneas espectrales que se encontraban guardadas en la toma final de señales, finalmente, se identificaron un total de 62 líneas en la fuente Barnard1, 37 líneas en la fuente L1527 y 171 líneas en la fuente NGC1333 IRAS 4A.

#### 4.3 Ecuación del diagrama rotacional

Se realizó un análisis riguroso de los datos mediante la formulación de una ecuación para un diagrama rotacional. Esta ecuación:

$$\left(\frac{N_u}{g_u}\right) = ln\left(\frac{N_{total}}{Q}\right) - \frac{E_u}{k}$$

capta la esencia de las distribuciones de temperatura y las abundancias moleculares dentro de los objetos observados. Donde:

- $N_u$  es la densidad de columna del estado superior,
- $g_u$  es la degeneración del estado superior,
- N<sub>total</sub> es la densidad de columna total de la molécula,
- Q es la función de partición,
- $E_{\rm u}$  es la energía del estado superior,
- *k* es la constante de Boltzmann.

El análisis de los diagramas rotacionales resultantes proporcionó información muy valiosa sobre los perfiles de temperatura y las abundancias moleculares en los entornos observados.

Los diagramas de rotación se construyeron a partir de las frecuencias moleculares identificadas. Al trazar el logaritmo de la densidad de columna del estado superior frente a los niveles de energía, se obtienen información sobre la distribución de la temperatura dentro de los objetos estudiados. Esta técnica ofrece una ventana a las condiciones físicas de los objetos.

C:\WINDOWS\system32\cmd. $ imes$	+ ~		
unning without arguments cloome to Cassis-6.3-2210 ASSIS Interactive Spectre	, Cassis starts wit 011-build6954 um Analyzer - IRAP	th default mei - 2022	nory 1024 MB
CASSIS 6.3 - database from SQLITE (ca File Edit Modules View Scripts Windows	ssis202 – C × Database Preferences VO Help	2	
A Rotational Diagram 1			
Data		Tuning	
Load fore\Plan de trabajo de grado\Cassis	Líneas Metanol IRAS-4A.txt	yUnit: KTa 🔽 Ta->Tm	ib conv
СНЗОН			
Components			
Component 2: Gaussian Fit V	Beam dilution correction Source S	Size ["]:	0.0
Load config Save config Help			Display

Figura 16 Opción de diagrama rotacional dentro del software CASSIS

Desde el software CASSIS, se selecciona la opción de diagrama rotacional, y de la ventana emergente se carga el archivo de los datos reducidos previamente. Este proceso se efectua con las fuentes para elaborar los diagramas rotacionales de tal manera que se pueda hacer el análisis.



Figura 17 Diagrama rotacional graficado

A partir de este punto se separan las señales en "bloques" diviendo estos en rangos de temperatura para obtener perfiles que permitan hacer un mejor análisis de las propiedades físicas de la molécula orgánica compleja de la investigación (metanol).

Comprobando la hipótesis número uno y llegado a la conclusión de que los objetos preestelares Barnard 1, IRAS 4A y L1527 presentan abundancia en señales características de metanol (CH<sub>3</sub>OH).

### 5. Discusión

#### 5.1 Análisis del diagrama rotacional

Esta sección consiste en analizar los procesos químicos que tienen lugar en el interior de objetos estelares jóvenes de tipo solar para descubrir el origen y las vías de evolución de moléculas orgánicas complejas. Se examinan las interacciones entre especies moleculares en diferentes condiciones físicas, con el objetivo de comprender los complejos mecanismos que impulsan la síntesis de moléculas.

Las diferentes secciones o bloques de un diagrama rotacional, cada uno caracterizado por una pendiente distinta, suelen representar diferentes componentes de temperatura o condiciones de excitación dentro de la región observada. En el contexto de sus diagramas rotacionales, podría referirse a estas secciones como "regímenes de temperatura" o "componentes de temperatura". Cada bloque significa un rango de temperaturas donde las moléculas están predominantemente excitadas.

Al discutir estos bloques, se puede describir de la siguiente manera:

**Componente de baja temperatura:** corresponde a la sección con menor pendiente en el diagrama rotacional. Las moléculas en este régimen se excitan predominantemente a temperaturas bajas.

**Componente de temperatura intermedia:** se trata de la sección intermedia del diagrama, que suele caracterizarse por una pendiente moderada. Las moléculas de este régimen experimentan temperaturas de excitación intermedias.

**Componente de alta temperatura:** la sección con la pendiente más pronunciada que suele representar moléculas excitadas a temperaturas más altas.

Estos componentes de temperatura proporcionan información sobre las diversas condiciones físicas o procesos que tienen lugar en el gas molecular observado. Pueden corresponder a distintas regiones, como envolturas exteriores frías, regiones cálidas cerca de estrellas en formación o regiones calientes afectadas por choques o radiación.



Figura 18 Diagrama rotacional del metanol en la fuente Barnard 1

# **Barnard1 Bloque 1:**

Densidad columnar (N): 1.0 x 10<sup>14</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (T<sub>ex</sub>): 11.7 K

Este bloque indica una abundancia relativamente alta de moléculas con una temperatura de excitación baja, asociadas a regiones más frías.

# **Barnard1 Bloque 2:**

Densidad columnar (N): 9.8 x 10<sup>13</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 125.8 K

Este bloque sugiere una menor abundancia de moléculas en comparación con el bloque 1, y la temperatura de excitación es mayor, lo que indica unas condiciones más cálidas pero no extremadamente calientes.

# **Barnard1 Bloque 3:**

Densidad columnar (N): 9.7 x 10<sup>13</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 449.2 K

Este bloque representa una densidad de columna similar a la del bloque 2 pero con una temperatura de excitación mucho mayor, lo que indica moléculas en un entorno energéticamente más activo.

Los bloques 1 y 2 representa regiones con temperaturas relativamente más bajas, mientras que la pendiente 3 sugiere un entorno de temperaturas más altas.

Las diferencias en las temperaturas de excitación entre las bloques indica la presencia de múltiples componentes o regiones de temperatura dentro del gas molecular estudiado.



Figura 19 Diagrama rotacional del metanol en la fuente L1527

# L1527 Bloque 1:

Densidad columnar (N): 2.7 x 10<sup>13</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 10.0 K

Este bloque indica una densidad de columna relativamente baja con una temperatura de excitación baja, lo que probablemente una región más fría y menos densa.

# L1527 Bloque 2:

Densidad columnar (N): 3.4 x 10<sup>13</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 170 K

Este bloque sugiere una densidad de columna ligeramente superior en comparación con el bloque 1, y la temperatura de excitación es mayor, lo que indica un entorno más cálido con mayor actividad molecular.

# L1527 Bloque 3:

Densidad columnar (N): 1.2 x 10<sup>14</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 291.1 K

Este bloque representa una densidad de columna significativamente mayor con una temperatura de excitación relativamente alta, lo que sugiere una región energéticamente más activa con una mayor abundancia de moléculas.

La progresión del Bloque 1 al Bloque 3 indica una tendencia al aumento tanto de la densidad de columna como de la temperatura de excitación, lo que sugiere una transición de regiones más frías y menos densas a entornos más cálidos y densos.

Las variaciones de temperatura y densidad entre los bloques sugieren diferentes condiciones físicas o regiones dentro del gas molecular asociado a L1527.



Figura 20 Diagrama rotacional del metanol en la fuente NGC 1333 - IRAS4A

# NGC1333 IRAS4A Bloque 1:

Densidad columnar (N): 2.0 x 10<sup>14</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (T<sub>ex</sub>): 19.6 K

El bloque 1 sugiere una densidad de columna moderada con una temperatura de excitación relativamente baja, lo que indica una región con una abundancia moderada de moléculas a una temperatura más fría.

### NGC1333 IRAS4A Bloque 2:

Densidad columnar (N):  $3.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ 

Temperatura de excitación (Tex): 38.7 K

El bloque 2 indica una mayor densidad de columna en comparación con el bloque 1, y la temperatura de excitación es más alta, lo que sugiere un entorno más cálido y denso con una mayor actividad molecular.

#### NGC1333 IRAS4A Bloque 3:

Densidad columnar (N): 1.7 x 10<sup>14</sup> cm<sup>-2</sup>

Temperatura de excitación (Tex): 367.0 K

El bloque 3 representa una densidad de columna inferior a la del bloque 2 pero con una temperatura de excitación significativamente superior. Esto implica una región con un entorno energéticamente más activo pero con una menor abundancia de moléculas en comparación con el bloque 2.

De forma similar a la tendencia observada en L1527, existe una progresión de temperaturas de excitación más bajas a más altas a través de los bloques, lo que indica una transición de regiones más frías a regiones más cálidas.

Las variaciones tanto en la temperatura como en la densidad de columna sugieren la presencia de diferentes condiciones físicas o regiones dentro del gas molecular asociado a NGC1333 IRAS4A.

Las *figuras 18, 19 y 20* muestran componentes físicos variados entre las fuentes, destacando una densidad columnar comparable. NGC 1333 - IRAS 4A, a pesar de su avanzada evolución, muestra líneas rotacionales abundantes y un rango de temperaturas más amplio.

Las abundantes líneas de metanol en IRAS 4A revelan su riqueza química, proporcionando una visión única de la formación de diversos compuestos orgánicos a través de diferentes etapas estelares y gradientes de temperatura, revelando una dinámica química distinta.

#### 5.2 Tendencias de temperatura:

**Gradiente de temperatura constante:** En todas las fuentes, existe una tendencia clara y consistente de aumento de la temperatura de excitación desde las regiones más frías (Bloque 1) hacia las regiones más cálidas (Bloque 3). Esto sugiere un cambio progresivo de entornos más fríos y menos energéticos a regiones más cálidas y potencialmente más activas dinámicamente.

**Diversidad de temperaturas:** El rango de temperaturas de excitación dentro de cada fuente destaca la diversidad de condiciones físicas presentes en estos entornos moleculares. Las variaciones de temperatura observadas reflejan diferentes mecanismos de calentamiento, campos de radiación e interacciones con la materia circundante.

#### Variaciones en la densidad de las columnas

**Diferencias de abundancia:** Las variaciones en la densidad de columna dentro de cada fuente indican diferentes abundancias moleculares en los bloques de temperatura observados. Las densidades de columna más altas sugieren regiones con una mayor concentración de las especies moleculares estudiadas.

**Gradientes de densidad:** Los cambios en la densidad de columna de un bloque a otro podrían significar gradientes de densidad dentro del gas molecular. Estos gradientes están asociados a diferentes etapas evolutivas de cada fuente.

# Características específicas de las fuentes:

**Dinámica individual de las fuentes**: Cada fuente (Barnard 1, L1527, NGC1333 IRAS4A) presenta características únicas en términos de variaciones de temperatura y densidad de columna. Estas diferencias podrían atribuirse al contexto astrofísico específico, a la etapa evolutiva y a las influencias ambientales de cada fuente.

# 5.3 Análisis comparativo

El análisis comparativo entre fuentes permite una comprensión más amplia de la diversidad de entornos moleculares en diferentes regiones de formación estelar. Ofrece información sobre cómo varían las condiciones físicas en función de factores como la ubicación dentro de una nube, la proximidad a estrellas en formación y la historia general de formación estelar de la región. (Quitián-Lara, 2024)

### Barnard 1 - Primer núcleo hidrostático (FHC):

**Entorno de baja temperatura:** La observación de una pendiente con una temperatura de excitación baja coincide con las condiciones esperadas de un primer núcleo hidrostático, caracterizado por bajas temperaturas y las fases iniciales del colapso gravitatorio.

**Variabilidad potencial:** La presencia de diferentes pendientes con componentes de temperatura variables puede indicar diferentes etapas o regiones dentro del primer núcleo hidrostático. Estas variaciones podrían reflejar la naturaleza evolutiva del gas en colapso y la química asociada.

## L1527 - Fuente de química cálida de cadenas de carbono:

**Entornos más fríos a más cálidos:** Los bloques de L1527 muestran una progresión de ambientes más fríos a más cálidos. Esto concuerda con las características de una fuente de química cálida de cadenas de carbono, donde se espera que las moléculas asociadas con la química orgánica compleja se formen en regiones con temperaturas intermedias.

**Mayor complejidad:** El aumento tanto de la temperatura como de la densidad de columna del bloque 1 al bloque 3 sugiere un aumento de la complejidad del entorno molecular. Esto puede ser indicativo de un aumento de los procesos químicos y de la formación de moléculas más complejas en regiones más cálidas y densas.

#### NGC1333 IRAS4A - Corino caliente:

**Entorno de alta temperatura:** La observación de un bloque con una temperatura de excitación significativamente más alta coincide con las condiciones esperadas de un corino caliente. Los

corinos calientes son regiones alrededor de protoestrellas jóvenes donde pueden encontrarse moléculas orgánicas complejas a temperaturas elevadas.

**Transición a regiones energéticamente activas:** La progresión de temperaturas más bajas a más altas en NGC1333 IRAS4A, representada por los bloques 1 a 3, indica una transición de un entorno energéticamente menos activo a una región donde los procesos más energéticos, como los choques o el calentamiento de la joven protoestrella, se vuelven significativos.

Las variaciones de temperatura y densidad observadas son coherentes con las características astrofísicas específicas de cada fuente. Estas características influyen en los tipos de moléculas presentes y en los procesos físicos que rigen su formación.

Los rasgos distintivos observados en los diagramas rotacionales proporcionan valiosos datos sobre las condiciones existentes en estas regiones, contribuyendo a nuestra comprensión de las primeras etapas de la formación estelar, la química cálida de cadenas de carbono y las propiedades de los corinos calientes.

# 5.4 Discernimiento de la ruta de formación interestelar

Utilizando datos de espectros y diagramas rotacionales, se investigarán las reacciones secuenciales que conducen a la formación de moléculas orgánicas complejas, específicamente metanol. Este proceso implica modelización para descifrar las secuencias y mecanismos de reacción, ofreciendo una visión de las interacciones moleculares responsables de las abundancias químicas observadas en el espacio. El estudio de las rutas de formación interestelar pretende esclarecer los orígenes de estas moléculas y su relevancia para la aparición de la vida. Este análisis conecta las señales espectrales con los modelos teóricos, revelando las interacciones moleculares que contribuyen a las abundancias observadas.

Diversos estudios han explorado la formación de metanol en el medio interestelar. Gámez-García (2017) identificó 11 posibles reacciones en fase gaseosa que podrían contribuir a la formación de metanol (V. G. Gámez-García, 2017), mientras que Boamah (2014) sugirió que las reacciones inducidas por electrones de baja energía en metanol condensado también podrían desempeñar un papel (Mavis D. Boamah, 2014). Wirström (2011) aportó pruebas observacionales que apoyan la teoría de que el metanol se forma a través de la hidrogenación de CO sólido en superficies de granos interestelares (E. Wirström, 2011). Congiu (2012) apoyó aún más esta teoría, demostrando la formación eficiente de hidroxilamina interestelar a través de la hidrogenación de NO en sustratos interestelares relevantes (Congiu, 2012). Estos estudios sugieren que la formación de metanol en el medio interestelar es probablemente un proceso complejo que implica una combinación de reacciones en fase gaseosa y en estado sólido.

Cada fuente presenta características únicas. Barnard 1 muestra condiciones relativamente más frías, L1527 exhibe un gradiente de temperatura y NGC1333 IRAS4A revela una transición de temperaturas moderadas a altas. A pesar de las diferencias, todas las fuentes comparten una tendencia común de aumento de las temperaturas de excitación, lo que indica un patrón más amplio en los entornos moleculares.

Explorar la posible ruta de formación del metanol en el contexto de entornos estelares jóvenes nos lleva a considerar los procesos químicos clave. A continuación, se presenta una vía simplificada, reconociendo las complejidades propias de los procesos astroquímicos:

#### Inicio con precursores moleculares y síntesis del formaldehído (H<sub>2</sub>CO):

Se inicia el proceso contemplando el paisaje molecular dentro de los objetos estelares jóvenes, donde el monóxido de carbono (CO), el formaldehído (H<sub>2</sub>CO) y el metanol (CH<sub>3</sub>OH) son constituyentes prominentes. El formaldehído, precursor del metanol, se materializa mediante reacciones químicas en las que intervienen el hidrógeno atómico (H) y el monóxido de carbono (CO). El paso fundamental consiste en la hidrogenación del formaldehído, un proceso en el que se añaden átomos de hidrógeno a las moléculas de formaldehído.

#### $H+CO\rightarrow H_2CO$

#### $H_2CO+2H\rightarrow CH_3OH$

### Consideración de los gradientes de temperatura, factores externos y procesos energéticos:

Los componentes de temperatura observados, que varían de baja a alta, desempeñan un papel discernible a la hora de influir en las tasas de estas transformaciones químicas. Las regiones más frías pueden favorecer la producción de formaldehído, mientras que las más cálidas facilitan la hidrogenación a metanol. Una evaluación de los factores externos, que abarca la radiación, los choques y las interacciones con estrellas cercanas, subraya su influencia en la mejora de la eficiencia de reacciones químicas específicas. Esto, a su vez, influye en la abundancia global de metanol.

### A partir del metanol

### Progresión mediante hidrogenación:

Tras la formación de metanol, una vía para la evolución molecular posterior implica la hidrogenación sucesiva. El metanol puede someterse secuencialmente a reacciones de hidrogenación, que conducen a la creación de alcoholes superiores dentro del medio molecular.

CH<sub>3</sub>OH+H→CH<sub>4</sub>OH<sub>2</sub>→Alcoholes superiores

Esta adición secuencial de átomos de hidrógeno contribuye a la creciente complejidad del inventario orgánico, introduciendo una variedad de especies alcohólicas

#### **Procesos Superficiales:**

#### Adsorción en superficies sólidas:

Las moléculas de metanol, presentes en la fase gaseosa, pueden adsorberse en superficies sólidas como granos de polvo o mantos de hielo. Esta adsorción es la interacción inicial que prepara el terreno para posteriores reacciones mediadas por la superficie.

### Hidrogenación superficial:

Una vez adsorbidas, las moléculas de metanol en la superficie pueden sufrir reacciones de hidrogenación. Los átomos de hidrógeno de la superficie pueden unirse al metanol adsorbido, dando lugar a la formación de especies como el formaldehído o alcoholes superiores.

CH<sub>3</sub>OH+H<sub>superficial</sub>→ Productos de adsorción superficial

# Quimisorción y catálisis:

La quimisorción implica un enlace químico más fuerte entre el metanol adsorbido y la superficie, creando sitios catalíticos. La catálisis en estas superficies facilita diversas transformaciones químicas, que pueden conducir a la síntesis de moléculas orgánicas más complejas.

CH<sub>3</sub>OH<sub>adsorbido</sub>  $\xrightarrow{Catálisis}$  Moléculas Orgánicas Complejas

# **Procesos intermedios:**

### Reacciones en fase gaseosa:

En los procesos intermedios, el metanol en fase gaseosa participa en reacciones con otras especies en fase gaseosa. Esto podría implicar reacciones con radicales, iones u otras moléculas presentes en el entorno de la nube molecular.

 $CH_3OH_{gas}+X_{gas} \rightarrow$  Productos intermedios en fase gaseosa

# Fotodisociación y fotorreacciones:

Las moléculas de metanol pueden sufrir fotodisociación, rompiéndose en radicales o fragmentos más pequeños al exponerse a la radiación ultravioleta (UV). Estos radicales pueden entonces participar en fotorreacciones, formando nuevas especies moleculares.

CH<sub>3</sub>OH<sub>gas</sub>+ RadiacionUV→Radicales→ Productos de fotorreacción

### **Interacciones gas-superficie:**

Los procesos intermedios también pueden implicar interacciones entre el metanol en fase gaseosa y las superficies sólidas. Esta interacción podría conducir a la deposición superficial o al inicio de reacciones mediadas por la superficie.

### CH<sub>3</sub>OH<sub>gas</sub>+ Superficie → Productos de interacción gas-superficie

En la culminación de esta investigación y respondiendo la pregunta de esta, sobre Barnard 1, L1527 y NGC 1333 IRAS 4A, el interés principal se ha centrado en la identificación de metanol dentro de estos jóvenes objetos de tipo solar. El examen meticuloso de las líneas de rotación y el posterior análisis de los datos de abundancia han revelado una presencia pronunciada de metanol, subrayando su importancia en la conformación del paisaje químico de estas regiones. Aunque el estudio se ha centrado principalmente en el metanol, su identificación tiene profundas implicaciones para nuestra comprensión de los procesos astroquímicos en juego. Al concentrarnos en este componente molecular clave, hemos sentado las bases para una exploración específica de su papel en el contexto más amplio de la química prebiótica y la interacción dinámica entre la química orgánica y los procesos astrofísicos en estos sistemas en evolución. Este enfoque singular en el metanol allana el camino para futuras investigaciones sobre composiciones moleculares más amplias y sus contribuciones a la intrincada química de los objetos jóvenes de tipo solar.

### 6. Conclusiones

Con base en los hallazgos, se logró rastrear las identidades moleculares de una molécula orgánica compleja (metanol) en cada uno de los objetos, mediante el análisis de las abundancias obtenidas al trabajar con las señales de los espectros rotacionales utilizando el software CASSIS. Esto permitió discernir las características químicas de los tres objetos en cada una de sus estructuras.

Además, el estudio observó la formación de metanol en diferentes etapas de formación estelar, lo que llevó a la construcción de un mapa que relaciona el metanol con moléculas orgánicas complejas que pueden formarse a partir de él, y con moléculas orgánicas predecesoras al mismo, haciendo del metanol la molécula de partida para el estudio de moléculas orgánicas complejas en ambientes jóvenes.

También se identificaron regiones de formación de metanol que permiten relacionar su localización con regiones de formación de heteroátomos, moléculas complejas de interés prebiótico como moléculas nitrogenadas a partir del metanol.

Finalmente, se logró plantear una ruta de formación para el metanol en el medio interestelar, más específicamente en las regiones de formación estelar, a partir de las propiedades físicas obtenidas en las gráficas rotacionales.

#### 7. Recomendaciones

A la vista de los hallazgos presentados en esta investigación en relación con las propiedades rotacionales y las abundancias de metanol en objetos estelares jóvenes de tipo solar, se pueden proponer varias recomendaciones para futuras investigaciones. En primer lugar, una vía prometedora para futuras investigaciones sería explorar las características rotacionales de los isótopos del metanol. Investigar variantes como <sup>13</sup>CH<sub>3</sub>OH y CH<sub>2</sub>DOH mediante espectroscopia rotacional puede aportar valiosos conocimientos sobre los mecanismos de fraccionamiento isotópico y arrojar luz sobre las vías químicas implicadas en la síntesis de moléculas orgánicas complejas.

Igualmente, complementar los estudios observacionales con trabajos experimentales de astroquímica utilizando datos de espectrometría de masas mejoraría enormemente nuestra comprensión del metanol y su papel en la formación de compuestos orgánicos complejos. Realizando simulaciones de laboratorio que reproduzcan las condiciones encontradas en objetos estelares jóvenes y analizando los espectros de masas de los productos de reacción, puede obtenerse información esencial sobre las vías de reacción, la cinética y la formación de compuestos orgánicos complejos.

También sería beneficioso ampliar la investigación del metanol más allá de los objetos estelares jóvenes de tipo solar. Explorar su presencia y comportamiento en diferentes entornos astrofísicos, como las regiones de formación estelar y los discos protoplanetarios, ya que esto puede aportar información sobre su papel en diversas etapas de la formación de estrellas y planetas.

Además, la integración de los datos de espectroscopia rotacional con observaciones en otras longitudes de onda, como infrarrojo, ofrecería una visión más completa del metanol y sus interacciones con otras moléculas y procesos físicos. Los estudios en múltiples longitudes de onda pueden proporcionar información crucial sobre el balance energético, los mecanismos de excitación y la distribución espacial del metanol en diferentes objetos.

Deberían utilizarse técnicas de imagen avanzadas, como la interferometría, para sondear con mayor resolución la distribución espacial y la cinemática del metanol en objetos estelares jóvenes. Las imágenes de alta resolución pueden ayudar a resolver estructuras detalladas, como flujos de salida, discos y choques, y proporcionar una mejor comprensión de las condiciones físicas y químicas en las que está presente el metanol.

Finalmente, sería valioso realizar estudios comparativos del metanol con otras moléculas orgánicas importantes. La investigación de la interacción entre el metanol y los aminoácidos, las moléculas orgánicas complejas y otros posibles componentes prebióticos puede esclarecer las vías que condujeron a la aparición de una química similar a la vida en el Universo.

# 8. Divulgación de resultados

Los resultados, alcances y temas tratados en este proyecto de investigación fueron presentados a manera de ponencia en el Congreso Colombiano de Astronomía y Astrofísica CoCoA en el 2022 en la ciudad de Tunja, Colombia. De igual manera se presentó en forma de poster para el I Día de la Facultad de Ciencias 2022 en la Universidad Industrial de Santander en la ciudad de Bucaramanga, Colombia. Finalmente, se presentó una contribución en la modalidad de poster en el XVII Latin American Regional IAU Meeting en el 2023 en la ciudad de Montevideo, Uruguay.

### **Referencias Bibliográficas**

- Burkhardt, A. M., Long Kelvin Lee, K., Bryan Changala, P., Shingledecker, C. N., Cooke, I. R., Loomis, R. A., Wei, H., Charnley, S. B., Herbst, E., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Discovery of the Pure Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Indene (c-C9H8) with GOTHAM Observations of TMC-1. *The Astrophysical Journal Letters*, *913*(2), L18. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abfd3a
- Catone, D., Satta, M., Castrovilli, M. C., Bolognesi, P., Avaldi, L., & Cartoni, A. (2021).
  Photoionization of methanol: a molecular source for the prebiotic chemistry. *Chemical Physics Letters*, 771(February), 138467. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.138467
- Cotton, C. A., Claassens, N. J., Benito-Vaquerizo, S., & Bar-Even, A. (2020). Renewable methanol and formate as microbial feedstocks. *Current Opinion in Biotechnology*, 62, 168– 180. https://doi.org/10.1016/j.copbio.2019.10.002
- Ehrenfreund, P., & Cami, J. (2010). Cosmic carbon chemistry: from the interstellar medium to the early Earth. *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*, 2(12), 1–14. https://doi.org/10.1101/cshperspect.a002097
- Ferrière, K. M. (2001). The interstellar environment of our galaxy. *Reviews of Modern Physics*, 73(4), 1031–1066. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.1031
- Gao, L. G., Zheng, J., Fernández-Ramos, A., Truhlar, D. G., & Xu, X. (2018). Kinetics of the Methanol Reaction with OH at Interstellar, Atmospheric, and Combustion Temperatures. *Journal of the American Chemical Society*, 140(8), 2906–2918.

https://doi.org/10.1021/jacs.7b12773

- Kelvin Lee, K. L., Changala, P. B., Loomis, R. A., Burkhardt, A. M., Xue, C., Cordiner, M. A., Charnley, S. B., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Interstellar Detection of 2cyanocyclopentadiene, C 5 H 5 CN, a Second Five-membered Ring toward TMC-1 . *The Astrophysical Journal Letters*, 910(1), L2. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abe764
- Kelvin Lee, K. L., Loomis, R. A., Burkhardt, A. M., Cooke, I. R., Xue, C., Siebert, M. A., Shingledecker, C. N., Remijan, A., Charnley, S. B., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Discovery of Interstellar trans -cyanovinylacetylene (HC  $\equiv$  CCH = CHC  $\equiv$  N) and vinylcyanoacetylene (H 2 C = CHC 3 N) in GOTHAM Observations of TMC-1 . *The Astrophysical Journal*, *908*(1), L11. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abdbb9
- Rivilla, V. M., Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Briones, C., Rodríguez-Almeida, L. F., Rico-Villas, F., Tercero, B., Zeng, S., Colzi, L., de Vicente, P., Martín, S., & Requena-Torres, M. A. (2021). Discovery in space of ethanolamine, the simplest phospholipid head group. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 118(22). https://doi.org/10.1073/pnas.2101314118
- Sandford, S. A., Nuevo, M., Nuevo, M., Bera, P. P., Bera, P. P., & Lee, T. J. (2020). Prebiotic Astrochemistry and the Formation of Molecules of Astrobiological Interest in Interstellar Clouds and Protostellar Disks. *Chemical Reviews*, *120*(11), 4616–4659. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00560
- Shields, G. A. (1999). A Brief History of Active Galactic Nuclei. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 111(760), 661–678. https://doi.org/10.1086/316378

Siebert, M. A., Lee, K. L. K., Remijan, A. J., Burkhardt, A. M., Loomis, R. A., McCarthy, M. C.,

& McGuire, B. A. (2022). CH 3 -Terminated Carbon Chains in the GOTHAM Survey of TMC-1: Evidence of Interstellar CH 3 C 7 N . *The Astrophysical Journal*, *924*(1), 21. https://doi.org/10.3847/1538-4357/ac3238

- Burkhardt, A. M., Long Kelvin Lee, K., Bryan Changala, P., Shingledecker, C. N., Cooke, I. R., Loomis, R. A., Wei, H., Charnley, S. B., Herbst, E., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Discovery of the Pure Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Indene (c-C9H8) with GOTHAM Observations of TMC-1. *The Astrophysical Journal Letters*, *913*(2), L18. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abfd3a
- Catone, D., Satta, M., Castrovilli, M. C., Bolognesi, P., Avaldi, L., & Cartoni, A. (2021).
  Photoionization of methanol: a molecular source for the prebiotic chemistry. *Chemical Physics Letters*, 771(February), 138467. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.138467
- Cotton, C. A., Claassens, N. J., Benito-Vaquerizo, S., & Bar-Even, A. (2020). Renewable methanol and formate as microbial feedstocks. *Current Opinion in Biotechnology*, 62, 168– 180. https://doi.org/10.1016/j.copbio.2019.10.002
- Ehrenfreund, P., & Cami, J. (2010). Cosmic carbon chemistry: from the interstellar medium to the early Earth. *Cold Spring Harbor Perspectives in Biology*, 2(12), 1–14. https://doi.org/10.1101/cshperspect.a002097
- Ferrière, K. M. (2001). The interstellar environment of our galaxy. *Reviews of Modern Physics*, 73(4), 1031–1066. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.1031
- Gao, L. G., Zheng, J., Fernández-Ramos, A., Truhlar, D. G., & Xu, X. (2018). Kinetics of the Methanol Reaction with OH at Interstellar, Atmospheric, and Combustion Temperatures. *Journal of the American Chemical Society*, 140(8), 2906–2918.
https://doi.org/10.1021/jacs.7b12773

- Kelvin Lee, K. L., Changala, P. B., Loomis, R. A., Burkhardt, A. M., Xue, C., Cordiner, M. A., Charnley, S. B., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Interstellar Detection of 2cyanocyclopentadiene, C 5 H 5 CN, a Second Five-membered Ring toward TMC-1 . *The Astrophysical Journal Letters*, 910(1), L2. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abe764
- Kelvin Lee, K. L., Loomis, R. A., Burkhardt, A. M., Cooke, I. R., Xue, C., Siebert, M. A., Shingledecker, C. N., Remijan, A., Charnley, S. B., McCarthy, M. C., & McGuire, B. A. (2021). Discovery of Interstellar trans -cyanovinylacetylene (HC  $\equiv$  CCH = CHC  $\equiv$  N) and vinylcyanoacetylene (H 2 C = CHC 3 N) in GOTHAM Observations of TMC-1 . *The Astrophysical Journal*, 908(1), L11. https://doi.org/10.3847/2041-8213/abdbb9
- Rivilla, V. M., Jiménez-Serra, I., Martín-Pintado, J., Briones, C., Rodríguez-Almeida, L. F., Rico-Villas, F., Tercero, B., Zeng, S., Colzi, L., de Vicente, P., Martín, S., & Requena-Torres, M. A. (2021). Discovery in space of ethanolamine, the simplest phospholipid head group. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, *118*(22). https://doi.org/10.1073/pnas.2101314118
- Sandford, S. A., Nuevo, M., Nuevo, M., Bera, P. P., Bera, P. P., & Lee, T. J. (2020). Prebiotic Astrochemistry and the Formation of Molecules of Astrobiological Interest in Interstellar Clouds and Protostellar Disks. *Chemical Reviews*, *120*(11), 4616–4659. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00560
- Shields, G. A. (1999). A Brief History of Active Galactic Nuclei. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 111(760), 661–678. https://doi.org/10.1086/316378

Siebert, M. A., Lee, K. L. K., Remijan, A. J., Burkhardt, A. M., Loomis, R. A., McCarthy, M. C.,

& McGuire, B. A. (2022). CH 3 -Terminated Carbon Chains in the GOTHAM Survey of

TMC-1: Evidence of Interstellar CH 3 C 7 N. The Astrophysical Journal, 924(1), 21.

https://doi.org/10.3847/1538-4357/ac3238

- Adams, F. C. (1987). Spectral Evolution of Young Stellar Objects. *ApJ*, 312, 788. doi:doi:10.1086/164924
- Aikawa, Y. F. (2012). Chemical Evolution of Protostellar Cores and Disks. I. Time-dependent Chemistry and the Formation of Primary Species. *The Astrophysical Journal*, 760(2), 40.
- Ali-Haïmoud, Y. (2014, January 21). Rotational spectroscopy of interstellar PAHs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 437(3), 2728–2743. doi:https://doi.org/10.1093/mnras/stt2083
- Andrews, S. M. (2005). Disk Evolution in the OB Association IC 1795. *The Astrophysical Journal*, 631(2), 1134.
- Arnett, D. (1996). Supernovae and Nucleosynthesis. Princeton University Press.
- Arnett, D. (1996). Supernovae and Nucleosynthesis: An Investigation of the History of Matter, from the Big Bang to the Present. *Princeton University Press*.
- Bergman, P. .. (2011). The Role of Grain Surface Chemistry in Astrochemistry.
- Blake et al. (1994). Molecular Abundances and Low-Mass Star Formation. II. Organic and Deuterated Species toward IRAS 16293-2422. *Astrophysical Journal*, 447 (2). doi:http://dx.doi.org/10.1086/175915
- Blake et al. (1995). A molecular line study of NGC 1333/IRAS 4. *the Astrophysical Journal*, 441. doi:doi:10.1086/175392
- Botta, O. e. (2007). Evolution of Complex Organic Molecules in Space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(35), 14227-14232.
- Burkhardt, A. M. (2021). Discovery of the Pure Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Indene (c-C9H8) with GOTHAM Observations of TMC-1. *The Astrophysical Journal Letters*, 913. doi:doi:10.3847/2041-8213/abfd3a
- Caselli, P. &. (2012). The Molecular Universe. Astronomy & Astrophysics Review, 20(1), 56.
- Caselli, P. C. (2012). Our astrochemical heritage. *Astron Astrophys Rev*, 20, 56. doi:https://doi.org/10.1007/s00159-012-0056-x
- Caux, E. e. (2011). TIMASSS: The IRAS16293-2422 Millimeter and Submillimeter Spectral Survey. I. Observations, Calibration and Analysis of the Line Kinematics. A&A, 532. doi:https://doi.org/10.1051/0004-6361/201015399

- CESR/IRAP. (2005). CASSIS A free interactive spectrum analyser. Retrieved from CASSIS (Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Instrumentaux et Synthétiques): http://cassis.irap.omp.eu/?page=presentation
- Changala, P. B. (2021). Interstellar Detection of 2-cyanocyclopentadiene, C5H5CN, a Second Five-membered Ring toward TMC-1. *The Astrophysical Journal Letters*, 910. doi:doi:10.3847/2041-8213/abe764
- Chiar, J. E. (2006). Infrared Spectroscopy of Interstellar Ices. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 44, 233-277.
- Chyba, C. F. (1992). Endogenous Production, Exogenous Delivery and Impact-Shock Synthesis of Organic Molecules: An Inventory for the Origins of Life. *Nature*, 355, 125-132.
- Ciesla, F. J. (2012). Organic Synthesis via Irradiation and Warming of Ice Grains in the Solar Nebula. *Science*, 336(6077), 452-454.
- Cieza, L. A. (2007). Millimeter Imaging of the Protoplanetary Disk AS 209. *The Astrophysical Journal*, 671(2), 605.
- Congiu, E. (2012). Efficient surface formation route of interstellar hydroxylamine through NO hydrogenation. I. The submonolayer regime on interstellar relevant substrates. *Journal of Chemical Physics*.
- Cowan, J. J. (2019). The R-Process Alliance: A Comprehensive Abundance Analysis of HD 222925, a Metal-poor Star with an Extreme r-process Enhancement of [Eu/H] = -0.14. *The Astrophysical Journal*, 887(2), 169.
- E. Koumpia, D. A. (2017). The chemical structure of the Class 0 protostellar envelope NGC 1333 IRAS 4A. *A&A*, 603. doi:https://doi.org/10.1051/0004-6361/201630160
- E. Wirström, e. a. (2011). Observational tests of interstellar methanol formation.
- Fiedler, E., Grossmann, G., Burkhard Kersebohm, D., & Weiss, G. a. (2005). *Methanol.* Weinheim: Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. .
- Frebel, A. (2018). The First Stars. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 56, 505-540.
- Garrod, R. T. (2013). Complex Organic Molecules in Star-Forming Regions of the Milky Way.
- Gottlieb, C. A. (1975). Laboratory Detection of the Negative Molecular Ion C6H-. *The Astrophysical Journal Letters*, , 195, L79.
- Hartmann, L. &. (1996). The Evolution of Low-Mass Stars. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 34(1), 207-240.
- Heger, A. &. (2010). The Nucleosynthetic Signature of Population III. *The Astrophysical Journal*, 724(1), 341-373.

- Herbst, E. &. (2009). Complex organic interstellar molecules. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*.
- Herbst, E. &. (2009). Complex organic interstellar molecules. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*.
- Herbst, E. &. (2009). Complex organic interstellar molecules. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*.
- Iain R. McNab. (1999). Rotational Spectroscopy, Theory. In J. C. Lindon, *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry* (pp. 2017-2028). Elsevier. doi:https://doi.org/10.1006/rwsp.2000.0267.
- J. I. González Hernández, e. a. (2010). SEARCHING FOR THE SIGNATURES OF TERRESTRIAL PLANETS IN SOLAR ANALOGS. *ApJ*, 720 1592.
- Jørgensen et al. (2016). The ALMA-PILS survey: First detections of deuterated formamide and deuterated isocyanic acid in the interstellar medium. *A&A*, 590. doi:https://doi.org/10.1051/0004-6361/201628612
- Karttunen, H., Kröger, P., Oja, H., Poutanen, M., & Donner, K. (2017). *Fundamental Astronomy* (Sixth edition ed.). Heidelberg: Springer.
- Kenyon, S. J. (1995). Class II methanol masers in NGC 2024: Signposts of star formation. *the Astrophysical Journal*, pp. 101, 117-144.
- Lada, C. J. (1987). Star formation in the Orion Nebula II The formation history of the OMC-1 molecular cloud. pp. 1-14.
- Larson, R. B. (1969). Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star. *mnras*, 145, 271. doi:doi:10.1093/mnras/145.3.271
- Lee, K. L. (2021). Discovery of Interstellar trans-cyanovinylacetylene (HC  $\equiv$  CCH = CHC  $\equiv$  N) and vinylcyanoacetylene (H2C = CHC3N) in GOTHAM Observations of TMC-1. *The Astrophysical Journal*, 908. doi:doi:10.3847/2041-8213/abdbb9
- Lefloch, B. e. (2018, July). Astrochemical Evolution Along Star Formation: Overview of the IRAM Large Program ASAI". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, Volume 477, Issue 4. doi:https://doi.org/10.1093/mnras/sty937
- Lis, D. C. (1991). Cold Dust in the IC 5146 Molecular Cloud. *The Astrophysical Journal*, 369, 600-611.
- Loomis, R. B. (2021). An investigation of spectral line stacking techniques and application to the detection of HC11N. *Nature Astronomy*, 188-196. doi:https://bibliotecavirtual.uis.edu.co:2236/10.1038/s41550-020-01261-4
- Lovas, F. J. (1979). Microwave Spectroscopy in Astrophysics. *Reviews of Modern Physics*, 51(2), 465.

- Lovas, F. J. (2004). Microwave Spectroscopy of Diatomic Molecules. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 33(1), 177-302.
- Mauersberger, R. (2003, Enero). 1<sup>er</sup> Congreso Nacional de Astrofísica Molecular: Una Visión General Del Potencial de Los Grupos de Química Españoles Anters Los Nuevos Desafíos de La Astrofísica. *Highlights from the IRAM-30m Telescope.*, (p. 13).
- Mavis D. Boamah, e. a. (2014). Low-energy electron-induced chemistry of condensed methanol: implications for the interstellar synthesis of prebiotic molecules. *Faraday discussions*.
- Max-Planck-Gesellschaft, Centre National de la Recherche Scientifique, & Instituto Geográfico Nacional. (1979). *IRAM Institut de Radioastronomie Milimétrique*. Retrieved from 30 meter telescope: https://www.iram-institute.org/EN/30-metertelescope.php?ContentID=2&rub=2&srub=0&ssrub=0&ssrub=0
- McCarthy, M. L. (2021). Interstellar detection of the highly polar five-membered ring cyanocyclopentadiene. *nature*, 176–180. doi:https://bibliotecavirtual.uis.edu.co:2236/10.1038/s41550-020-01213-y
- McGuire, B. A. (2018). . Interstellar Complex Organic Molecules. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 56, 1-36.
- McGuire, B. A. (2022). 2021 Census of Interstellar, Circumstellar, Extragalactic, Protoplanetary Disk, and Exoplanetary Molecules. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 51.
- Mihwa Jin, R. T. (2020). Formation of Complex Organic Molecules in Cold Interstellar Environments through Nondiffusive Grain-surface and Ice-mantle Chemistry. *ApJS*, 249 26.
- Müller, H. S. (2019). Rotational Spectroscopy: The Cornerstone of Astronomical Spectroscopy. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 57, 41-76.
- Núria Marcelino., e. a. (2009). Discovery of Fulminic Acid, HCNO, in Dark Clouds. *ApJ*, 690 L27. doi:https://doi-org.bibliotecavirtual.uis.edu.co/10.1088/0004-637X/690/1/L27
- Öberg, K. I. (2020). Chemistry During the Formation of Stars. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 58, 343-388.
- Pagani, L. &. (2013). Hunting for High-Mass Starless Cores. Astronomy & Astrophysics, 557, A15.
- Pickett, H. M. (1998). Submillimeter, Millimeter and Microwave Spectral Line Catalog. *Journal* of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 60(5), 883-890.
- Pringle, J. E. (1981). Pringle, J. E. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 137-160. doi:doi:10.1146/annurev.aa.19.090181.001033
- Quitián-Lara, H. M. (2024, February). Decoding the molecular complexity of the solar-type protostar NGC 1333. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Volume* 527(Issue 4), pp. 10294–10308. doi:https://doi.org/10.1093/mnras/stad3873

- Ryan, S. G. (2011). Stellar Nucleosynthesis, Supernovae, and the Origin of Elements. (World Scientific Handbook of Meteorites, Comets, and Planets.). (G. R. Osinski, Ed.)
- Sakai, N. S. (2008). Abundant Carbon-Chain Molecules toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527. *The Astrophysical Journal*, 672(1), 371. doi:doi:10.1086/523635
- Sakai, N. S. (2009). DISCOVERY OF THE SECOND WARM CARBON-CHAIN-CHEMISTRY SOURCE, IRAS15398 – 3359 IN LUPUS. *The Astrophysical Journal*, 697(1), 769. doi:doi:10.1088/0004-637X/697/1/769
- Siebert, M. A. (2022). CH3-Terminated Carbon Chains in the GOTHAM Survey of TMC-1: Evidence of Interstellar CH3C7N. *The Astrophysical Journal*, 924. doi:doi:10.3847/1538-4357/ac3238
- Soderblom, D. &. (1998). Solar-Type Stars: Basic Information on Their Classification and Characterization.
- Stahler, S. W. (2005). The Formation of Stars. Wiley-VCH.
- Swings, P. &. (1937). Considerations Regarding Interstellar Molecules. *Astrophysical Journal*, 483-486.
- Takano et al. (2011). A Search for Interstellar Carbon Chain Alcohol HC4OH in Star-Forming Region L1527 and Dark Cloud TMC-1". *ApJ*, 744. doi:doi:10.1088/0004-637X/744/2/163
- Turner, B. E. (1991). Astrophysical Detection of the HCO Molecule: The Chemistry of Dark Cloud Cores.
- V. G. Gámez-García, A. G. (2017). Systematic Search for Chemical Reactions in Gas Phase Contributing to Methanol Formation in Interstellar Space. *Journal of Physical Chemistry A*.
- Vastel et al. (2015). CASSIS: a tool to visualize and analyse instrumental and synthetic spectra. *Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics*. Retrieved from 2015sf2a.conf..313V
- Watanabe et al. (2012). An Unbiased Spectral Line Survey toward R CrA IRS7B in the 345 GHz Window with ASTE. *ApJ*, 745 126. doi:doi:10.1088/0004-637X/745/2/126
- White, G. J. (1995). Molecular Gas and Dust in the Milky Way. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, , 259(2), 401-407.
- Wilking, B. A. (1989). The evolutionary status of stars in NGC 2024. *The Astrophysical Journal*, pp. 340, 823-839.
- Willacy, K. &. (2009). Chemical Evolution in Protoplanetary Disks. *The Astrophysical Journal*, 703(1), 479.
- Wilson, T. L. (1994). Introduction to Microwave Spectroscopy. Springer.

- Woosley, S. E. (1995). The Evolution and Explosion of Massive Stars. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 101, 181.
- Wootten, A. (2009). The Atacama Large Millimeter/Submillimeter Array. *The Astronomical Journal*, 137(5), 3718-3721.
- Yuri L. Dorokhov, A. V. (2015). Metabolic Methanol: Molecular Pathways and Physiological Roles. American Physiological Society, 603 - 644. doi:https://doi.org/10.1152/physrev.00034.2014