

Formación del ion negativo de carbón por asociación radiativa

J. Campos, A. Lipovka, J. Saucedo

*Centro de Investigación en Física, Universidad de Sonora,
Rosales y Blvd. Transversal, Col. Centro, Edif. 3-I 83000 Hermosillo, Sonora, MEXICO,
Apartado Postal 5-088 Tel.: (52-662) 259-21-56. Fax: (52-662) 212-66-49
e-mail: jcampos@cajeme.cifus.uson.mx*

V. Zalkind

*Ioffe Physical Technical Institute,
26 polytekhnicheskaya, St Petersburg 194021, Russian Federation,
Fax: (812) 297-10-17, Phone: (812) 297-10-17*

Recibido el 23 de marzo de 2007; aceptado el 13 de agosto de 2007

En el presente trabajo se considera el problema de la asociación radiativa de átomos de carbón C con electrones e^- en el intervalo de temperaturas cinéticas T_c de $100 \leq T_c < 3000^\circ\text{K}$. El cálculo de la razón de dicha asociación se realiza empleando el principio del balance detallado. Se muestra que la razón tiene el comportamiento esperado conforme aumenta la temperatura. Algo similar ocurre en la formación del ion negativo del hidrógeno H^- , donde la razón también crece con la temperatura.

Descriptores: Procesos moleculares y químicos e interacciones; plasma astrofísico; cosmología

In the present paper the problem of the radiative association of atoms of carbon C with electrons e^- at an interval of kinetic temperatures T_c of $100 \leq T_c < 3000^\circ\text{K}$ is considered. The calculation of the rate of these associations has been made by using the principle of detailed balance. It is shown that the rate has the expected behavior (it increases with the temperature). This behavior is very similar to the one found for the H^- formation rate coefficient, which also increases with the temperature.

Keywords: Molecular and chemical processes and interactions; astrophysical plasma; cosmology

PACS: M 95.30.Ft; 95.30.Qd; 98.80.-k

1. Introducción

En años recientes se ha visto en la literatura un notable interés por el estudio de la formación de moléculas de CH en el contexto cosmológico [1-5]. Este interés es debido a que los átomos de C y H forman parte del pico en la distribución de núcleos que se forman en núcleos primigenios, en modelos no estándar de nucleosíntesis [6]. Las considerables abundancias de moléculas basadas en estos átomos pesados, posiblemente sean los únicos instrumentos que disponemos para medir condiciones físicas que aparecen en el universo temprano. Éstos pueden permitirnos elegir entre diferentes modelos de nucleosíntesis primordial no estándar (los cuales son temas de mucha discusión en la actualidad). Por otro lado, estas mismas abundancias pueden también utilizarse para establecer límites superiores a las abundancias predichas por el modelo estándar de nucleosíntesis primordial.

El ion negativo de carbón C^- , el cual tiene una energía de amarre de $D_0 = 1.25 \text{ eV}$ [7-9], es más estable que el ion negativo de hidrógeno H^- con $D_0 = 0.75 \text{ eV}$, por lo cual juega un importante papel en la química del carbón en combustibles, en la química del gas en astrofísica (cascarones de estrellas, supernovas, cinética molecular de nubes moleculares en la galaxia, así como extragalácticas).

La molécula CH juega un papel protagónico, tal como fue propuesto en nuestro artículo anterior [10], debido a que por un lado se forma rápidamente durante la época pregaláctica y, por otro, el carbón C es una especie muy sensible a

los modelos de Big Bang y a inhomogeneidades primigenias. Como se mencionó en la Ref. 10, los canales principales de formación de CH primordial son: $C + H_2 \rightarrow CH + H$. Pero por analogía con el caso del hidrógeno molecular H_2 , el cual se forma por medio de la cadena: $H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$ y $H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$ mediando la formación de iones negativos de H , en la formación molecular de CH debe haber un canal que medie la formación del ion negativo de carbón C^- . Esta especie se forma por medio de la reacción $C + e^- \rightarrow C^- + \gamma$. La razón de esta reacción fue calculada en la Ref. 11. Pero, en dicho artículo, los autores usaron una aproximación de secciones eficaces para bajas energías, la cual sólo cuenta con un término, que corresponde a velocidades pequeñas de las especies. Esto los lleva a una razón que muestra un comportamiento incorrecto en el intervalo de temperaturas de interés (de 100 a 1000K). Éstas corresponden al caso de formación molecular en la era oscura, por lo cual son de gran importancia para este trabajo.

Como consecuencia del principio del balance detallado, la sección eficaz del proceso puede calcularse con la ayuda de su proceso inverso [12-13]. Tal proceso corresponde al desprendimiento radiativo $C^- + \gamma \rightarrow C + e^-$.

En este artículo se calcula la razón de asociación radiativa de C con e^- , para formar un ion negativo de carbón C^- , usando el principio del balance detallado. En la segunda sección se presenta una discusión más detallada de los canales de formación y destrucción de CH primordial. En la tercera se presentan las ecuaciones para el cálculo de la razón. En

la cuarta se presenta el resultado del cálculo y se discute dicho resultado, comparándolo con el resultado obtenido en la Ref. 11. En la parte final se presenta la conclusión de este trabajo.

2. Canales de Formación de CH

La molécula de CH se forma fundamentalmente a través de canales que involucran al hidrógeno atómico, hidrógeno molecular y átomos de carbón primordial. En la Ref. 10 se presenta un conjunto muy amplio de parámetros de las velocidades de reacción que se requieren para hacer el cálculo de la evolución de las moléculas basadas en el carbón primordial. En ese mismo artículo, encontramos que no era necesario obtener abundancias para las especies complejas, por ser demasiado pequeñas y de escaso interés para esta investigación, de tal forma que se puede reducir el conjunto de canales y dejar sólo los de mayor importancia. Como se mencionó en ese artículo, los canales principales para la formación y destrucción de CH, se llevan a cabo a través de las reacciones neutras $C + H_2 \rightarrow CH + H$ y $CH + H \rightarrow H_2 + C$, respectivamente. Sin embargo, en la Ref. 14 se muestran datos y una revisión más actualizada de estos procesos.

En la Ref. 15 se muestra una investigación muy detallada sobre el canal de formación de CH ($C + H_2 \rightarrow CH + H$), en la cual se sugiere la sección transversal para este proceso, encontrándose un resultado que está en excelente acuerdo con los datos experimentales. La velocidad de reacción para este canal de formación de CH está dada por

$$R_1 = 1.16 \cdot 10^{-9} \left(\frac{T_r}{300}\right)^{0.5} \exp\left(\frac{-14100}{T_r}\right), \quad (1)$$

donde $T_r = T_0(1+z)$ es la temperatura de la radiación de fondo cósmica, z es el corrimiento al rojo y T_0 es la temperatura de la radiación de fondo cósmica en la época actual ($z = 0$). Utilizando la relación anterior, en la Ref. 10 obtuvimos una velocidad de reacción (para $z \approx 100$) de $10^{-25} \text{cm}^3/\text{s}$, correspondiente al principal canal de formación de CH ($C + H_2 \rightarrow CH + H$).

Para el proceso inverso (destrucción de CH) $CH + H \rightarrow C + H_2$, la velocidad de reacción es dada por

$$R_2 = 9.0 \cdot 10^{-11} \left(\frac{T_r}{300}\right)^{0.3} \exp\left(\frac{-580}{T_r}\right), \quad (2)$$

la cual se encuentra en muy buen acuerdo con resultados experimentales.

Por otro lado, en la Ref. 14 se sugieren los datos teóricos más recientes sobre secciones transversales y velocidades de reacción, donde se realiza una comparación con datos experimentales (ver referencias ahí).

3. Ecuaciones para el cálculo de la razón

El proceso de desprendimiento se consideró en detalle en la Ref. 16. En dicho artículo se calculó la sección eficaz del

proceso de desprendimiento de C^- , a través de un método de primeros principios en mecánica cuántica. Dicho cálculo se encuentra en excelente acuerdo con datos experimentales.

Consideremos un balance detallado entre reacciones de ambos lados, directa ($C + e^- \rightarrow C^- + \gamma$) e inversa ($C^- + \gamma \rightarrow C + e^-$). El número de reacciones correspondientes a la asociación radiativa por cm^3/s en un intervalo de velocidades desde v hasta $v + dv$ está dado por

$$Z_a = N_C N_e f(v) v dv \sigma_a, \quad (3)$$

donde la función de distribución de Maxwell integrada para los ángulos θ y ϕ es

$$f(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT}\right), \quad (4)$$

donde v es la velocidad relativa entre las especies, N_C y N_e son las abundancias de C y e^- . Por otro lado, el número de reacciones inversas (desprendimiento radiativo) por cm^3/s en el intervalo de frecuencias desde ν hasta $\nu + d\nu$ está dado por

$$Z_d = N_{nC^-} \frac{U_\nu}{h\nu} d\nu c \sigma_d \left[1 - \exp\left(\frac{-h\nu}{kT}\right)\right], \quad (5)$$

donde N_{nC^-} es la abundancia de C^- y U_ν es la densidad de energía del cuerpo negro, la cual es dada por

$$U_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1\right]}, \quad (6)$$

y c es la velocidad de la luz.

La densidad de C^- está dada por la relación

$$N_{nC^-} = \frac{g_m}{Z_{C^-}} N_{C^-} \exp\left(\frac{-E_m + D_0}{kT}\right), \quad (7)$$

donde D_0 es la energía de desprendimiento, g_m es el peso estadístico, Z_{C^-} es la suma estadística y N_{C^-} es la abundancia total de C^- .

Igualando las Ecs. (3) y (5) y usando la Ec. (7), obtenemos la relación para secciones eficaces para el desprendimiento radiativo:

$$\sigma_a = \sigma_d \frac{g_m}{Z_{C^-}} \frac{U_\nu}{f(v)} \left(\frac{d\nu}{dv}\right) \frac{c}{h\nu v} \frac{N_{C^-}}{N_C N_e} \times \left[1 - \exp\left(\frac{-h\nu}{kT}\right)\right] \exp\left(\frac{-E_m + D_0}{kT}\right). \quad (8)$$

De la ley de Saha tenemos

$$\frac{n^*(X^{r+1}) n_e}{n^*(X^r)} = 2 \frac{g_{r+1,1}}{g_{r,1}} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{3/2} \exp(-\phi_r/kT),$$

la cual describe la distribución de átomos de un elemento X en diferentes etapas de ionización. En equilibrio termodinámico [17], las abundancias adoptarían la forma

$$\frac{N_{C^-}}{N_C N_e} = \left(\frac{h^2}{2\pi m kT}\right)^{3/2} \frac{Z_{C^-}}{Z_C Z_e} \exp\left(\frac{D_0}{kT}\right). \quad (9)$$

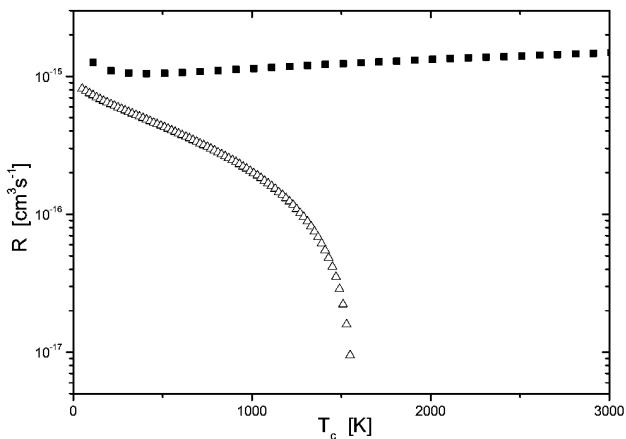


FIGURA 1. Resultado de la razón $R_a(T_c)$ para la formación de iones negativos de carbón C^- usando el principio del balance detallado. La curva de los cuadros sólidos representa nuestra predicción teórica. Los triángulos blancos describen el resultado obtenido en la Ref. 11.

Substituyendo (9) en (8) y tomando en cuenta la ley de conservación de la energía

$$h\nu = \frac{mv^2}{2} - E_n. \tag{10}$$

Con esto la relación de secciones eficaces resulta ser

$$\sigma_a = \frac{2g_n}{Z_C Z_e} \left(\frac{h\nu}{mcv} \right)^2 \sigma_d, \tag{11}$$

donde Z_C es la suma estadística.

Finalmente, la razón de la asociación radiativa $C + e \rightarrow C^- + \gamma$, está dada por la integral

$$R_a(T_c) = \int_0^\infty \sigma_a f(v) v dv. \tag{12}$$

donde $f(v)$ es la función de distribución, dada por la Ec. (4) y v es la velocidad electrónica.

4. Resultados del cálculo

Las relaciones (11) y (12) con los datos para la sección eficaz del proceso inverso ($C^- + \gamma \rightarrow C + e^-$) [16] nos permiten resolver la tarea y calcular la sección eficaz y la razón para la asociación radiativa $C + e^- \rightarrow C^- + \gamma$. A diferencia del cálculo realizado en la Ref. 11, nosotros lo hemos hecho tomando en cuenta el principio del balance detallado. De esta forma, hemos obtenido una razón que muestra un comportamiento correcto en la region de temperaturas de interés.

En la Fig. 1 mostramos el resultado de nuestro cálculo, junto con el obtenido en la Ref. 11. En esta figura, los cuadros sólidos representan a nuestro resultado, el cual fue obtenido usando el principio del balance detallado. Los triángulos

blancos representan el resultado ofrecido en la Ref. 11. La comparación de ambos resultados muestra un buen acuerdo de los cálculos en regiones de baja temperatura cinética T_c . Sin embargo, conforme dicha temperatura se incrementa, empiezan a ser visibles las discrepancias de ambas predicciones teóricas para la razón. Se ve claramente que mientras la temperatura cinética crece, la razón calculada en la Ref. 11, cae estrepitosamente. Tal comportamiento, como se ha señalado anteriormente, aparece debido a una simplificación de sus cálculos, al cancelar la componente de la sección eficaz que corresponde a altas energías. Dicha simplificación realmente no afecta tanto la razón en el régimen de temperaturas pequeñas, pero en el caso de temperaturas altas y medias, la discrepancia es enorme. Tales discrepancias ilustran la descripción correcta predicha en el límite de altas temperaturas por nuestro cálculo, las cuales podemos comparar con la bien conocida razón para formación de H^- ($H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$).

La velocidad de reacción para la formación de H^- está dada explícitamente por

$$R_3 = 3.00 \cdot 10^{-16} \left(\frac{T_r}{300} \right)^{1.00} \exp \left(\frac{-0.00}{T_r} \right), \tag{13}$$

la cual se proporciona detalladamente en la Ref. 10. La razón para la formación de H^- se proporciona en la Ref. 11, aunque también, en el intervalo de bajas temperaturas. Ahí se muestra que la velocidad de reacción para la formación de H^- alcanza un límite a alta temperatura ($= 6.225 \cdot 10^{15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$).

5. Conclusion

En este trabajo se derivó una expresión analítica que relaciona a las secciones eficaces de asociación y de desprendimiento [ver Ec. (11)] a partir del principio del balance detallado. Posteriormente, calculamos la razón de asociación radiativa R_a de átomos de carbón C con electrones e^- , a través de la reacción $C + e^- \rightarrow C^- + \gamma$, usando tal principio. De tal manera que la razón obtenida en este trabajo tiene un comportamiento muy parecido al de la razón de formación de H^- para temperaturas bajas, medias y altas (desde 100K hasta 3000K) [11,18]; logrando así la obtención de la razón de formación de C^- con un comportamiento correcto con la temperatura cinética, la cual es aproximadamente constante, tal y como se muestra en la Fig. 1. En la Ref. 10 se muestra que la velocidad de reacción para la reacción $H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$ está dada por $R_3 = 3.00 \cdot 10^{-16} (T_r/300)^{1.00} \exp(-0.00/T_r)$, lo que permite confirmar la semejanza en la descripción entre las razones de formación de C^- y H^- , para un amplio rango de temperaturas.

1. T. Rauscher, *Phys.Rev. D* **75** (2007) 068301.
2. S. Matsuura, S. Fujimoto, S. Nishimura, M. Hashimoto y K. Sato, *Phys. Rev. D* **72** (2005) 123505.
3. G. Steigman, *Int. J. Mod. Phys. E* **15** (2006) 1.
4. J.F. Lara, *Phys. Rev. D* **72** (2005) 023509.
5. K. Jedamzik y J. Rehm, *Phys. Rev. D* **64** (2001) 023510.
6. T. Rauscher, J.H. Applegate, J.J. Cowan, F.K. Thielemann y M. Wiescher, *Ap.J.* **429** (1994) 499.
7. T. Andersen, *Physics Reports* **394** (2004) 157.
8. T. Andersen, H.K. Haugen y H. Hotop, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **28** (1999) 1511.
9. W.P. Wijesundera y F.A. Parpia, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 3462.
10. A. Lipovka, J. Saucedo y J. Campos, *RMF* **48** (2002) 325.
11. R.K. Janev y H.V. Regemorte, *Astron. & Astrophys.* **37** (1974) 1.
12. J.K. Martin, *Physical Review* **97** (1955) 1446.
13. F. Coester, *Physical Review* **84** (1951) 1259.
14. R. van Harrevelt, M.C. van Hemert y G.C. Schatz, *J. Chem. Phys.* **116** (2002) 6002.
15. R. Guadagnini, y G.C. Schatz, *J. Chem. Phys.* **100** (1996) 18944.
16. Yu.V. Moskvina, *Opt. Spektrosk.* **17** (1964) 270.
17. L. Spitzer, Jr., *Physical Processes in the Interstellar Medium* (Wiley Classics Library Edition Published 1998).
18. P.C. Stancil y A. Dalgarno, *Faraday Discuss.* **109** (1998) 61.