

SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR  
TECNOLÓGICA



SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA

**SEP**

**TRABAJO PROFESIONAL**  
**COMO REQUISITO PARA OBTENER EL TITULO DE:**  
**INGENIERO BIOQUÍMICO**

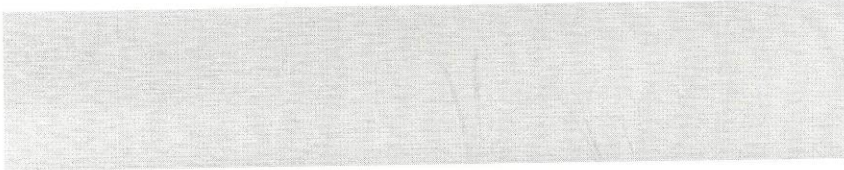
**QUE PRESENTA:**  
**JULIO ALBERTO SÍMUTA LÓPEZ**

**CON EL TEMA:**  
**“CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE LOS COMPUESTOS  
FORMADOS EN FASE GAS A PARTIR DE UNA  
ATMÓSFERA SIMULADA DE TITÁN EN CONDICIONES DE  
BAJA TEMPERATURA Y FLUJO CONTINUO”**

**MEDIANTE:**  
**OPCION I**  
**(TESIS PROFESIONAL)**

**TUXTLA GUTIERREZ, CHIAPAS**

**MAYO 2012**



SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR TECNOLÓGICA  
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TUXTLA GUTIÉRREZ

SECRETARÍA DE  
EDUCACIÓN PÚBLICA

DIRECCIÓN  
SUBDIRECCIÓN ACADÉMICA  
DIVISIÓN DE ESTUDIOS PROFESIONALES  
Tuxtla Gutiérrez, Chiapas., 14/FEBRERO/2012

OFICIO NUM. DEP-CT-026/2012

**C. JULIO ALBERTO SÍMUTA LÓPEZ**  
PASANTE DE LA CARRERA DE INGENIERÍA BIOQUÍMICA  
EGRESADO DEL INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TUXTLA GUTIÉRREZ  
P R E S E N T E.

Habiendo recibido la comunicación de su trabajo profesional por parte de los CC.DR. ARNULFO ROSALES QUINTERO, M. en C. JOSÉ HUMBERTO CASTAÑÓN GONZÁLEZ, M. en C. JUAN JOSÉ VILLALOBOS MALDONADO y DRA. ROCÍO MEZA GORDILLO, en el sentido que se encuentra satisfactorio el contenido del mismo como prueba escrita, **AUTORIZO** a Usted a que se proceda a la impresión del mencionado Trabajo denominado:

**"CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE LOS COMPUESTOS FORMADOS EN FASE GAS A PARTIR DE UNA ATMÓSFERA SIMULADA DE TITÁN EN CONDICIONES DE BAJA TEMPERATURA Y FLUJO CONTINUO"**

Registrado mediante la opción:  
**I (TESIS PROFESIONAL)**

ATENTAMENTE  
"CIENCIA Y TECNOLOGÍA CON SENTIDO HUMANO"

ING. ROBERTO CIFUENTES VILLAFUERTE  
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS PROFESIONALES

C.c.p.- Departamento de Servicios Escolares  
C.c.p.- Expediente  
I/JLMN/I'RCV/L'ORC

Secretaría de Educ. Pública  
Instituto Tecnológico  
de Tuxtla Gutiérrez  
Div. de Est. Profesionales

Carretera Panamericana Km.1080. . C.P. 29050, Apartado Postal 599  
Teléfonos: (961) 61 5-03-80 (961) 61 5-04-61 Fax: (961) 61 5-16-87  
<http://www.ittg.edu.mx>

Vo. Bo.

M. en C. JOSÉ LUIS MENDEZ NAVARRO  
DIRECTOR



Alcance del Sistema: Proceso Educativo

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco primeramente a Dios por permitirme abrir mis ojos cada mañana con salud, armonía y amor compartiéndolo con mis familiares, amigos y personas que me rodean.

Dra. Sandra I. Ramírez ante todo le agradezco su apoyo y paciencia infinita que me brindó durante la realización de mi tesis sus valiosos consejos y comentarios enriquecieron mi conocimiento dándole un sentido nuevo a la vida.

Dr. Arnulfo Rosales por su apoyo en todo momento de las diferentes etapas en el desarrollo de la tesis, sin duda fueron parte fundamental.

Dra. Rocío Meza por su amabilidad, comprensión y apoyo en lo académico y personal, sus aportaciones fueron de gran ayuda en el escrito.

M.C. Juan José Villalobos sin duda usted ha estado en diversas etapas de mi formación académica le agradezco su amabilidad, su apoyo y la disposición incondicional en todo momento que lo requerí, más que nada siento que tuve un amigo más a mi lado.

M.C. José Humberto Castañón por su contribución en los conocimientos y sus valiosos comentarios en el escrito.

M.C. Gastón Contreras por sus grandes conocimientos que me transmitió en un lapso de tiempo corto para lograr entender algunos aspectos del tema de mi tesis.

A los Biólogos Maricarmen y Sergio por brindarme su amistad de manera incondicional, por compartir sus amigos y familiares así como fiestas y convivios que llegaron hacerme sentir con si estuviera en casa.

IBQ Felipe Alonzo quien me demostró ser un gran amigo estando en las circunstancias buenas y malas gracias por compartir tus experiencias y convivir todas las aventuras a lo largo de este tiempo.

Al Sr. Juan José Hernández por su dedicación a los trabajos de vidrio que me laboro, sus manos arreglaron muchas veces las herramientas de mi trabajo.

A mis compañeros de laboratorio Nancy, Israel y Juan con quienes conviví grandes momentos así también retroalimentaron muchos aspectos de mi vida.

A mis amigos Néstor y Nilda por todos los momentos de alegría y tristeza que hemos compartido juntos a largo de la licenciatura, su cariño ha sido el más honesto y generoso que he vivido en toda mi vida, sin su apoyo no lo hubiera logrado.

A todos mis amigos que de otra forma me animaron, recomendaron y sugirieron para lograr terminar la tesis por su apoyo.... Muchas gracias.

## **DEDICATORIA**

A mi madre la persona que más amo en la vida todo lo que soy te lo debo a ti mamita linda sin tus cuidados, cariños, consejos y desvelos no habría llegado a esta etapa de mi vida. Nunca olvidare todo el esfuerzo que realizaste para salir adelante en los momentos tan difíciles que hemos vivido juntos compartir esos días han valido la pena y esto es apenas uno de los frutos que comienzas a cosechar.

A mi padre quien ha logrado cambiar las cosas y tratar de vivir la vida junto a nosotros: su familia, tus consejos han sido mi motor en los pasos más difíciles que he tomado en mi vida, sé que no hay fin para la experiencia que tienes que transmitirme.

A mi hermano Eduardo se que tienes que seguir un buen ejemplo a lo mejor no sea excelente pero hare todo lo posible para que tu camino no sea tan difícil como el mío aprende de mis errores, si yo lo logre tu puedes.

A mi madrina Maricruz quien me ha mostrado lo importante que es luchar en la vida y no dejarse caer por cualquier motivo esas ganas de salir adelante lo he aprendido de usted.

A mis abuelos Evelia y Victor quienes me han enseñado el amor por la vida y la familia, sus consejos tan valiosos no los cambiaría por nada en el mundo.

## **LUGAR DE REALIZACIÓN**

El proyecto de investigación se llevo a cabo dentro de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM) en las instalaciones ubicadas en el Centro de Investigaciones Químicas (CIQ) en el laboratorio número 11 correspondiente a la Simulación de Atmósferas Planetarias.

# ÍNDICE

	PÁG
ÍNDICE DE FIGURAS.....	iv
ÍNDICE DE TABLAS.....	vi
RESUMEN.....	vii
<b>CAPÍTULO 1.</b>	
<b>INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>CAPÍTULO 2.</b>	
<b>MARCO TEÓRICO.....</b>	<b>2</b>
2.1 TITÁN UN SATÉLITE CON ATMÓSFERA.....	2
2.2 MISIÓN CASSINI-HUYGENS.....	4
2.3 EL ORIGEN DE TITÁN Y LA FORMACIÓN DE UNA ATMÓSFERA.....	7
2.4 CONSTITUYENTES DE LA ATMÓSFERA.....	11
2.5 IMPORTANCIA DEL CO.....	14
2.6 LA ESTRUCTURA ATMOSFÉRICA.....	16
2.7 TIPOS DE ENERGÍA EN LA ATMÓSFERA DE TITÁN.....	18
2.8 ACTIVIDAD ELÉCTRICA.....	18
2.9 SIMULACIONES EXPERIMENTALES Y TEÓRICAS.....	21
2.10 ASTROBIOLOGÍA.....	22
<b>CAPÍTULO 3.</b>	
<b>OBJETIVOS.....</b>	<b>27</b>
3.1 GENERAL.....	27
3.2 ESPECÍFICOS.....	27
<b>CAPÍTULO 4.</b>	
<b>PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....</b>	<b>28</b>
<b>CAPÍTULO 5.</b>	
<b>JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN.....</b>	<b>29</b>
<b>CAPÍTULO 6.</b>	
<b>DESARROLLO EXPERIMENTAL.....</b>	<b>30</b>
6.1 SIMULACIÓN DE LA ATMÓSFERA DE TITÁN.....	30
6.1.1 PREPARACIÓN DEL LLENADO DE LA BALA Y LA MEZCLA DE GASES.....	30
6.1.2 LIMPIEZA DE LA RED TUBERÍA Y CONTENEDOR METÁLICO (BALA).....	32
6.2 PREPARACIÓN DE UN AMBIENTE LIBRE DE LA ATMÓSFERA TERRESTRE.....	33
6.3 ESPECIFICACIONES DEL REACTOR.....	35
6.3.1 LLENADO DEL REACTOR CON LA MEZCLA GASEOSA.....	36
6.3.2 LIMPIEZA DEL REACTOR.....	36

	PÁG.
6.4 APLICACIÓN DE LAS DESCARGAS ELÉCTRICAS.....	37
6.5 CONDICIONES EXPERIMENTALES.....	38
6.6 ELABORACIÓN DE UNA GRÁFICA DE CALIBRACIÓN.....	38
6.6.1 CÁLCULO DEL NÚMERO DE MOLÉCULAS DE LOS COMPUESTOS.....	39
6.6.2 CÁLCULO DE LA ENERGÍA DEPOSITADA EN LAS SIMULACIONES.....	41
6.6.3 CÁLCULO DEL RENDIMIENTO ENERGÉTICO.....	41
6.7 ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS DEL CROMATÓGRAFO DE GASES ACOPLADO AL ESPECTROMETRO DE MASAS.....	42
6.8 DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN SISTEMA DE FLUJO CONTINUO.....	44
 <b>CAPÍTULO 7.</b>	
<b>RESULTADOS Y DISCUSIONES.....</b>	<b>49</b>
7.1 ANÁLISIS CUALITATIVO DE LOS PRODUCTOS DE LAS IRRADIACIONES.....	49
7.2 ANÁLISIS CUANTITATIVO DE LA FASE GAS.....	54
7.3 DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS CROMATOGRÁFICOS.....	55
7.4 DETERMINACIÓN DE LOS RENDIMIENTOS ENERGÉTICOS PARA LOS COMPUESTOS SINTETIZADOS..	57
7.5 ANÁLISIS EN EL SISTEMA DE FLUJO CONTINUO.....	61
 <b>CAPÍTULO 8.</b>	
<b>CONCLUSIONES.....</b>	<b>62</b>
 <b>CAPÍTULO 9.</b>	
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>63</b>
 <b>CAPÍTULO 10.</b>	
<b>ANEXOS.....</b>	<b>68</b>
<b>ANEXO A. ECUACIONES DE LOS PARÁMETROS CROMATOGRÁFICOS.....</b>	<b>68</b>
A1. NÚMERO DE PLATOS TEÓRICOS.....	68
A2. ALTURA DE PLATOS TEÓRICOS.....	68
A3. RESOLUCIÓN.....	68
A4. FACTOR DE SELECTIVIDAD.....	68
A5. FACTOR DE CAPACIDAD.....	68
<b>ANEXO B. CROMATOGRAMAS DE LOS COMPUESTOS PRODUCIDOS EN FASE GAS.....</b>	<b>69</b>
B1. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/0.5 MIN].....	69
B2. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/1.0 MIN].....	70
B3. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/2.0 MIN].....	71
B4. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/5.0 MIN].....	72
B5. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/10.0 MIN].....	73
B6. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/20.0 MIN].....	74
B7. CROMATOGRAMA [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K/30.0 MIN].....	75

	PÁG.
<b>ANEXO C. GRÁFICAS DE RENDIMIENTOS ENERGÉTICOS DE LOS COMPUESTOS IDENTIFICADOS EN LA</b>	
<b>FASE GAS DE LOS EXPERIMENTOS.....</b>	<b>76</b>
C1. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	76
C2. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	77
C3. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	77
C4. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	78
C5. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	78
C6. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	79
C7. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	79
C8. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	80
C9. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	80
C10. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	81
C11. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	81
C12. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	82
C13. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	82
C14. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	83
C15. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	83
C16. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	84
C17. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> / 98:2/[+]/83K].....	84
C18. GRÁFICA DE RENDIMIENTO ENERGÉTICO [62.5 W/ N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> /98:2/[+]/83K].....	85



# ÍNDICE DE FIGURAS

	PÁG.
<b>Figura 1.</b> Una impresión artística del orbitador Cassini lanzando a la sonda Huygens hacia el misterioso Titán. Referencia ESA-D DUCRO.....	6
<b>Figura 2.</b> Representación artística del proceso de acreción creando a los planetas del Sistema Solar este mismo mecanismo llevó a cabo Titán en los alrededores del planeta Saturno. Referencia David Bardini.....	8
<b>Figura 3.</b> Imagenes tomadas por la sonda Huygens, revelando regiones oscuras atribuyendo la formación de lagos de metano en la superficie de Titán. a) Una isla de 90 x 150 km de longitud, b) Lago de varios compartimientos aproximadamente de 20 x 25 km. C) Dos lagos localizados en el lado Oeste del satélite. Adaptado de NASA/Instituto de Ciencia Espacial.....	10
<b>Figura 4.</b> Recuadro superior: Mediciones del orbitador Cassini/CIRS a una altitud de 100 -200 km identificando hidrocarburos y nitrilos. Recuadro inferior: observaciones en el infrarrojo localizando la banda de metano a los $1305\text{ cm}^{-1}$ . Coustenis <i>et al</i> , (2007).....	12
<b>Figura 5.</b> Espectro de infrarrojo del CIRS de la misión Cassini-Huygens de los compuestos químicos identificados en el intervalo de 200 a $1400\text{ cm}^{-1}$ Coustenis <i>et al</i> , (2007).....	13
<b>Figura 6.</b> Espectro de masas de la atmósfera de Titán. Recuadro superior: a una altitud de 120 - 140 km con un total de 104 espectros. Recuadro medio: a una altitud de 75 - 77 km un promedio de 43 espectros. Recuadro inferior: en la superficie alrededor de 432 espectros de masas indicado la relación masa-carga de los compuestos detectados. Algunos compuestos químicos identificados son: metano, nitrógeno, monóxido de carbono, cianógenos y benceno. Niemann, (2005).....	13
<b>Figura 7.</b> Esquema de la fotoquímica del nitrógeno molecular ( $\text{N}_2$ ) y el metano ( $\text{CH}_4$ ) en la atmósfera baja de Titán por los investigadores Wilson y Atreya, (2004).....	14
<b>Figura 8.</b> Perfil de temperatura y presión medidas por la misión Cassini-Huygens con el instrumento HASI. En la figura se hace una representación artística de los fenómenos físicos presentes en la atmósfera de Titán. Fulchignoni <i>et al</i> , (2005).....	17
<b>Figura 9.</b> Espectro de los datos recolectados del sensor de impedancia mutua colocado en el instrumento PWA, se muestra el registro de las mediciones de la conductividad eléctrica dentro de la atmósfera del satélite, observando un pico a los 60 km de altitud indicando la presencia de descargas eléctricas. Morente <i>et al</i> , (2008).....	20
<b>Figura 10.</b> Múltiples facetas del satélite Titán. Créditos NASA/JPL.....	25

	PÁG.
<b>Figura 11.</b> Titán desglosado con todos los fenómenos físicos y químicos que presenta en la atmósfera, superficie e interior del satélite.....	26
<b>Figura 12.</b> Esquema general de la línea de vacío para el llenado del contenedor metálico con la mezcla de gases de la atmósfera simulada de Titán.....	31
<b>Figura 13.</b> Representación de la línea de vacío para la vaciado y llenado del reactor con la mezcla gaseosa N <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> y CO.....	34
<b>Figura 14.</b> Dimensiones y accesorios del reactor utilizado en los experimentos de la atmósfera simulada de Titán.....	35
<b>Figura 15.</b> Equipo de cromatógrafo de gases acoplado al espectrómetro de masas ambos conectados a un ordenador para la visualización y tratamientos estadístico-matemático de la información.....	42
<b>Figura 16.</b> Esquema experimental para la generación de las descargas eléctricas en el reactor de flujo continuo, monitoreando los valores de voltaje y corriente generados en las descargas para obtener el valor de potencia.....	45
<b>Figura 17.</b> Diseño de la trampa fría con sus medidas y especificaciones en papel.. .....	46
<b>Figura 18.</b> Trampa fría lista para ser usada en las simulaciones experimentales.....	47
<b>Figura 19.</b> Manifold, reactor, trampa fría y equipos utilizados en las simulaciones en el laboratorio de atmósferas planetarias.....	48
<b>Figura 20.</b> Patrón de fragmentación [A] y espectro de masas [B] de la molécula de propano, las señales de menor abundancia representan la contribución isotópica de los átomos de las moléculas (12C, 13C, 1H, 2H Y 3H).....	50
<b>Figura 21.</b> Cromatograma de la fase de gas producidos por la irradiación de 20 minutos a 62.5 W de 650 mbar de mezcla 98:2 de N <sub>2</sub> y CH <sub>4</sub> . Especies químicas identificadas: 1.- Eteno, 2.- Etano, 3.- Etino, 4.- Isobutano, 5.- Etanodinitrilo, 6.- Ciclopropeno, 7.- Acido cianhídrico, 8.- 3-metilbutanodinitrilo, 9.- 1-Buten 3-Ino, 10., 1,3-Butadieno, 11.- 1,3-Butadiino, 12.- 1,2-Butadieno, 13.- Etanonitrilo, 14.- 2-porpenonitrilo, 15.- Propanonitrilo, 16.- Benceno, 17.- Isobutironitrilo, 18.- Butanonitrilo.....	52

<b>Figura 22.</b> Gráfica de calibración de etileno construida mediante el análisis de las áreas bajo la curva de las inyecciones de 800, 600, 400, 200, 100, 50 y 25 mbar de la mezcla de gases certificada, con sus respectivas desviaciones estándar.....	54
<b>Figura 23.</b> Sección del cromatograma de la mezcla certificada de hidrocarburos. A) etileno; B) etano; C) propeno; D) propadieno.....	56
<b>Figura 24.</b> Determinación del rendimiento energético de la molécula de etano con tres pares de puntos para la irradiación con descargas eléctricas positiva de 62.5 W a 650 mbar de N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (98:2) a 83 K.....	58
<b>Figura 25.</b> Determinación del rendimiento energético para la molécula de etano con cuatro pares de puntos para la irradiación con descargas eléctricas positiva de 62.5 W a 650 mbar de N <sub>2</sub> :CH <sub>4</sub> (98:2) a 83 K.....	59

## **ÍNDICE DE TABLAS**

	PÁG.
<b>Tabla 1.</b> Parámetros astronómicos y físicos de Titán en comparación con la Tierra.....	2
<b>Tabla 2.</b> Instrumental científico de la misión Cassini-Huygens.....	5
<b>Tabla 3.</b> Constituyentes de la atmósfera de Titán clasificados de acuerdo a su naturaleza química.....	11
<b>Tabla 4.</b> Composición de la mezcla certificada de hidrocarburos.....	39
<b>Tabla 5.</b> Picos cromatográficos de los diferentes tiempos de irradiación en la simulación de la atmósfera de Titán.....	49
<b>Tabla 6.</b> Compuestos químicos identificados en las descargas eléctricas de 20 minutos, en una mezcla de gases N <sub>2</sub> y CH <sub>4</sub> (98:2) a 650 mbar y una temperatura de 83K.....	53
<b>Tabla 7.</b> Parámetros cromatográficos obtenidos por la mezcla estándar.....	57
<b>Tabla 8.</b> Rendimientos energéticos por unidad de energía de los compuestos químicos caracterizados físicamente.....	60

## RESUMEN

En el presente proyecto de investigación se simuló a nivel laboratorio la atmósfera baja de Titán, el cual es un satélite del planeta Saturno.

La atmósfera baja se representó con una mezcla gaseosa de nitrógeno y metano en una proporción de 98:2 a una presión de 650 mbar y una temperatura de 83 K. El desarrollo de las descargas eléctricas se simuló utilizando un generador eléctrico que produce los fenómenos climáticos parecidos a mini relámpagos. En todos los casos se estimó la cantidad de energía utilizada en las transformaciones químicas de los componentes de la mezcla inicial junto con las gráficas de calibración, para calcular los rendimientos energéticos de los diferentes productos. La separación e identificación de los productos sintetizados se realizó utilizando una técnica analítica siendo un sistema acoplado de cromatografía de gases-espectrometría de masas. Los productos químicos identificados fueron hidrocarburos y nitrilos. Su distribución y abundancia están en función del tiempo de irradiaciones y la energía suministrada. Las especies químicas con el mayor rendimiento energético incluyen al etano ( $C_2H_6$ ), metanonitrilo (HCN) y 2-propenonitrilo ( $CH_2CHCN$ ).

La información generada será útil para comprender la química que se lleva a cabo en el satélite contribuyendo de esta forma al desarrollo de nuevo conocimiento en la naturaleza y la evolución de las moléculas presentes en la atmósfera de Titán.

# 1. INTRODUCCIÓN

La humanidad durante años ha investigado cada rincón de la Tierra, con la intención de encontrar las pistas que permitan resolver las preguntas en el tema del origen de la vida a partir de la evolución química, siendo este el proceso que trata de explicar como los elementos químicos iban transformándose poco a poco de moléculas sencillas a especies químicas más complejas de interés biológico, reuniendo todos los eventos ambientales que dieran preámbulo a las formas reconocibles como vivientes hoy en día.

Aunque la química es la misma en todo el Universo, aún no es posible deducir que fue lo necesario para que la vida se diera en la Tierra. Por lo tanto hasta la fecha el único ejemplo de vida que conocemos está basado en la química del carbono, esto se ve ejemplificado en cualquier organismo de la Tierra, un elefante, un humano, una hormiga y una planta, aunque físicamente seamos diferentes, lo que nos hace común es que estructuralmente estamos hechos del mismo material de carbono. Sin embargo antes de llegar al episodio de los seres vivos, se deben formar las bases del conocimiento e investigar los protagonistas químicos que dieron pauta a la vida.

En años recientes han surgido nuevas ramas de la ciencia como es la astrobiología, trabajando en conjunto con las ciencias de la astronomía, geología, química, biología entre otras se han encargado de investigar y explicar los sucesos del pasado, presente y el futuro del Universo. El uso y el avance de la tecnología en conjunto con la ciencia han permitido extender las fronteras de la investigación incluso más allá de nuestro planeta. En la actualidad se han propuestos escenarios análogos a distintos cuerpos celestes del sistema solar con la intención de comprender los fenómenos físicos y químicos que ocurren en ellos.

Titán es el satélite de mayor tamaño del planeta Saturno. La característica principal es la existencia de una atmósfera densa rica en nitrógeno molecular ( $N_2$ ) al igual que la Tierra, el segundo compuesto mayoritario es el hidrocarburo más sencillo: el metano ( $CH_4$ ) y contiene también otros constituyentes menores como hidrógeno ( $H_2$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ) y argón ( $Ar$ ). La distancia respecto al Sol hace que la temperatura en la superficie sea demasiado fría alcanzando un valor de 93.65 K. El estudio de la atmósfera de Titán es de vital importancia para la investigación científica sobre todo en el tema de la evolución química, desarrollando el conocimiento de los eventos que ocurren en las transformaciones químicas y ver si se producen entidades biológicamente activas que permitan la explicación del comienzo de la formación de la vida en la Tierra. El medio para lograr investigar los compuestos químicos que se sintetizan dentro del satélite es a partir de la simulación experimental con las condiciones ambientales que rigen en el actual Titán.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1 TITÁN UN SATÉLITE CON ATMÓSFERA

Titán es el más grande de los 62 satélites que se encuentran alrededor del planeta Saturno, ocupa el segundo lugar en satélites de mayor tamaño dentro del Sistema Solar sólo por debajo de Ganímedes, satélite del planeta Júpiter. Titán fue descubierto el 25 de marzo de 1655 por el astrónomo holandés Christiaan Huygens. La distancia respecto al Sol es de 9.5 unidades astronómicas (UA) convirtiéndolo en un cuerpo celeste extremadamente frío, al que únicamente le llega el 1.1% de la radiación solar en comparación con la Tierra. Tiene mayor tamaño que el planeta Mercurio con un diámetro de 5,150 Km. La magnetosfera de Saturno provee al satélite de una fuente de energía de electrones energéticos durante tiempos cortos. El período de traslación es de 15.94 días terrestres y el período de rotación es de 30 años terrestres. El núcleo se encuentra conformado por una mezcla de roca:hielo en cantidades similares. La presión atmosférica es 1.5 veces mayor que la Tierra. La temperatura de la superficie es de 93.65 K. El albedo visual es de 0.21 lo que significa que es cuerpo opaco. Los parámetros actuales del satélite se resumen en la Tabla 1 comparándolo con la Tierra.

**Tabla 1.** Parámetros astronómicos y físicos del satélite Titán comparando con el planeta Tierra.\*

Parámetros	Titán	Tierra
<b>Parámetros astronómicos</b>		
Distancia al Sol	9.5 UA	1 UA
Distancia a Saturno	1,221,850 Km	
Período rotacional	15.94 días terrestres	1 día
Período traslacional	30 años terrestres	1 año
<b>Parámetros físicos</b>		
Radio ecuatorial	2,575 Km	6,371 km
Masa	$1.35 \times 10^{23}$ Kg	$5.97 \times 10^{27}$ Kg
Presión atmosférica	$1467 \pm 1$ mbar	1013.25 mbar
Gravedad	$9.806 \text{ m/s}^2$	$1.354 \text{ m/s}^2$
Densidad	$1.882 \text{ g/cm}^3$	$5.513 \text{ g/cm}^3$
Albedo	0.21	0.31
Radiación Solar	$\sim 3 \text{ W/m}^2$	$345.6 \text{ W/m}^2$
Proporción Roca:Hielo	52:48	
Constituyentes atmosférico	Nitrógeno, Metano	Nitrógeno, Oxígeno
Temperatura		
Superficie	93.65 K	287 K
Tropopausa	71.4 K	213.15 K
Estratopausa	174 K	353 K
Exosfera	186 K	1273 K

\*National Aeronautics and Space Administration (NASA), 2010.

Las primeras indicaciones de la existencia de una atmósfera alrededor de Titán comenzaron en 1908, con el astrónomo español José Comas Solá al realizar observaciones de cambios de intensidad luminosa en los alrededores del disco del satélite. Después en 1944, el astrónomo estadounidense Gerard Kuiper realizó las primeras observaciones espectroscópicas de infrarrojo, quien detectó dos bandas en las longitudes de onda de 6,190 Å en la región del visible y de 7,250 Å en la región del infrarrojo cercano indicando que el metano era el compuesto principal de la atmósfera de Titán (Kuiper, 1944)

En los años 70's, el auge en el estudio del satélite aumentó por los científicos de la época. En 1971, el investigador estadounidense John Lewis especulaba que el compuesto más abundante en la atmósfera no era el metano sino el nitrógeno molecular ( $N_2$ ) resultado de la fotólisis de amoníaco ( $NH_3$ ) debido al proceso de desgasamiento de los hielos que construyeron al satélite (Lewis, 1971). En 1972, el astrónomo estadounidense Laurence Trafton identificó hidrógeno molecular ( $H_2$ ) en el espectro de Titán en cantidades bajas sugiriendo que de haber existido, ocurrió por el proceso de fotodisociación de amoníaco ( $NH_3$ ), dando como resultado nitrógeno molecular ( $N_2$ ) e hidrógeno molecular ( $H_2$ ) (Trafton Laurence, 1972). En 1973, el investigador estadounidense Robert Danielson realizó observaciones en el infrarrojo concluyendo que la atmósfera del satélite era demasiado tenue con unos pocos milibares de metano ( $CH_4$ ) (Danielson, 1973). En 1978, la científica y profesora estadounidense Sushil Atreya calculó aproximadamente la existencia de 20 bar de  $N_2$  siendo su origen nuevamente la fotólisis de amoníaco ocurriendo en la fase caliente de la formación del satélite (Atreya *et al*, 1978)

Al finalizar los años 70's se había logrado reunir una serie de datos para caracterizar los parámetros básicos de Titán suponiendo una temperatura en la superficie en el intervalo de 82 K – 200 K y una presión de pocos milibares hasta 20 bar. La composición de la atmósfera hasta ese momento era de metano, nitrógeno y compuestos trazas de hidrógeno molecular. Todas las interpretaciones y teorías propuestas por los científicos de esa década generaron una amplia variedad de modelos matemáticos que complementarían la siguiente etapa de la investigación del satélite (Hunten, 1978).

En 1980 la NASA con el afán de estudiar a los planetas y satélites que se encontraban más allá del cinturón de asteroides construyó dos misiones espaciales llamadas Viajero 1 y Viajero 2. El objetivo de estas misiones era recabar información sobre la composición química, las estructuras físicas y geológicas así como parámetros de temperatura, presión y densidad de los planetas Júpiter, Saturno, Urano y Neptuno. La misión Viajero 1 recolectó datos nunca antes reportados del Sistema Saturniano en especial del satélite Titán. Fue la primera en detectar como compuesto abundante en la atmósfera del satélite al ( $N_2$ ) seguido por cantidades trazas de metano, dejando atrás el panorama de una atmósfera pura de metano (Stone y Miner, 1981).

El instrumental a bordo de la nave Viajero 1 permitió conocer un poco más la química del satélite. El espectrómetro de infrarrojo (IRIS) identificó compuestos como hidrocarburos y nitrilos El espectrómetro de ultravioleta (UVIS) detectó varias moléculas en la atmósfera del satélite, entre ellas el nitrógeno molecular (77% – 85%), el argón (12%-17%), el metano (3%-6%) y el hidrógeno (0.1%-0.4%). También identificó pequeñas cantidades de compuestos oxigenados como monóxido de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) (Hanel *et al.*, 1981; Maguire *et al.*, 1981; Kundel *et al.*, 1981).

Por último obtuvo datos de la presión y temperatura de la superficie resultando ser de  $1496 \pm 0.7$  mbar y  $94 \pm 0.7$  K, respectivamente.

Hasta ese momento el panorama del ambiente de Titán era fugaz, los datos que se obtuvieron a través de las misiones Viajero 1 y 2 no eran lo suficiente para asegurar con precisión la composición del satélite. Sin embargo los resultados habían establecido la importancia de continuar la búsqueda de estudiar a detalle la química del satélite, la composición de los gases, la niebla, los aerosoles y la naturaleza de su superficie.

Esto llevó a que 27 años más tarde las agencias espaciales de Estados Unidos (NASA), Europea (ESA) e Italiana (ASI) organizaran la primera misión de exploración a Titán, la misión tendría el nombre de Cassini-Huygens programada para ser lanzada desde Cabo Cañaveral el 15 de octubre de 1997.

## **2.2 MISIÓN CASSINI-HUYGENS**

La misión Cassini-Huygens consistía en dos partes fundamentales: el orbitador Cassini cuyo objetivo era estudiar los anillos, la composición de la atmósfera de Saturno y sus satélites. La sonda Huygens tenía la finalidad de estudiar a detalle al satélite Titán.

La duración del viaje hacia su destino final fue aproximadamente de 7 años. El 14 de enero del 2005 la sonda Huygens logró llegar a los alrededores del satélite, iniciando la primera fase de la misión que era desprenderse del orbitador Cassini, luego se adentró poco a poco a la atmósfera y aterrizó en una región sólida de la superficie de Titán, logrando una hazaña histórica para la humanidad siendo la primera sonda en posarse en un satélite diferente a la Luna (Witasse *et al.*, 2006).



Durante el descenso desplegó el instrumental científico que llevaba a bordo y colectó datos sobre las características físicas, químicas y geológicas del satélite. Durante la misión se llevó a cabo una transmisión de datos en vivo con una duración de 2 horas, 25 minutos y 36 segundos enviando la información a la Tierra que posteriormente sería analizada por los investigadores (Coustenis *et al*, 2006). La sonda estaba constituida por 6 instrumentos diseñados cada uno para cumplir una función específica tanto en la atmósfera como en la superficie del satélite. En la Tabla 2 se muestra el nombre del instrumento, su acrónimo, el científico a cargo del experimento y nacionalidad.

**Tabla 2.** Instrumental científico de la misión Cassini-Huygens.\*

Instrumental científico en el Orbitador Cassini		
Instrumento	Acrónimo	Principal Investigador
<i>Cassini Espectrómetro de Plasma</i>	<i>CAPS</i>	<i>D. Young, EUA.</i>
<i>Espectrómetro infrarrojo compuesto</i>	<i>CIRS</i>	<i>V. Kunde, EUA.</i>
<i>Analizador de Polvo Cósmico</i>	<i>CDA</i>	<i>E. Grün, Alemania.</i>
<i>Técnica Doble de Magnetometro</i>	<i>MAG</i>	<i>D. Southwood, UR.</i>
<i>Instrumento Imagenes de la Magnetosfera</i>	<i>MIMI</i>	<i>S. Krimigis, EUA.</i>
<i>Radio y Onda de Plasmas de la Ciencia</i>	<i>RPWS</i>	<i>D. Gurnett, EUA.</i>
<i>Espectrómetro Imagen Ultravioleta</i>	<i>UVIS</i>	<i>L. Esposito, EUA.</i>
<i>Radar Cassini</i>	<i>Radar</i>	<i>C. Elachi, EUA.</i>
<i>Subsistema de Ciencia de Imagen</i>	<i>ISS</i>	<i>C. Porco, EUA.</i>
<i>Ion y Espectrómetro de masas Neutrales</i>	<i>INMS</i>	<i>H. Waite, EUA.</i>
<i>Mapeo Visual / Espectrómetro de Infrarrojo</i>	<i>VIMS</i>	<i>R. Brown, EUA.</i>
Instrumental científico en la Sonda Huygens		
Instrumento	Acrónimo	Principal Investigador
<i>Cromatógrafo de gases – Espectrómetro de masas</i>	<i>GC-MS</i>	<i>H. Niemann, EUA.</i>
<i>Aerosol Colector y Piroizador</i>	<i>ACP</i>	<i>G. Israël, Francia.</i>
<i>Instrumento de Estructura Atmosférica Huygens</i>	<i>HASI</i>	<i>M. Fulchignoni, EUA</i>
<i>Radiómetro Espectral/Descenso de Imagen</i>	<i>DISR</i>	<i>M. Tomasko, EUA.</i>
<i>Experimento Doppler de Vientos</i>	<i>DWE</i>	<i>M. Bird, Alemania.</i>
<i>Paquete Científico de Superficie</i>	<i>SSP</i>	<i>J.C. Zarnecki, UR.</i>

\* NASA/JPL misión Cassini-Huygens 2005.

La sonda Huygens tenía el objetivo de estudiar al satélite Titán en forma *In situ*, para realizar un perfil de presión, composición de gases, temperatura, densidad y vientos en función de la altitud (Abbas *et al*, 2005). Las mediciones comenzaron a una altitud de 170 km hasta la superficie. Entre los instrumentos a bordo de la sonda se describen a continuación brevemente y en la figura 1 se muestra una representación artística del orbitador Cassini liberando a la sonda Huygens hacia el satélite Titán.



**Figura 1.** Una impresión artística del orbitador Cassini lanzando a la sonda Huygens hacia el misterioso Titán. (Referencia: ESA-D DUCROS)

Dentro del arsenal de instrumentos científicos se encontraba el Instrumento de Estructura Atmosférica Huygens (HASI) incluía varios instrumentos experimentales como: un acelerómetro, un sensor de presión, un sensor de temperatura y un analizador de ondas electromagnéticas. Con el fin de crear un perfil de temperatura y presión correspondiente a las diferentes altitudes de la atmósfera. Además contenía el analizador de ondas electromagnéticas (PWA) con la función de encontrar evidencias de los posibles relámpagos en la tropósfera del satélite, ya que existe la probabilidad de registrar actividad eléctrica debido a las diversas formaciones de nubes convectivas presentes en esa región de la atmósfera.

Otro instrumento abordó fue el Cromatógrafo de gases y Espectrómetro de masas (CG-EM) equipo que realizó la identificación cualitativa y cuantitativa de los compuestos químicos capturados a las diferentes altitudes de la atmósfera de Titán durante el descenso de la sonda Huygens.

El experimento Doppler de Viento (DWE) realizó mediciones de la dirección y fuerza de los vientos a una altitud de un metro por segundo durante el descenso.

También en la caracterización de la superficie del satélite se incluyó el Paquete Científico de Superficie (SSP) realizando las mediciones de las propiedades físicas y químicas del suelo Titánico identificando químicamente los constituyentes que abundan en Titán.

Asimismo el Aerosol Colector y Pirolizador (ACP) trabajó en conjunto con el CG analizando muestras en la región de la estratósfera a una altitud de 45 Km y en la región de la tropósfera a una altitud entre 15 – 30 Km, evaporando cada muestra para separar térmicamente las especies moleculares y alimentar a la salida al CG con el fin de conocer la composición de los aerosoles en función a la altitud. Específicamente se determinaron las proporciones de N<sub>2</sub>, H, O y C en los aerosoles, así como condensados de hidrocarburos y nitrilos en la tropósfera y condensados de metano en la estratósfera.

El último instrumento dentro de la sonda Huygens es el Radiómetro espectral / Descenso de Imagen (DIRS) aparato científico adaptado con cámaras de baja, media y alta resolución para capturar las imágenes durante el descenso de la sonda y construir un panorama real del ambiente y la superficie del satélite. En su infraestructura contenía un conjunto de fibras ópticas arriba, abajo y a un lado. Integrado con un espectrómetro de infrarrojo para medir las dispersiones de la radiación solar en la niebla naranja del satélite.

Sin duda, la información de la misión Cassini-Huygens ha permitido establecer con seguridad los parámetros de la atmósfera de Titán. Hoy se conoce con certeza que la presión atmosférica es 1.5 veces mayor a la terrestre, el nitrógeno molecular es el componente mayoritario en la atmósfera y la temperatura promedio en la superficie es de 93.65 K (Harland, 2007).

### **2.3 EL ORIGEN DE TITÁN Y LA FORMACIÓN DE UNA ATMÓSFERA.**

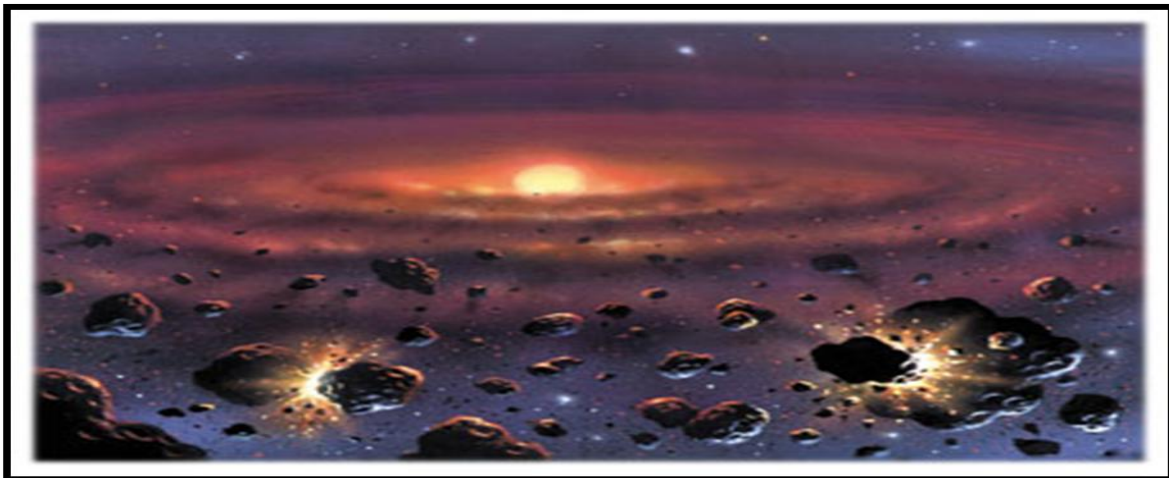
El planeta Saturno tiene a sus alrededores a un satélite con la particularidad en poseer una atmósfera más densa que la de los planetas interiores: Venus, Tierra y Marte. Tal hecho ha sido explicado por varias razones entre ellas por la época del bombardeo pesado, donde miles de asteroides golpeaban brutalmente a los planetas y satélites empobreciendo las atmósferas principalmente de los rocosos planetas Marte y Tierra, pero Titán al estar totalmente congelado por la lejanía con el Sol no provocó un impacto mayor en su superficie y atmósfera (Owen, 1995).

Otro fenómeno importante en la formación de la atmósfera de Titán es retribuido a la magnetosfera del planeta Saturno, al encontrarse a una distancia lo suficientemente alejada al satélite permitiendo la generación y conservación de su atmósfera (Ledvina *et al*, 2008).

Todo lo contrario es el caso del planeta Júpiter que al ser demasiado grande su magnetosfera se extiende a varios kilómetros a la redonda, por lo tanto el campo magnético producido es de gran intensidad, impidiendo la formación de una atmósfera en cualquiera de las lunas que lo rodean (Hartle, 1985).

Se proponen varios escenarios para explicar el nacimiento del satélite Titán. Uno de ellos consiste en la captura de un asteroide o planetesimal pequeño, el cual tenía una trayectoria en las cercanías de Saturno, siendo atraído por su campo gravitacional del planeta para ser capturado y ocupar el lugar actual del satélite. Otro escenario propuesto es el impacto severo de un planetesimal con Saturno el cual desprendería una gran cantidad de material cósmico (roca, hielo y una mezcla de gases como  $H_2$ ,  $NH_3$ , He y vapor de  $H_2O$ ) en los alrededores del planeta, conforme transcurrió el tiempo el material circundante llevo a cabo un proceso llamado acreción, logrando poco a poco la formación del satélite (Owen, 2000). Las dos teorías anteriores son rotundamente descartadas por los investigadores debido a la falta de congruencia o credibilidad para describir el origen de Titán.

Sin embargo existe un panorama con mayor aceptación en el origen de Titán, eso nos remonta al comienzo de la formación del Sistema Solar hace aproximadamente  $4.6 \times 10^9$  años. En este escenario el nacimiento del satélite ocurrió cerca de la subnébula saturniana constituida por gases volátiles como el amoniaco, fragmentos de hielos, vapor de agua y algunos gases inertes. Durante y después del proceso de acreción que lo transformaron en un planeta a Saturno (ver la figura 2), mucho del material cósmico utilizado en la formación del planeta no fue totalmente acretado por el, precisamente del material remanente se inicia el mismo proceso de acreción que llevo a cabo Saturno, teniendo como resultado la formación de Titán. De esta manera explican los científicos porque la composición química del planeta Saturno es tan parecida a Titán (Taylor *et al*, 1998).



**Figura 2.** Representación artística del proceso de acreción creando a los planetas del Sistema Solar este mismo mecanismo se llevo a cabo en los alrededores de Saturno para formar a Titán. (Referencia: David Bardini)

El tipo de material acretado por el satélite contenía especies altamente volátiles como el amoníaco y otros compuestos orgánicos como el metano. Los compuestos químicos (hielo, metano y silicatos) se condensaron en el núcleo acumulando todo el material en su interior, el siguiente en la evolución de Titán fue la diferenciación del interior del satélite.

La formación de la atmósfera se dio a partir un proceso llamado fotodisociación del nitrógeno molecular y el metano que duró miles de años y continua presente en el satélite, la suficiente fuerza de gravedad proporcionada por el núcleo ha sido de gran ayuda para retener los compuestos volátiles producidos o capturados por el satélite logrando en sus inicios formar una pequeña y delgada atmósfera (Ferris *et al*, 2005).

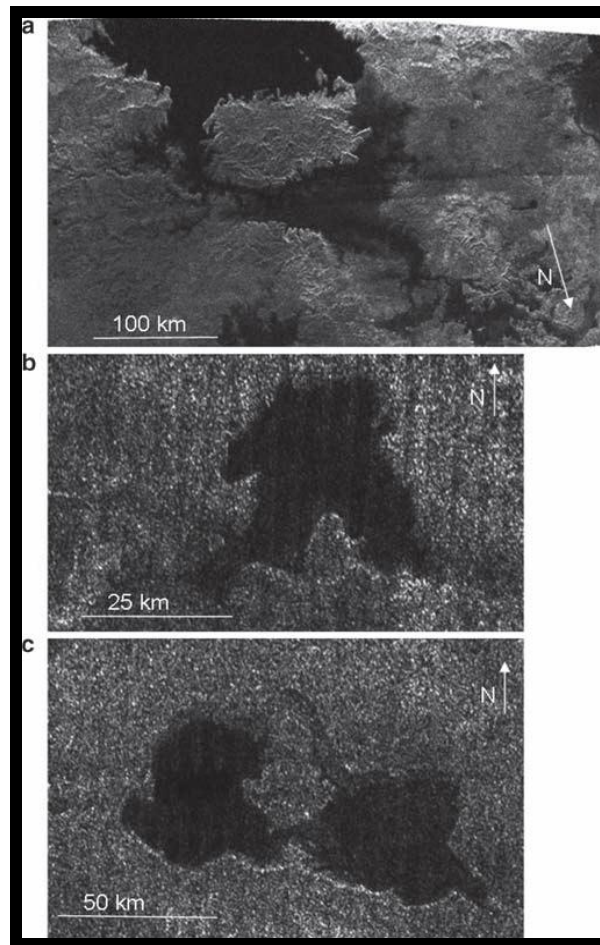
El origen del nitrógeno como constituyente mayoritario en la atmósfera se explica por la captura directa de  $N_2$  en la subnébula saturniana o la fotodisociación del amoníaco capturado durante la formación del satélite. La captura directa  $N_2$  es poco probable que haya sucedido. Owen (2000) consideró que el ambiente requería de una temperatura por debajo de los 30 K siendo demasiada baja para la subnébula saturniana en el principio de la formación ya que existían frecuentemente colisiones entre los fragmentos de roca circundantes provocando temperaturas altas en los alrededores donde se formó Titán.

Otra propuesta del enriquecimiento de nitrógeno en la atmósfera de Titán es la sugerida por los investigadores Griffith y Zahnle (1995), quienes realizaron diversos modelos computacionales demostrando que alrededor del 10% de la composición del satélite era de origen cometario. Los cometas son cuerpos celestes constituidos por agua, hielo seco, amoníaco, metano, hierro, magnesio, sodio y silicatos.

Existen evidencias de impactos cometarios en la superficie de Titán seguramente durante el episodio del bombardeo pesado tardío, en donde los planetas y satélites del sistema solar, sufrieron una lluvia intensa de cometas y meteoritos. El efecto que causó este fenómeno en Titán fue benéfico, al proveerle de una gran cantidad de compuestos orgánicos y material volátil como el nitrógeno molecular.

Un último escenario del origen del nitrógeno está relacionado con el interior del satélite. El núcleo del satélite está en una proporción de 48% de hielo y 52% de roca. Atreya y Hunten (1978) indicaron que el nitrógeno adquirido fue en forma de amoníaco, las hipótesis sugieren que las bajas temperaturas ( $< 100$  K) propiciaron no sólo la captura de amoníaco sino de metano, vapor de agua y algunos gases inertes siendo almacenados en forma de hielo. Durante la fase de incremento de temperaturas en el núcleo de Titán se dio un proceso lento de desgasificación, liberando los gases contenidos en el interior de los hielos hacia el exterior. El amoníaco y los compuestos volátiles atrapados comenzaron a volatilizarse emergiendo hacia la superficie y facilitando así su transformación fotoquímica, de esta manera enriqueciendo con nitrógeno molecular y metano la atmósfera de Titán.

El metano tiene un rol interesante dentro del satélite, es el segundo constituyente en abundancia y sorprendentemente algunas evidencias indican que tiene un ciclo similar al ciclo del agua en la Tierra (Atreya *et al*, 2006). A una altitud de 16 Km a 21 Km se han encontrado formaciones de nubes de metano contribuyendo a la propuesta anterior. Durante el descenso de la sonda se recolectaron diversas fotografías mostrando regiones oscuras, con la posibilidad de ser formaciones de ríos o lagos de metano en la superficie de Titán (Tomasko, 2005) como se presenta en la figura 3 fotografías reales tomadas por la sonda Huygens durante el descenso a la superficie de Titán. Los cálculos estiman que de existir precipitaciones fluviales ocurren en un promedio anual de  $10 \text{ cm}^3$ , semejante a las lluvias anuales en las regiones desérticas en la Tierra.



**Figura 3.** Imágenes tomadas por la sonda Huygens, revelando regiones oscuras atribuyendo la formación de lagos de metano en la superficie de Titán. a) una isla de  $90 \times 150 \text{ Km}$  de longitud. b) Lago con varios compartimiento aproximadamente de  $20 \times 25 \text{ Km}$ . c) Dos lagos localizados en el lado Oeste del satélite. (Adaptado de NASA/Instituto de Ciencia Espacial).

## 2.4 CONSTITUYENTES DE LA ATMÓSFERA

La densa atmósfera de Titán está constituida principalmente por nitrógeno molecular ( $N_2$ ), compuesto más abundante que ocupa entre el 90% - 97%, metano ( $CH_4$ ) que ocupa el segundo en abundancia entre el 2% - 5% y el hidrógeno molecular ( $H_2$ ) con una abundancia de 0.02%. Además de contener gases inertes como el argón (Ar). En la atmósfera de Titán la química del metano ( $CH_4$ ) junto con la química del nitrógeno ( $N_2$ ), hace la producción en la fase gas de una diversidad de compuestos orgánicos de la familia de los hidrocarburos alifáticos y aromáticos y de nitrilos (Navarro-González et al, 2001). En la tabla 3 se pueden observar todos los compuestos identificados así como sus proporciones existentes en la atmósfera de Titán.

**Tabla 3.** Constituyentes de la atmósfera de Titán clasificados de acuerdo a su naturaleza química.\*

Compuestos	Fórmula química	Fracción mol
<b>Mayor constituyente</b>		
Nitrógeno	$N_2$	0.90 - 0.97
Metano	$CH_4$	0.02 - 0.10
Argón	Ar	< 0.001 - 0.006
Hidrógeno	$H_2$	0.002
<b>Compuestos Hidrocarbonados</b>		
Etano	$C_2H_6$	$1.3 \pm 0.5 \times 10^{-5}$
Etino	$C_2H_2$	$1.9 \pm 0.2 \times 10^{-6}$
Eteno	$C_2H_4$	$8.0 \pm 2.0 \times 10^{-8}$
Propano	$C_3H_8$	$5.0 \pm 2.0 \times 10^{-7}$
Propino	$C_3H_4$	$8.0 \pm 1.5 \times 10^{-9}$
1,3-Butadieno	$C_4H_2$	$1.5 \pm 0.2 \times 10^{-9}$
Benceno	$C_6H_6$	$< 6.0 \times 10^{-9}$
<b>Compuestos con Nitrógeno</b>		
Metanonitrilo	HCN	$1.5 \pm 0.2 \times 10^{-7}$
Etanodinitrilo	$C_2N_2$	$< 1.5 \times 10^{-9}$
Propinonitrilo	$HC_3N$	$< 1 \times 10^{-9}$
Acetonitrilo	$CH_3CN$	$< 1.5 \times 10^{-9}$
<b>Compuestos con Oxígeno</b>		
Vapor de agua	$H_2O$	$4.0 \pm 2.0 \times 10^{-10}$
Monóxido de carbono	CO	$4.0 \times 10^{-6} - 5 \times 10^{-5}$
Dióxido de carbono	$CO_2$	$1.5 \pm 0.1 \times 10^{-8}$

\*National Aeronautics and Space Administration (NASA), 2010.

Los instrumentos Cassini/CIRS/UVIS (ver la figura 4) mejoraron las observaciones realizadas por la misión Viajero 1 IRIS/UV (Coustenis *et al*, 2010), debido a la alta resolución espectral de los equipos, detectaron con mayor precisión los compuestos químicos presentes en la atmósfera de Titán.

Los nitrilos detectados en la atmósfera de Titán (ver la figura 5) son el cianuro de hidrógeno (HCN), el cianoacetileno (HC<sub>3</sub>N) y el etanodinitrilo (C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>). El HCN es el más simple y abundante de los nitrilos detectado en todas las altitudes aunque entre los 250 – 300 Km tiene valores uniformes con una fracción mol de ( $\sim 1 \times 10^{-7}$ ) (Teanby *et al*, 2006).

Los hidrocarburos son producto de la fotoquímica del metano identificando las siguientes especies de mayor a menor abundancia: etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), acetileno (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>), propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>), propino (CH<sub>3</sub>C<sub>2</sub>H), diacetileno (C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>) y benceno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>). (Ver la figura 6 de los espectros de masas identificados por el CG-EM). La novedad de los compuestos identificados por el GCMS es el benceno un hidrocarburo aromático de reciente descubrimiento en el año 2005 dentro de los constituyentes de la atmósfera (Lebonnois, 2005). Su abundancia es de 3 a 4 ppb a una altitud de 180 a 320 Km.

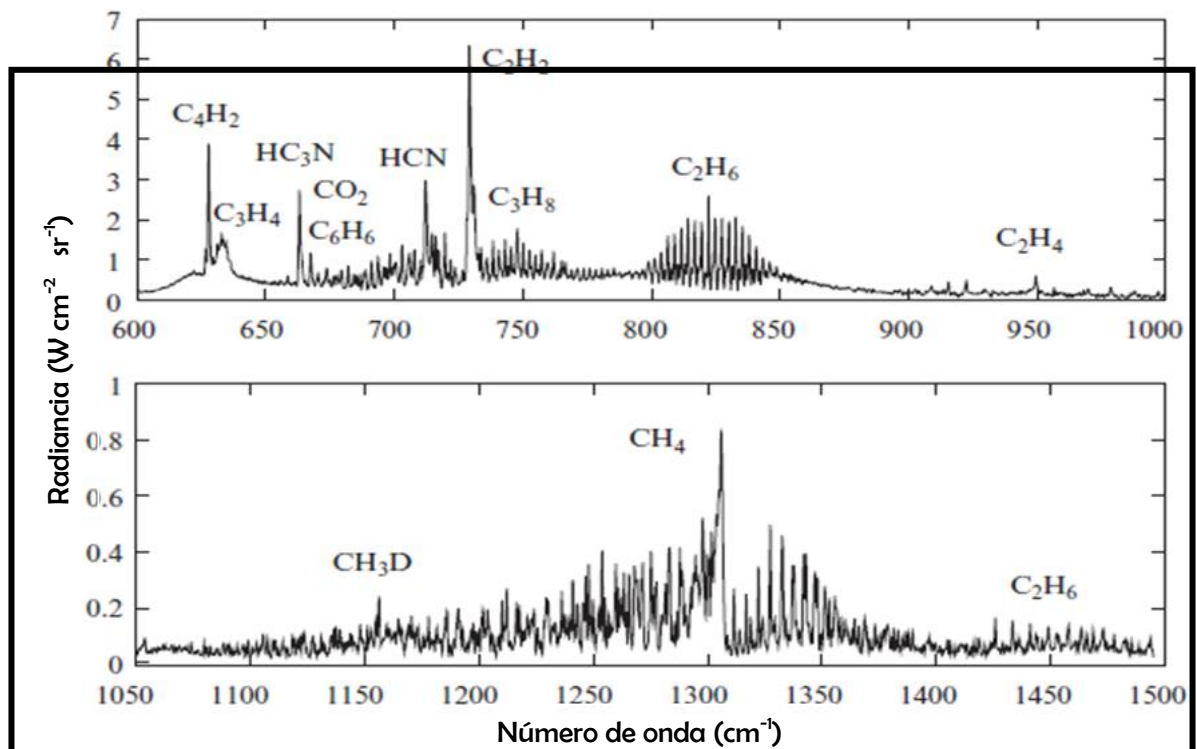


Figura 4. Recuadro superior: Mediciones de la sonda Cassini/CIRS a una altitud de 100 -200 km identificando a los hidrocarburos y nitrilos. Recuadro inferior: observaciones en el infrarrojo localizando la banda de metano a los 1306 cm<sup>-1</sup> (Coustenis *et al*, 2007).



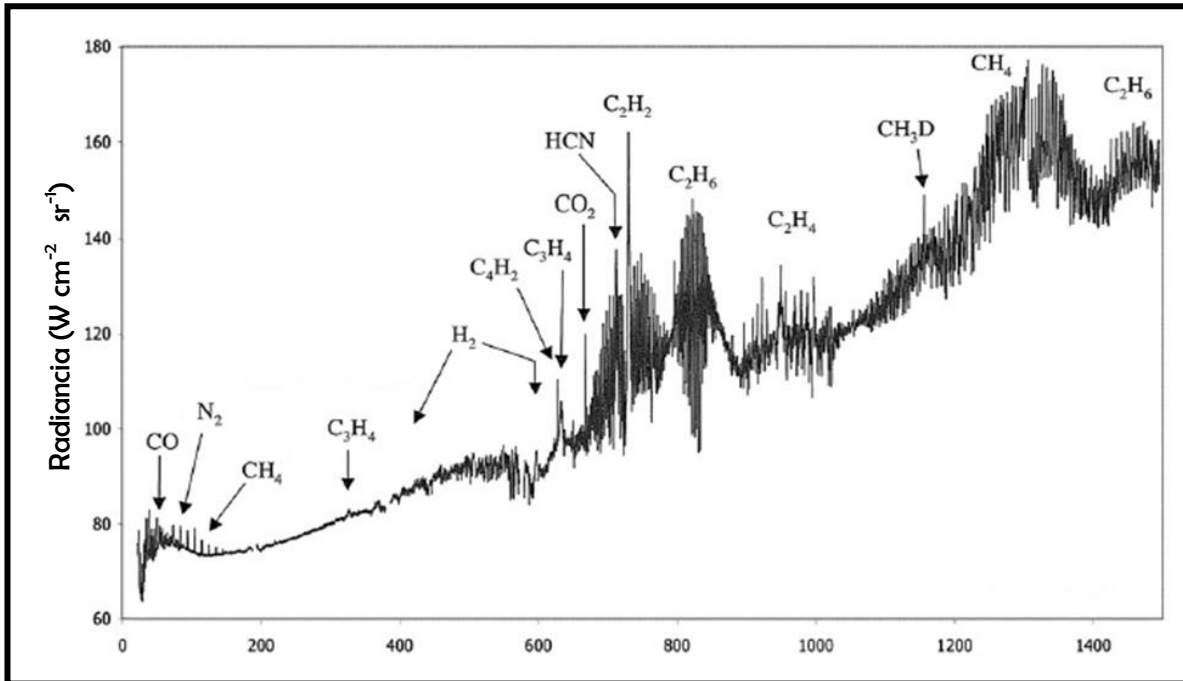


Figura 5. Espectro de infrarrojo del CIRS de la misión Cassini-Huygens de los compuestos químicos identificados en el intervalo de 200 a 1400  $\text{cm}^{-1}$ . (Coustenis *et al.*, 2007).

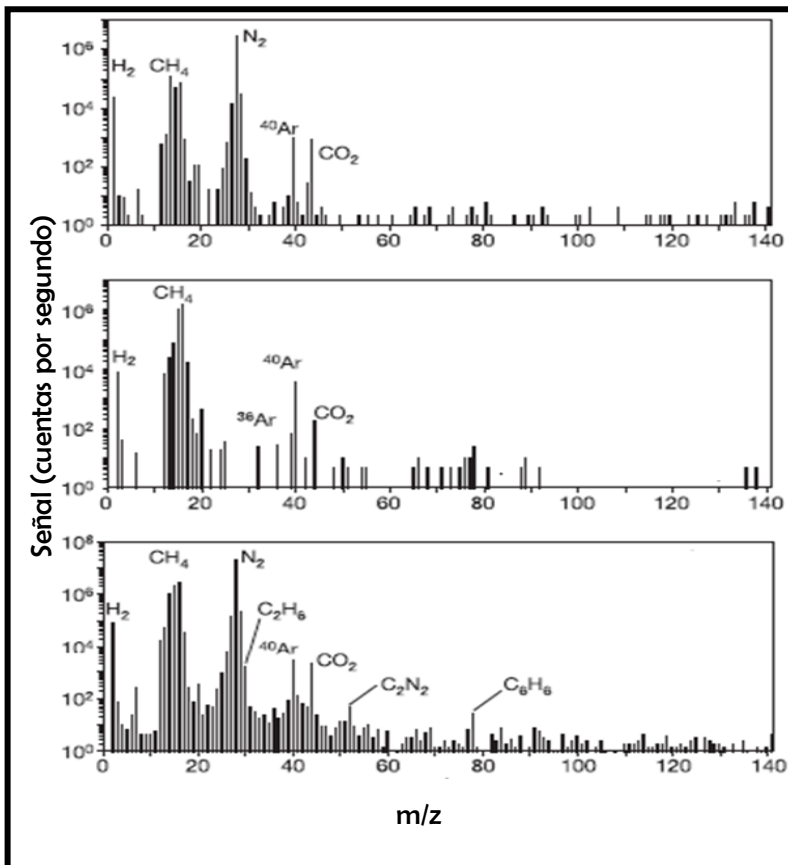


Figura 6. Espectro de masas de la atmósfera de Titán. Recuadro superior: a una altitud de 120 -140 km con un total de 104 espectros. Recuadro medio: a una altitud de 75 - 77 km un promedio de 43 espectros. Recuadro inferior: en la superficie alrededor de 432 espectros de masas indicado la masa /carga de los compuestos detectados: (Niemann, 2005).

Varios modelos fotoquímicos de la atmósfera de Titán se han publicado durante los últimos 20 años. Entre los creadores está el modelo desarrollado por Wilson y Atreya, (2004) ver la figura 7, la cual permite observar las rutas de formación de los constituyentes identificados en la atmósfera de Titán por los instrumentos IRIS/UVIS/CIRS/DIRS.

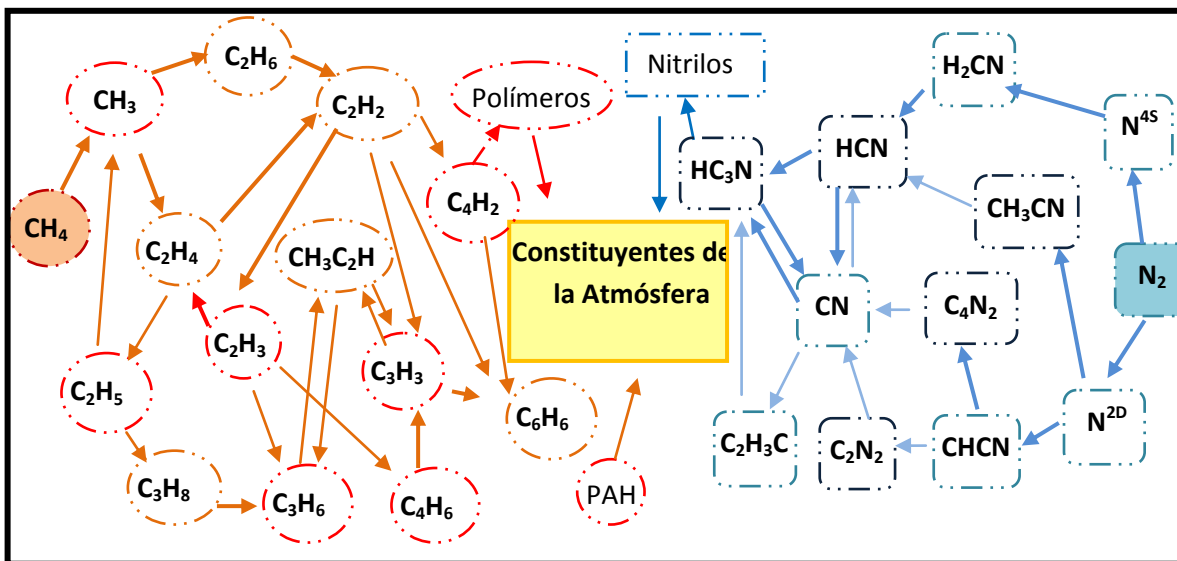


Figura 7. Esquema de la fotoquímica del nitrógeno molecular ( $N_2$ ) y el metano ( $CH_4$ ) en la atmósfera baja de Titán, por los investigadores Wilson y Atreya (2004).

## 2.5 IMPORTANCIA DEL CO

El origen del CO en Titán, sugiere un panorama de diversas fuentes que provee de este compuesto al satélite. El primer escenario es derivado de impactos de meteoritos, los cuales proporcionan compuestos oxigenados y diversos compuestos orgánicos. La segunda posibilidad es una fuente interna que provee de CO a través de cryovolcanismo un tipo de erupciones volcánicas parecidas a las terrestres desechando CO al ambiente de Titán (Sotin, *et al*/2005).

La tercera opción sugiere que el CO no está en equilibrio, la presencia se debe a la abundancia de CO en el pasado, (Wong *et al*, 2002) quien propuso que el CO en el comienzo de la atmósfera de Titán era 14 veces más abundante que en el presente.

En la atmósfera de Titán se han identificado tres especies oxigenadas: monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono ( $CO_2$ ) y vapor de agua ( $H_2O$ ). Su abundancia es menor en comparación con la abundancia de los compuestos orgánicos identificados en la estratosfera y en la troposfera (Hörst, *et al* 2008). El instrumento IRIS de la misión Viajero 1 fue el primero en reportar la presencia de los compuestos de  $CO_2$  y CO.

A partir del descubrimiento estos compuestos oxigenados diversos centros de investigaciones comenzaron a investigar la presencia de dichos compuestos en la atmósfera del satélite y corroborar sino se había tratado de alguna falsa medición de los equipos analíticos. Entre ellos el Observatorio Espacial Infrarrojo (ISO) y el Espectrómetro de Infrarrojo Composicional de Cassini (CIRS) tomaron la tarea de escanear diversos sitios de la atmósfera de Titán para asegurar la detección de los compuestos oxigenados, (Encrenaz, 2002) y (Kok *et al*, 2007).

El telescopio de infrarrojo ISO utilizó una resolución espectral alta detectando la existencia del tercer compuesto oxigenado, el vapor de agua (H<sub>2</sub>O) este compuesto se encuentra en la estratosfera con una fracción molar de 0.4 ppb, se ha deducido que en altitudes altas es rápidamente destruido por la radiación ultravioleta produciendo radicales OH necesarios para la formación de CO<sub>2</sub> (Kok *et al*, 2007). El vapor de agua al alcanzar las regiones de la troposfera tiende a condensar, causando además una expectativa de vida relativamente corta de 5 años, (Coustenis, *et al* 1998) en comparación con el CO<sub>2</sub> de miles de años, (Atreya y Wilson, 2004) y aún más con el CO con tiempos de vida aproximadamente de 500 Mega años considerando una alta estabilidad, (Lellouch *et al*, 2003).

Diversos autores entre los que se encuentran: Lutz *et al*, (1983), Gurwell and Muhleman, (2000), Muhleman *et al*, (2003), López-Valverde *et al*, (2005) y Flasar *et al*, (2005) quienes han estudiado durante años la concentración de CO a largo de la atmósfera de Titán, llegaron a una conclusión que en la región de la estratósfera los valores de CO se comportan de manera uniforme, CIRS realizó las últimas mediciones de CO obteniendo una fracción molar de  $47 \pm 8$  ppm.

La importancia del CO es debido a que representa una reserva de compuestos oxigenados en la atmósfera de Titán en conjunto con los nitrilos y los hidrocarburos exhiben los cuatro bioelementos (C, N, H, O) indispensables para la formación de la vida prebiótica, lo que ayudaría a comprender un poco más sobre la evolución química planetaria que dio origen a las primeras moléculas de la vida.

## **2.6 LA ESTRUCTURA ATMOSFÉRICA**

La atmósfera de Titán se extiende a una altitud máxima de 1500 Km, la misión viajero 1 aportó las primeras mediciones mediante la radio ocultación solar, el espectrómetro ultravioleta (UVS) y el espectrómetro de infrarrojo (IRIS) a bordo de la sonda espacial, los instrumentos realizaron observaciones de temperatura, presión y composición entre las altitudes de 1500 – 1000 Km (Fulchignoni *et al*, 2005). Los telescopios de gran potencia ubicados en la Tierra han logrado observar en la altitud media comprendida entre los 600 – 200 Km indicando una compleja estructura del satélite en esta región.

La reciente misión Cassini-Huygens reveló mediciones físicas reales de la atmósfera de Titán a partir de una altitud de 170 Km hasta la superficie, obteniendo datos de la presión en la superficie de 1457 mbar y una temperatura de 93.65 K, (Niemann *et al*, 2005)

La información de la misión Cassini-Huygens indica que la atmósfera se encuentra altamente estratificada. Las regiones identificadas dentro de la atmósfera de Titán son cuatro, caracterizadas cada una de ellas por una altitud, una composición química así como un intervalo de temperaturas y presiones, (Kostiuk *et al*, 2010).

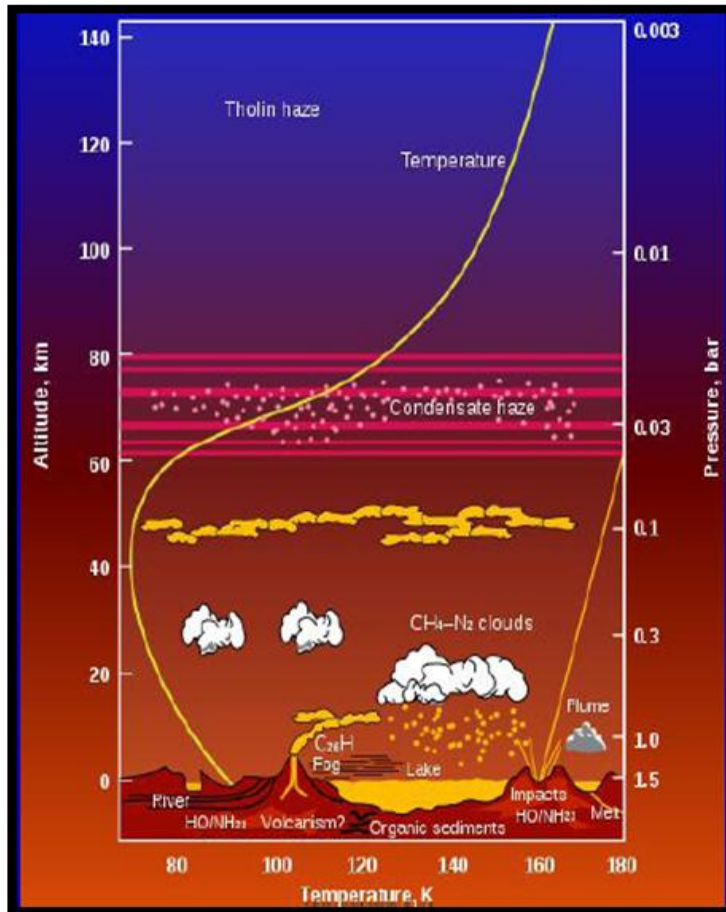
La tropósfera localizada a partir de la superficie hasta una altitud de 44 Km, con temperaturas mínimas de 70.43 K y una presión de 115 mbar en promedio.

La estratósfera comprendida a una altitud de 44 Km - 250 Km, con temperaturas promedios de 186 K y una presión aproximada de  $1.5 \times 10^{-1}$  mbar.

La mesósfera localizada a una altitud de 250 Km – 500 Km, las temperaturas generalmente en esta región alcanza un valor mínimo de 152 K y una presión aproximada de  $2 \times 10^{-3}$  mbar.

La termósfera localizada a una altitud de 500 Km – 1000 Km, esta región contiene una amplia variación de temperatura y presión debida a los diversos fenómenos dinámicos presentes.

El estudio de la atmósfera de Titán por la misión Cassini Huygens generó un perfil de temperaturas y presiones a partir de una altitud de 142 Km hasta su descenso esto se ve representando por la línea amarilla ilustrado en la figura 8, se puede observar que por encima de la superficie la temperatura disminuye hasta alcanzar la troposfera (45 Km), después la temperatura se invierte para comenzar un incremento en la estratósfera.



**Figura 8.** Perfil de temperatura y presión medidas por la misión Cassini-Huygens con el instrumento HASI. En la figura se hace mención de los fenómenos físicos presentes en la atmósfera de Titán. (Fulchignoni *et al*, 2005)

El espectrómetro de infrarrojo y ultravioleta del Viajero 1 detectaron varias capas de la neblina naranja que envuelve al satélite y una capa de nubes de metano frío cerca de la superficie. La información es complementada por la misión Cassini-Huygens aumentando los descubrimientos en el satélite, detectando protuberancias de gran tamaño semejantes a volcanes terrestres, esto podría enriquecer la hipótesis de que el CO es fabricado en el interior de Titán, así también se han encontrado regiones parecidas a valles o montañas lo que indica que puede tener una morfología similar al planeta Tierra.

## **2.7 TIPOS DE ENERGÍA EN LA ATMÓSFERA DE TITÁN.**

La cantidad de energía solar que recibe Titán es aproximadamente del 1.1 % en comparación con la Tierra, la distancia 9 veces más con respecto al Sol nos crea un panorama con temperaturas extremadamente bajas en todo el satélite.

La principal fuente de energía en Titán es proporcionada por la radiación solar. El Sol emite energía en forma de radiación electromagnética. Estas radiaciones se clasifican de acuerdo a las diferentes longitudes de onda que se emiten. Las longitudes de onda pueden ser muy largas con baja frecuencia y menor energía o pueden ser muy cortas con alta frecuencia y alta energía. La clasificación de acuerdo al enunciado anterior sigue el siguiente orden: onda de radio, microondas, infrarrojo, ultravioleta, rayos x y rayos gamma.

A longitudes de onda ( $> 150$  nm) disocian a las moléculas de nitrógeno mediante la radiación ultravioleta en la atmósfera alta de Titán o impacto de electrones provenientes de la magnetosfera de Saturno produciendo hidrocarburos más pesados y complejos.

Los rayos cósmicos y las partículas energéticas del viento solar son otra fuente de energía que puede permitir la ionización de las moléculas y compuestos químicos de la atmósfera de Titán. Sin embargo una de las razones más impactantes es la existencia de descargas eléctrica o relámpagos en la atmósfera baja de Titán similares a los que se presentan en la Tierra.

## **2.8 ACTIVIDAD ELÉCTRICA**

En la Tierra es común el fenómeno de la lluvia este siempre va acompañado por actividades luminosas relámpagos y sonoras llamados rayos. Los rayos son una chispa de electricidad gigante o una descarga eléctrica que golpea con gran fuerza a la Tierra. Durante el transcurso de una tormenta eléctrica se ve favorecido la formación de iones en la atmósfera terrestre.

La electricidad se genera dentro de las nubes de la tormenta por medio de la frotación de las gotas de agua y cristales de hielos entre sí. Los iones positivos se ubican en la parte superior de la nube mientras que en la parte inferior los iones negativos. Todo esto genera una diferencia de potencial de miles de voltios obteniendo el resultado de una fuerte descarga eléctrica, el origen puede ser entre distintos puntos de una misma nube, entre nube – nube o entre la nube y la Tierra (siendo la Tierra una fuente de iones positivos que atrae los iones negativos de la nube).

Un rayo es visible con trayectorias irregulares de varios kilómetros de distancia. Una descarga puede alcanzar distancias mayores de 13 Km y una temperatura de 28,000 °C, es decir la temperatura del rayo es tres veces mayor a la temperatura del Sol.

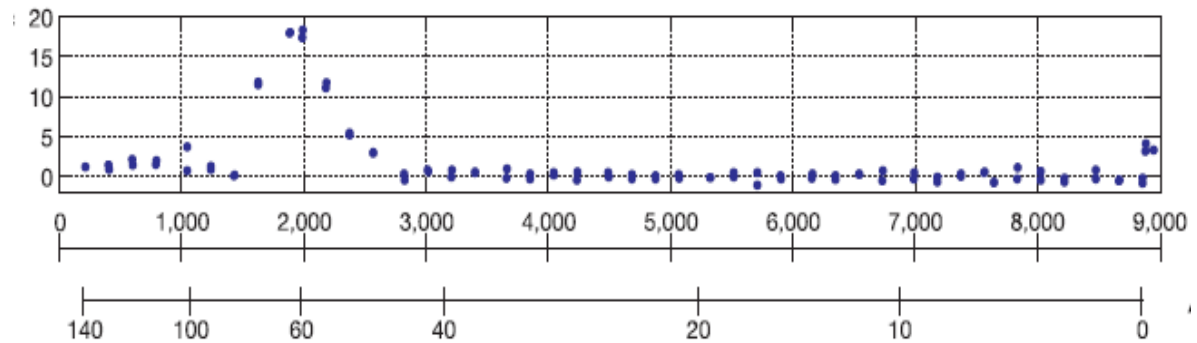
Las descargas eléctricas en la atmósfera de Titán se consideran una fuente de energía sumamente relevante en la transformación química de los compuestos y moléculas existentes, principalmente del metano con interacciones que brinda una ionización molecular y radical libre produciendo grandes cantidades de hidrocarburos (Ramirez *et al*, 2001). Por el contrario con la molécula del N<sub>2</sub> debido a la naturaleza típica de su triple enlace impide que la ionización sea de mayor dificultad formando los compuestos de nitrilos en menor cantidad.

La sonda Huygens incluía un conjunto de 6 instrumentos dedicados a estudiar las propiedades físicas, químicas y geológicas de Titán. El instrumento estructural de la atmósfera de Titán (HASI) contenía un paquete adicional de sensores de permitividad, onda y altimetría (PWA), con la función de realizar experimentos para la caracterización de las propiedades eléctricas y la detección de relámpagos en la atmósfera de Titán.

Un sensor incluido en el paquete de PWA era la sonda de impedancia mutua (MIP) formada por cuatro electrodos, un par de electrodos de transmisión y un par de electrodos de recepción localizados en cada uno de los brazos despegables de la sonda Huygens (Hamelin, *et al* 2000). El instrumento estaba programado para operar en dos modos: modo pasivo y modo activo. El modo activo media la diferencia de potencia entre dos electrodos que reciben cuando los dos electrodos que emiten inyectan una corriente eléctrica al medio. El modo pasivo los electrodos del receptor funcionan como una antena dipolar eléctrica detectando el campo eléctrico natural de la atmósfera del satélite, (Morente *et al*, 2008)

Durante el descenso de la sonda, el MIP operó en modo pasivo midiendo solamente la componente horizontal del campo eléctrico, afortunadamente los fuertes vientos existentes en la atmósfera, cambiaron la posición del sensor 30°, por lo tanto el dipolo eléctrico recolecto datos tanto de la componente horizontal como la componente vertical del campo eléctrico de Titán. Un total de 3172 datos de secuencias fueron enviados a la Tierra para el análisis del campo natural eléctrico de la atmósfera. Sin embargo no toda la información recolectada tuvo gran relevancia, únicamente los primeros 582 datos de secuencias comprendidos a una altitud de 140 – 60 km correspondientes a la región de la estratósfera proporcionaron información de interés en el estudio de la actividad eléctrica, Morente *et al*, (2008).

El espectro de la señal eléctrica recolectado por la sonda Huygens ilustrado en la figura 9 muestra el comportamiento de la conductividad eléctrica a las diferentes altitudes que iba monitoreando el equipo, obteniendo un pico protuberante aproximadamente a una altitud de 60 km debido a la respuesta de actividad eléctrica detectada en la atmósfera de Titán, esto significa que el instrumento PWA obtuvo las primeras evidencias de la existencia de relámpagos semejantes a los formados en la Tierra en la atmósfera baja de Titán. Estos datos son complementados con dicha afirmación por medio de la presencia de nubes extensas y movimientos convectivos en diversos sitios de la atmósfera indicando los posibles procesos eléctricos en el satélite, Fulchignoni *et al*, (2005).



**Figura 9.** Espectro de los datos recolectados el sensor de impedancia mutua colocado en el instrumento PWA, se muestra el registro de las mediciones de la conductividad eléctrica dentro de la atmósfera del satélite, observando un pico a los 60 km de altitud indicando la presencia de descargas eléctricas. Morente *et al*, (2008).

Las descargas eléctricas son una fuente de energía sumamente importante en la investigación de la atmósfera de Titán, debido a que son una pieza fundamental para explicar la formación de compuestos orgánicos de valor biológico. Como en alguna ocasión el científico estadounidense Stanley Miller creó experimentalmente un ambiente primitivo a nivel de laboratorio de la atmósfera terrestre conformado por amoníaco, hidrógeno, metano y vapor de agua, todos los elementos químicos ubicados dentro de un recipiente cilíndrico fueron inducidos por una chispa de electricidad simulando un relámpago, lo que propició a descubrir al término de su experimento la generación de aminoácidos y componentes de proteínas, entidades químicas importantes para la formación de la vida (Miller, 1953).



## **2.9 SIMULACIONES EXPERIMENTALES Y TEÓRICAS**

Debido a las grandes distancias que existen planeta-planeta o planeta-satélite, por el momento es imposible que un ser humano pueda viajar y soportar todas las condiciones que exigen explorar cuerpos celestes más allá de la Tierra y su satélite natural. Por lo tanto el hombre se las ha ingeniado para estudiarlos creando dos tipos de observaciones: las observaciones remotas y las observaciones directas.

Las observaciones remotas son con la ayuda de telescopios de gran potencia ubicados en puntos estratégicos de la Tierra, los principales observatorios astronómicos a nivel mundial por ejemplo son el observatorio cerro paranal en la región Antofagasta, Chile, el observatorio Mauna Kea en Hawaii, Estados Unidos y el observatorio Kitt Peak en Arizona, Estados Unidos. Sin olvidar que las fronteras de la observación han sido expandidas fuera de la Tierra encontrando al telescopio espacial Hubble o el Splitzer en el espacio. Las observaciones directas son las misiones espaciales tripuladas por robots con instrumental científico abordo, programados para realizar los diferentes experimentos in situ, dando la oportunidad de estar en contacto físico con los cuerpos celestes para coleccionar los diversos datos tanto de composición química y física del planeta o satélite. Entre las misiones espaciales más relevantes esta la Apolo que estudio la superficie lunar, la Vikingo 1 y 2 que estudiaron al planeta rojo Marte.

Sin embargo los científicos antes de llevar a cabo los métodos de observación han complementado las investigaciones con la realización de experimentos en la Tierra, sin tener que viajar esas grandes distancias para tener una muestra representativa del planeta o satélite en estudio. Los experimentos tratan de la simulación del objeto observado. La simulación comprende dos vías para su desarrollo: la simulación experimental y la simulación teórica o computacional.

La simulación experimental se realiza en laboratorios con equipo adecuado para crear un ambiente idéntico controlado con los parámetros de presión, temperatura y composición química lo más cercano posible al estudiado, generando información vital para la alimentación de los modelos matemáticos o computacionales que se utilizaran en la siguiente etapa de simulación. La simulación teórica o computacional depende 100% de los datos obtenidos en las simulaciones experimentales tiene como función evaluar mediante programas computacionales o modelos matemáticos el comportamiento o fenómeno en este caso de un objeto planetario, manipulando todas las variables que permitan crear los posibles escenarios de estudio.

Las herramientas de la observación y la simulación son complementarias en el campo de la investigación. Aunque la simulación hoy en día es una potente herramienta utilizada debido a los bajos costos en la construcción de los experimentos, el menor tiempo de realización, la utilización de equipos, material y personal en menor cantidad y la manipulación del experimento en todo momento, si se compara con las misiones espaciales.

La comunidad científica dedicada al campo experimental han adoptado esta alternativa para obtener sus propias muestras debido al difícil acceso de conseguirlas y preservarlas, por lo tanto la reproducibilidad y repetibilidad de este tipo de experimentos es importante para la investigación científica, principalmente para la astrobiología, ciencia encargada del estudio de los fenómenos planetarios.

## **2.10 ASTROBIOLOGÍA**

La Astrobiología es una multidisciplina de reciente surgimiento en el campo de la ciencia que investiga la vida de nuestro planeta y la posibilidad de vida más allá de ella. En conjunto con otras áreas de las ciencias tradicionales tales como: química, física, biología, geología, astronomía, astrofísica, ingenierías, matemáticas, filosofía, entre otras, se centran en el estudio del origen, distribución y futuro de la vida en el universo.

En México, la Astrobiología se reconoce como una disciplina de reciente instauración, siendo representando con la Sociedad Mexicana de Astrobiología (SOMA) en el 2001, con sede la Universidad Nacional Autónoma de México, en la ciudad de México, como resultado al esfuerzo compartido de diversos investigadores y científicos que colaboran para aportar respuestas a las interrogantes y objetivos de la astrobiología.

Los astrobiólogos tienen la oportunidad de realizar grandes aportaciones hacia la ciencia con el objeto de estudio de encontrar las condiciones adecuadas para el surgimiento de la vida en otros cuerpos planetarios como lo es en nuestro planeta.

Las condiciones básicas que debe tener un planeta, satélite u otro cuerpo celeste para empezar a formar algún tipo de vida aún no se tiene del todo bien dicho, pero si se conocen los requerimientos químicos y físicos indispensables para la vida pueda surgir en algún objeto planetario (Hoehler *et al*, 2007).

Estas condiciones se especifican en:

- 1) Agua en estado líquido. Todo organismo vivo requiere para su nacimiento y desarrollo de una fuente líquida.
- 2) Fuente de carbono. Moléculas orgánicas como aminoácidos o carbohidratos.
- 3) Fuente de energía. Principalmente la que nos proporciona el Sol en forma de radiación solar o la energía interna de un planeta. Todo con el propósito que algún tipo de vida pueda aprovecharlo para realizar la ruptura de las moléculas orgánicas para formar compuestos o moléculas que le permitan proveer de energía.

El punto de partida ha sido la Tierra esto para comprender con mayor detalle todo lo tenemos presente en nuestro planeta, buscando los posibles escenarios que podrían crearse simulando lugares análogos en la misma Tierra de otros cuerpos planetarios o satélites, debido a la gran diversidad de ambientes cálidos, fríos, desérticos, salinos y ácidos que se tienen aquí en el planeta. De hecho ya existen ejemplos de dichos escenarios como el desierto de atacama lugar ideal para representar la superficie de Marte, compartiendo grandes características que lo hacen un análogo perfecto, la NASA ha realizado pruebas de los artefactos y equipos que llevarán en la siguiente misión a Marte.

Entre los cuerpos celestes de interés de estudio de la Astrobiología se centra el planeta rojo Marte, los satélites galileanos de Júpiter como Europa y Ganimedes y los satélites naturales de Saturno Encelado y Titán. Estos cuerpos celestes se han estudiado e identificado en ellos que poseen algunos o todos los requerimientos básicos para albergar la vida.

Marte ha sido el que mayor reto que ha presentado para los científicos, al tratar de encontrar las pruebas que sustente la existencia de vida en el pasado. Se ha planteado que este planeta pudo haber albergado vida primitiva hace aproximadamente 3,600 millones de años. Las imágenes capturadas por las misiones y telescopios desde la Tierra, han encontrado evidencias de posible de actividad geológica en la superficie del planeta, valles, montañas, lechos de ríos, hielo en los casquetes polares todas estas características apuntan que en alguna ocasión la vida pudo haber existido en el planeta (Segura, 2008).

Aunque el panorama hoy en día del planeta resulta desalentador al tener una superficie árida y seca, con temperaturas extremas durante el día como en la noche. Sin olvidar que la tenue atmósfera que aún queda de él, no lo protege de la exposición de la radiación infrarroja, ultravioleta y gamma siendo expuestas a un impacto total de estas energías en la superficie, minimizando la posibilidad de encontrar algún tipo de vida.

Sin embargo no todo está perdido, porque se ha encontrado hielo por debajo de la superficie marciana lo que podría ayudar a conseguir agua líquida para desarrollar la vida en este desértico paisaje, solo falta conocer si este hielo de alguna manera se puede tener acceso para transformarse en agua líquida.

La presencia de agua líquida es indispensable para el desarrollo de la vida en conjunto con la fuente de carbono y energía, esto nos abre una ventana hacia el interés de continuar investigando a este planeta. Misiones en el pasado han realizado estudios de las propiedades físicas y químicas del planeta, sin llegar a una conclusión aún cierta de la existencia de vida en el pasado y presente del planeta (Navarro-González, 2005).

A finales del mes de noviembre del 2011 se lanzó una nueva misión llamada Curiosity que nos permitirá conocer a detalle todas las características físicas de la superficie del planeta renovando las pruebas químicas y bioquímicas que lleva a bordo el robot con la intención de encontrar las evidencias suficientes de la existencia de alguna forma de vida en la superficie del planeta.

Titán uno de los tantos satélites naturales de Saturno otro de los candidatos con mayor auge en los últimos años por la astrobiología, al ser uno de los objetos planetarios que podrían dar las pistas necesarias para explicar el comienzo de la vida en la Tierra. Al tener una atmósfera abundante en  $N_2$  similar a la atmósfera de hace algunos millones de años tenía la Tierra primitiva, causa mayor interés en comprender que ocurrió o como participaron los diversos compuestos orgánicos para que lentamente a través del tiempo fueran transformándose en una atmósfera rica en oxígeno (Raullin *et al*, 2007).

Las condiciones de baja temperatura en Titán han sido un punto crucial en la investigación pues han permitido la conservación durante 4 millones de años de los compuestos orgánicos existentes y producidos por las diversas fuentes de energía en su atmósfera y superficie (Raullin *et al*, 1995).

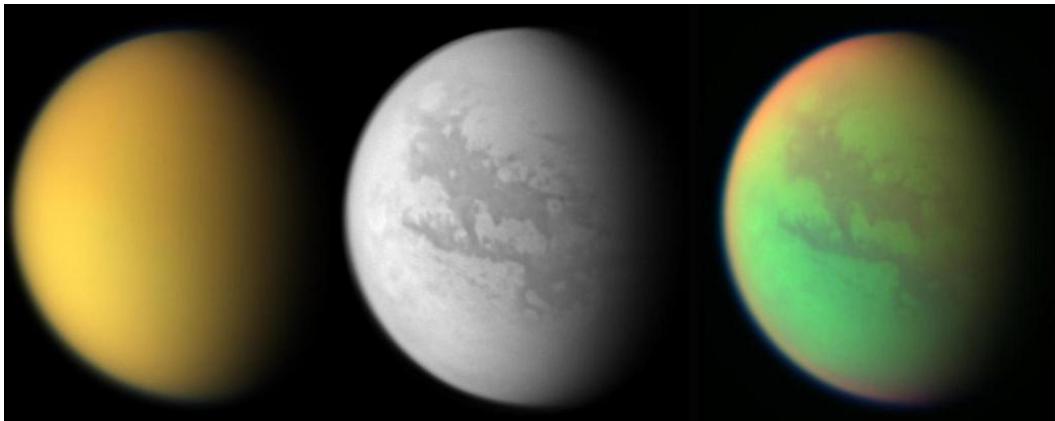
Se considera como un reactor de compuestos prebióticos a escala planetaria, ofreciendo la posibilidad de ver algunos procesos químicos que se produjeron en la Tierra primitiva, a pesar de la ausencia de agua líquida en su superficie.

Aunque se conoce que en Titán tienen un ciclo hidrológico de metano líquido en lugar de agua, diversos puntos de vista de científicos han propuesto escenarios con otros líquidos orgánicos que pudieran cumplir las mismas funciones que el agua. Estos líquidos como el metanol y etanol presentes en la superficie de Titán significarían una vida distinta al conocido por el agua.

La importancia de la astrobiología para estudiar al satélite de Titán se justifica a estas cuatro principales características (Raullin *et al*, 2008 b):

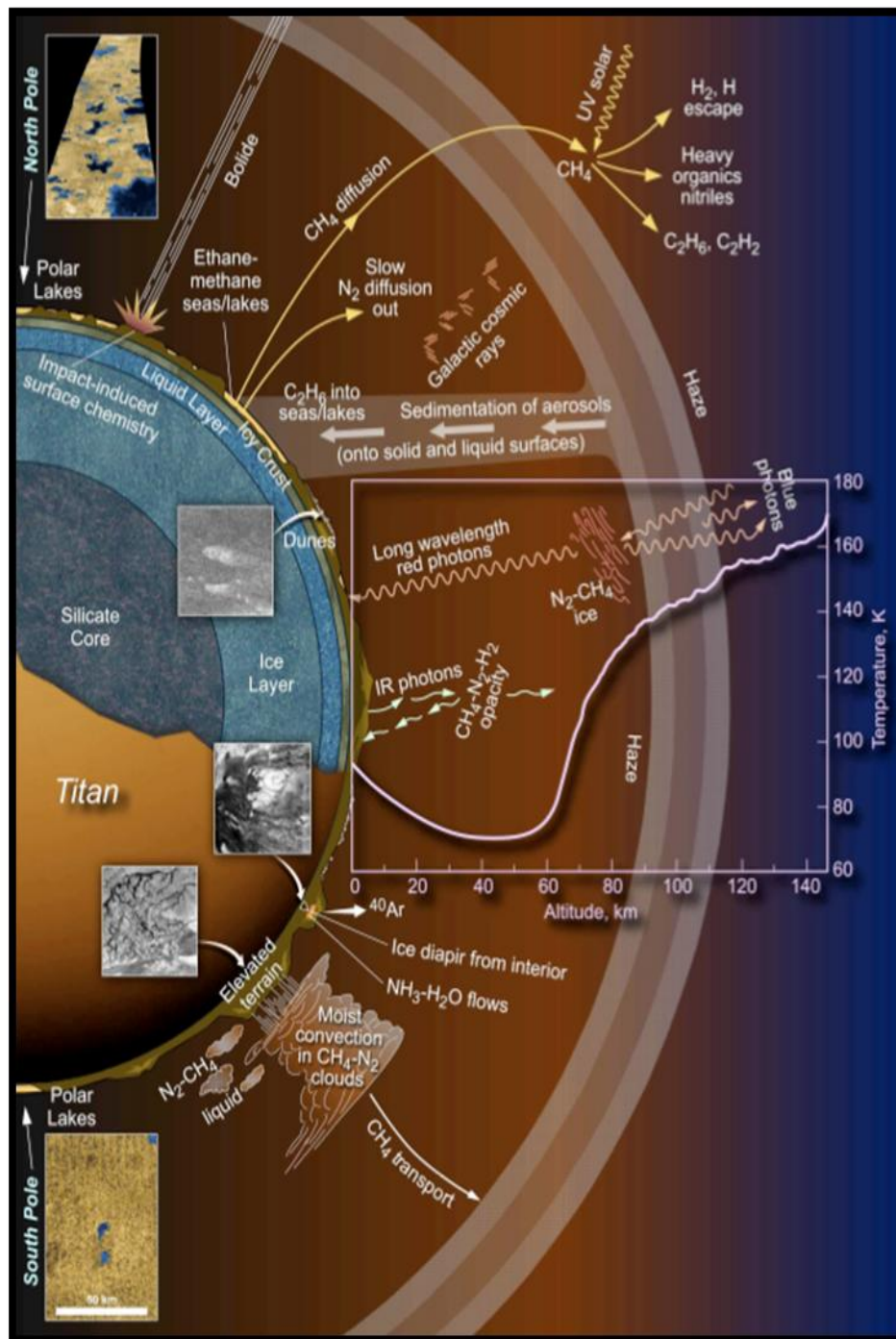
- 1) Las similitudes que se puede encontrar en la atmósfera y la superficie de Titán con la Tierra primitiva.
- 2) Moléculas y compuestos activos de sencilla y compleja estructura química orgánica en el medio ambiente de Titán en la atmósfera de la superficie y muy probablemente del subsuelo.
- 3) La posible presencia de agua semicongelada interna en los océanos del subsuelo de Titán, considerado muy probable por las observaciones del radar de Cassini, teniendo un ambiente potencialmente habitable.
- 4) Por último puede ser un modelo para relacionar la evolución de las moléculas químicas a moléculas activamente biológicas.

Al transcurrir de los años y las diversas misiones que han investigado al satélite Titán se pueden observar (ver figura 10) las diferentes facetas descubiertas de este sorprendente cuerpo celeste, conforme siga avanzando la investigación en detallar la química planetaria que nos oculta Titán nos acercaremos cada vez más a las pistas sobre el origen de la vida como se dio en la Tierra.



**Figura10.** Múltiples facetas del satélite Titán. Créditos NASA/JPL

La Astrobiología tiene un gran reto con la humanidad ser una ciencia capaz de dar explicación a las grandes interrogantes que durante años han sido imposible de responder, con base en los conocimientos de las diferentes disciplinas y el avance de la tecnología espacial realizará grandes contribuciones que podrán cambiar a futuro el panorama de lo que hoy conocemos de la vida.



**Figura II.** Titán desglosado con todos los fenómenos físicos y químicos que presenta en la atmósfera, superficie e interior del sorprendente satélite. (Créditos NASA / ESA / ASI).

## **3. OBJETIVOS**

### **3.1 OBJETIVO GENERAL**

Identificar los compuestos químicos que se producen en una mezcla gaseosa que simula a la atmósfera de Titán constituida por nitrógeno molecular ( $N_2$ ), metano ( $CH_4$ ) y un tercer compuesto monóxido de carbono (CO), expuesta a la acción de descargas eléctricas en un régimen de temperatura baja y flujo continuo.

### **3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Simular las condiciones de la atmósfera de Titán, realizando una mezcla de composición controlada de  $N_2$ ,  $CH_4$  y CO a valores de presión inicial reportados para la capa de la troposfera.
- Realizar irradiaciones de la atmósfera simulada con descargas eléctricas de polaridad positiva a valores intermedios de potencia inicial para evaluar el efecto de estas variables experimentales en la cantidad y naturaleza química de los productos formados
- Cuantificar la cantidad de energía depositadas por las irradiaciones con descargas eléctricas monitoreando en intervalos de tiempo regulares, los valores de corriente y de voltaje para obtener el producto de potencia.
- Caracterizar químicamente a los productos formados en los diferentes experimentos de la fase gas, utilizando las técnicas analíticas de cromatografía de gases y de espectrometría de masas.
- Diseñar un sistema de flujo continuo que permita simular la atmósfera baja de Titán, el motivo del diseño experimental es evitar reacciones secundarias entre los productos primarios formados.

## **4. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

El estudio de Titán, el segundo satélite más grande del Sistema Solar después de Ganimedes, se debe a la existencia de una atmósfera densa rica en nitrógeno molecular ( $N_2$ ) y metano ( $CH_4$ ).

La atmósfera de Titán se puede dividir en regiones estratificadas como existe en la atmósfera de la Tierra. En estos momentos no se ha descubierto ningún otro cuerpo celeste del Sistema Solar que posea estas características tan particulares en su atmósfera.

Algunos de los datos colectados por la misión Cassini-Huygens son valores de presión y temperatura a las diferentes alturas de la atmósfera de Titán, teniendo un promedio de temperaturas por encima de los 500 Km de  $-103^\circ C$ , por debajo de los 500 Km de  $-87^\circ C$  y en la superficie de  $-203^\circ C$  con una presión superficial de 1457 mbar.

Parte de la problemática en estudiar los fenómenos físicos y químicos que ocurren en la atmósfera de Titán, a nivel de laboratorio y desde la perspectiva de la química planetaria es controlar todas las variables que permitan simular las condiciones presentes en el satélite. Se evaluará la influencia de las condiciones experimentales empleadas en las simulaciones para determinar el tipo de especies químicas producidas y la cantidad de compuestos o moléculas químicas que se generan a partir de procesos eléctricos semejantes a los relámpagos terrestres en las condiciones más cercanas del satélite. Para obtener un conocimiento más detallado de la química que alberga Titán y extrapolar la información a ámbitos de estudios en cuestiones del origen de la vida.



## **5. JUSTIFICACIÓN DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN**

En épocas pasadas han existido investigaciones dedicadas a las simulaciones experimentales de atmósferas planetarias tal es el caso del científico estadounidense Stanley Miller quien simuló la atmósfera de la Tierra primitiva en los años 50' su intención fue iniciar los argumentos necesarios para encontrar las respuestas a las preguntas hechas durante años sobre el origen de la vida y aunque causó grandes controversias los experimentos realizados, ayudó a la aportación de ideas y teorías que utilizamos hoy en día como sustento para respaldar el conocimiento en las áreas del tema de la evolución química.

De la misma manera la simulación de la atmósfera de Titán será de gran relevancia para la comunidad científica debido a que nos permitirá comprender la química que existe en el satélite y ver a detalle los compuestos orgánicos producidos, sin tener que viajar esas distancias descomunales para obtener una muestra del satélite, únicamente se tendrá que ir a un laboratorio adecuado en realizar las simulaciones experimentales del ambiente del satélite controlando las condiciones de presión, temperatura, descargas eléctricas y composición de gases que rigen al actual Titán.

Sin duda estos experimentos podrán ser de ayuda para construir las bases del conocimiento necesarios para las generaciones actuales y futuras que se encuentran desarrollando actividades en el estudio de las atmósferas planetarias.

Se espera que en las simulaciones experimentales se sinteticen diversos compuestos o moléculas químicas de interés químico y biológico e identificarlas y cuantificarlas mediante las técnicas de caracterización química como es la cromatografía de gases acoplado a la espectrometría de masas.

Los resultados ayudarán a entender un poco más el tema de la química planetaria, generando conocimiento útil para implementarlo en el estudio de los diversos cuerpos planetarios de interés para la astrobiología y encontrar los argumentos necesarios que expliquen si la vida es un evento único en el planeta e irrepetible en todo el Universo.

## **6. DESARROLLO EXPERIMENTAL**

La siguiente fase del proyecto consistió en realizar la parte experimental de la simulación de la atmósfera de Titán. Esto se logró al controlar y mantener algunas de las variables físicas y químicas del sistema lo más cercanas a lo que se conoce hasta ahora de la atmósfera de Titán, estas variables son: temperatura, presión, composición de gases y descargas eléctricas.

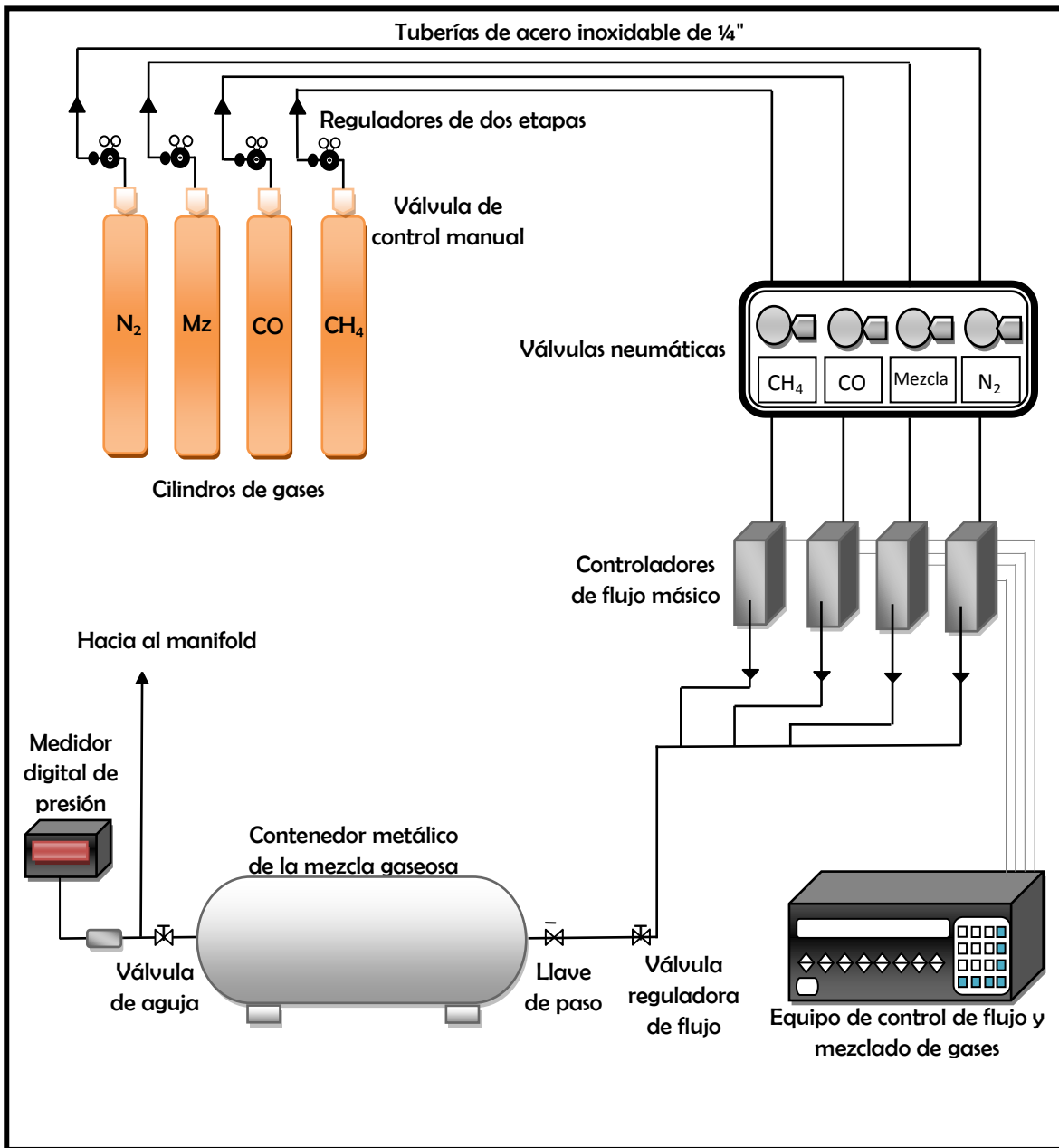
El Laboratorio de Simulación de Atmósferas Planetarias del Centro de Investigaciones Químicas (CIQ) de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM) cuenta con las instalaciones adecuadas para simular el ambiente del satélite. A continuación se describirá a detalle cada una de las características y las funciones de los equipos, instrumentos y los métodos teóricos que se implementan en el desarrollo de la investigación.

### **6.1 SIMULACIÓN DE LA ATMÓSFERA DE TITÁN**

#### **6.1.1. PREPARACIÓN DEL LLENADO DE LA BALA Y LA MEZCLA DE GASES**

La mezcladora de gases digital Advanced Specialty Gas Equipment Model FM4660A está constituida por una red de tuberías de acero inoxidable de ¼" ubicadas dentro y fuera del laboratorio, las tuberías están divididas en cuatro canales con la función de transportar un gas o una mezcla de gases a través de la red de tuberías hasta un contenedor metálico (bala). Cada una de las tuberías se encuentra rotulada de acuerdo al gas que transporta para identificarlas de forma rápida y sencilla durante el proceso.

En la parte exterior del laboratorio se encuentran los gases especiales almacenados en cilindros de alta presión de la marca praxel. Los gases especiales utilizados son: metano (CH<sub>4</sub>), nitrógeno (N<sub>2</sub>) y monóxido de carbono (CO) con un alto grado de pureza de 99.97%, 99.999%, 99.97% respectivamente. Los cilindros están equipados con un regulador de presión de dos etapas, una válvula de paso, una válvula de control de presión manual que permiten el control del flujo de gas a pasar a través de la tubería de acero inoxidable hasta el interior del laboratorio y válvulas restrictoras que aseguran que el flujo de gas sea en un solo sentido para evitar el retorno hacia la línea principal lo que provocaría la contaminación del sistema.



**Figura 12.** Esquema general de la línea de vacío para el llenado del contenedor metálico con la mezcla de gases de la atmósfera simulada de Titán.

El regulador de dos etapas cuenta con dos reguladores, uno de presión alta que nos proporcionó la presión del gas en el cilindro y el segundo regulador de presión baja que reguló la presión de gas a pasar a través de la tubería. La presión utilizada para llenar la bala fue de 40 psi.

En la parte interior del laboratorio una vez abiertas las válvulas de los cilindros, el gas ingresó por las tuberías hasta las válvulas neumáticas correspondiente a cada uno de los gases, ubicadas en un panel metálico etiquetados con el nombre del gas que controla el acceso hacia los moduladores de flujo másico. Estos controladores están calibrados a una velocidad máxima de salida de  $20 \text{ cm}^3 \text{ min}^{-1}$  y una velocidad mínima de  $2 \text{ cm}^3 \text{ min}^{-1}$  y son controlados por la mezcladora de gases.

Mediante comandos electrónicos se realizó una programación de las proporciones de gases a mezclar y automáticamente los moduladores de flujo másico ajustan los valores de gas a pasar en las tuberías, los cuatro canales se unen en una tubería común que se conectan a la bala para almacenar los gases mezclados.

La bala es un contenedor cilíndrico fabricado de acero inoxidable con las siguientes dimensiones 64 cm de longitud y 10.50 cm de diámetro con una capacidad de almacenamiento de 40 psi. En uno de sus extremos tiene integrado un sensor de presión Omega Dp-350 para monitorear la presión interior de la bala. En la figura 12. Se muestra un esquema general de la línea de vacío para el llenado de la bala con la mezcla de gases de la atmósfera simulada de Titán.

### **6.1.2 LIMPIEZA DE LA RED DE TUBERÍAS Y CONTENEDOR METÁLICO (BALA)**

Antes de llenar la bala con la mezcla de gases, se hizo una limpieza general en todas las tuberías y en el contenedor metálico, esto con motivos de evitar típicamente alguna contaminación de la mezcla con gases no deseados. La limpieza se realizó con la ayuda de una bomba mecánica Alcatel (modelo Pascal serie 2015I) y una bomba difusora MKS (modelo Series 945) alcanzando presiones de vacío de  $10^{-2}$  mbar y  $10^{-5}$  mbar respectivamente.

El proceso de limpieza consistió en dos etapas: la primera etapa se utilizó una bomba mecánica para alcanzar una presión constante de  $2 \times 10^{-2}$  mbar, previamente todas las válvulas del cilindro de gas que comunican al contenedor metálico habrán sido abiertas para tener el acceso total al vacío en toda la red de las tuberías, después de un tiempo se realizó el cambio de bombas mediante una llave de paso que comunica a la bomba mecánica con la bomba difusora, una vez realizado el cambio la bomba difusora se dejó funcionar por un tiempo hasta alcanzar nuevamente una presión constante por lo menos de  $2 \times 10^{-4}$  mbar.

Al finalizar el proceso de limpieza en las tuberías se cerró la llave izquierda del manifold que comunica a la bomba difusora para continuar con el proceso del llenado de la mezcla de gases deseada.

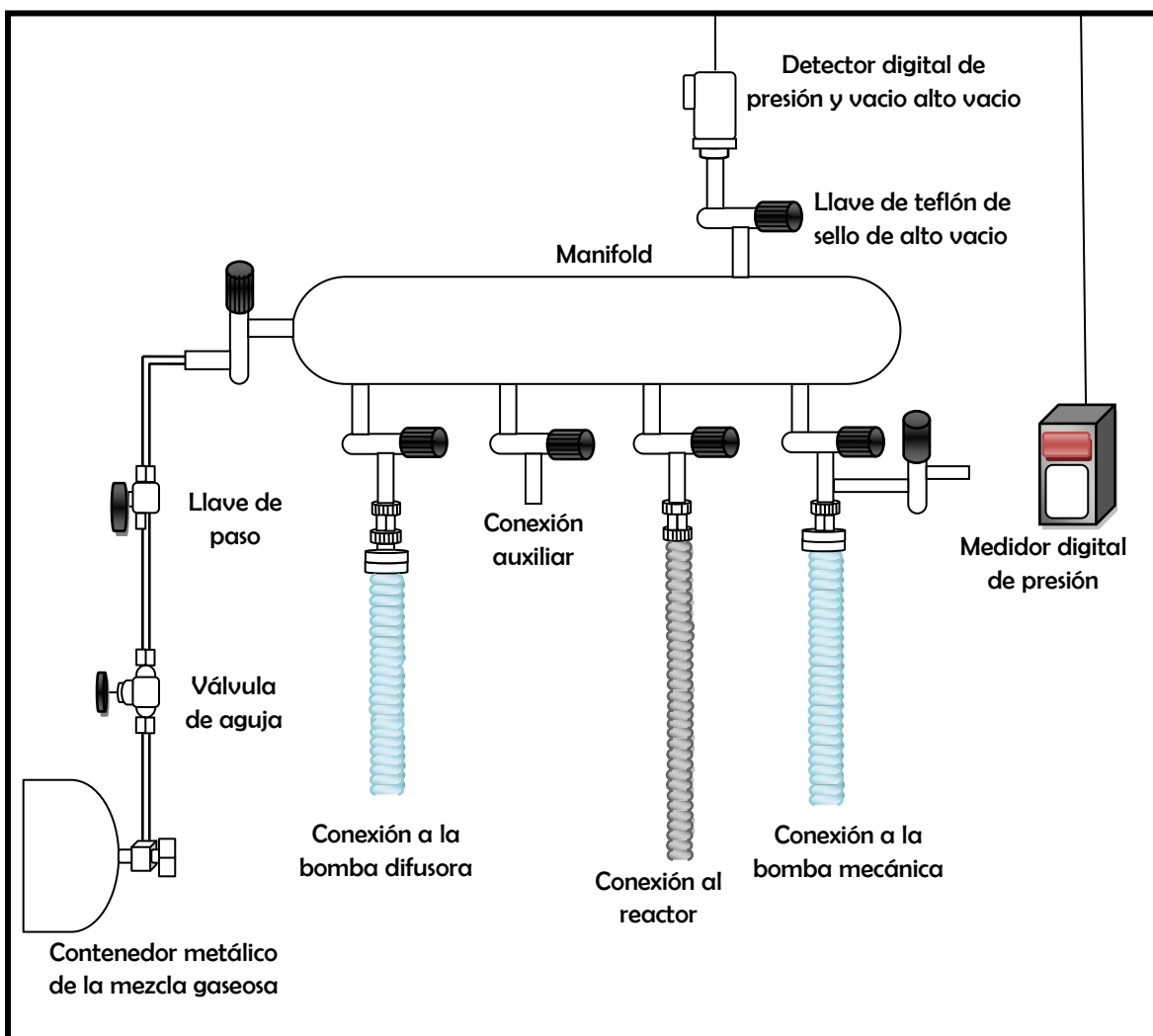
## **6.2. PREPARACIÓN DE UN AMBIENTE LIBRE DE ATMÓSFERA TERRESTRE.**

La simulación de un ambiente extraterrestre como es la atmósfera de Titán implicó eliminar cualquier tipo de molécula o compuesto químico perteneciente a la atmósfera terrestre principalmente de oxígeno, la razón principal es evitar una contaminación en la mezcla de gases durante y después del llenado del reactor. El sistema de vacío permitió desalojar en su totalidad todas las partículas, moléculas o compuestos existentes en la línea principal y las redes de tuberías que transportan a la mezcla de gases así como en el manifold y el reactor garantizando un vacío total.

El sistema de vacío está conformado de la siguiente manera, la parte principal es un tubo cilíndrico de vidrio pyrex con dimensiones de 40 cm. de largo y 4 cm. de diámetro con una capacidad de 0.957 litros, esta parte del sistema de vacío se le conoce como manifold. El manifold a su vez está dividido en tres partes: una superior, una inferior y lateral. En la parte superior se encuentra conectado un sensor de presión Dual trans MKS con la función de medir la presión en el sistema. En la parte inferior existen cuatro salidas con extensiones prolongadas de vidrio pyrex adicionales con llaves de teflón de sello de alto vacío que permiten el acceso o la evacuación de los gases. Cada salida está enumerada de izquierda a derecha para identificarlas. La salida número uno comunica a la bomba mecánica con la función de eliminar presiones de vacío por debajo de  $2 \times 10^{-2}$  mbar. La salida número dos es el puerto de conexión al reactor, el cual se conecta por medio de una extensión metálica de 34 cm de longitud. La salida número tres es una segunda conexión alterna (utilizada en caso de conectar otro reactor al sistema). La salida número cuatro comunica a la bomba difusora. En la parte lateral derecha continúa la línea principal de acero inoxidable proveniente del contenedor metálico.

La preparación del ambiente vacío se inició al encender las bombas mecánica y difusora hasta que en ambas alcanzarán el óptimo de funcionamiento, luego se conectó la extensión metálica al reactor con el manifold en la salida número dos, se prosiguió a abrir la salida número uno para realizar un vacío común en toda la línea principal, el manifold y el reactor para alcanzar una presión de  $2 \times 10^{-2}$  mbar. Se procuró abrir poco a poco la llave que permite el acceso al reactor para retirar la presión atmosférica existente sin alcanzar valores mayores a 5 mbar que puedan causar daño a la bomba mecánica.

Una vez obtenido el valor de presión de  $2 \times 10^{-2}$  mbar de la bomba mecánica se cierra la salida número uno e inmediatamente se cambia la llave de paso que comunica la bomba mecánica hacia la bomba difusora, para abrir la salida número cuatro y continuar con la línea de vacío en el sistema. Cuando la bomba difusora ha alcanzado un vacío de  $1 \times 10^{-5}$  mbar se garantiza que el reactor se encuentra con un vacío total y listo para comenzar su llenado con la mezcla de gases. En la figura 13. Se ilustra un esquema que muestra las conexiones y los instrumentos que se utilizan en el vaciado y llenado del reactor con la mezcla de gases.



**Figura 13.** Representación de la línea de vacío para el vaciado y llenado del reactor con la mezcla de gases  $N_2$ ,  $CH_4$  y  $CO$

### 6.3 ESPECIFICACIONES DEL REACTOR

El reactor es la parte medular de los experimentos, su objetivo de contener la mezcla de gases que simulan el ambiente de Titán. A continuación mencionó las especificaciones de forma y tamaño (ver figura 14).

El reactor es de vidrio pyrex con forma cilíndrica, está compuesto por tres piezas: una pieza central y dos extremos. Los extremos son extensiones de vidrio simétricas cada uno tiene una llave de sello de alto vacío que permite la entrada o salida de gases al interior del reactor, en el interior de las dos partes tienen soldado en el centro un electrodo de tungsteno de 8 cm. de largo, los electrodos de tungsteno mantienen una distancia de 3 cm. La parte central es un cilindro con altura de 10 cm. y 8 cm. de largo en el interior tiene un tubo concéntrico de 2 cm de diámetro. El centro y cada lado se acoplan por medio de anillos de O-ring y pinzas de presión formando una pieza. En la parte superior del centro del reactor tiene dos orificios de 1 cm. de diámetro cada uno a una distancia respecto al otro de 3 cm., su función es la de proveer una entrada al nitrógeno líquido que al ser vertido envuelve toda la superficie del tubo del interior de la cámara alcanzando las temperaturas bajas del satélite.

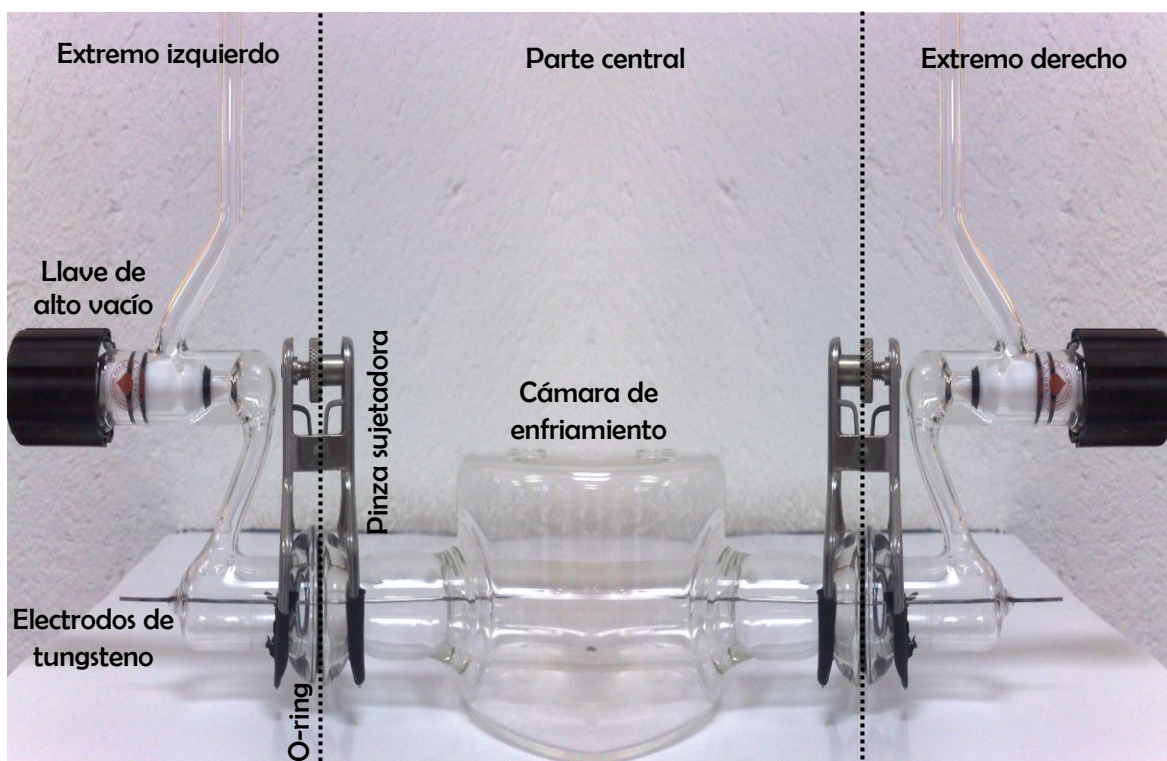


Figura 14. Dimensiones y accesorios del reactor utilizado en las experimentos de la atmósfera simulada de Titán.

### **6.3.1 LLENADO DEL REACTOR CON LA MEZCLA GASEOSA**

Existen dos requisitos indispensables para el llenado del reactor y garantizar la simulación de la atmósfera de Titán. El primer requisito para el llenado del reactor es que debe estar totalmente limpio, verificando que no contenga ningún residuo sólido o líquido en las paredes internas y externas del reactor para evitar la contaminación de la muestra. Los electrodos también deben estar perfectamente brillantes (limpios) para aprovechar la máxima eficiencia en las irradiaciones, esto evitó tener interrupciones por incrustaciones de materia orgánica lo que provoca la incorrecta formación de las descargas eléctricas en el reactor. En la sección 5.3.2. se describe el procedimiento de limpieza del reactor.

El segundo requisito es verificar cuidadosamente todas las uniones de las piezas del reactor así como las conexiones con las extensiones metálicas del manifold al reactor procurando eliminar todas las fugas existentes, esto evitará la contaminación del reactor con moléculas de oxígeno. Una vez hecho caso a las indicaciones anteriores se comenzó el proceso de vaciado del reactor como se especifica en la sección 5.2. Preparación de una ambiente libre de atmósfera terrestre.

Al término del proceso, se comenzó el llenado del reactor abriendo poco a poco la válvula de aguja que permite regular la presión de mezcla de gas a suministrar por medio del display del sensor omega, en los experimentos en sistema cerrado se utilizó una presión de 650 mbar y en los experimentos de flujo continuo se utilizó una presión constante. La primera mezcla gases empleada es una composición de nitrógeno y metano en una proporción 98:2. En la segunda mezcla de gases se utilizaron tres compuestos nitrógeno, metano y monóxido de carbono en proporciones 94:5:1. Estos datos están basados de acuerdo a las cantidades presentes de cada uno de los compuestos existentes en la atmósfera de Titán (ver tabla 3 en la sección de marco teórico).

### **6.3.2 LIMPIEZA DEL REACTOR**

Las piezas del reactor son desmontable, esto con la finalidad de facilitar la limpieza y eliminación de las partículas de polvo, agua, compuestos del ambiente, restos orgánicos adheridos a los electrodos o paredes del reactor.

La limpieza se realizó de la siguiente manera: se preparó una mezcla sulfonítrica con ácido sulfúrico concentrado y ácido nítrico en volumen 1:1. En las paredes de la cámara y en los extremos, se vierten pequeñas cantidades de la mezcla sulfonítrica en forma descendente para retirar los restos de materia carbónica.



Luego se enjuagó cada parte, primero varias veces con agua de la llave y al final con agua desionizada hasta eliminar totalmente el residuo de los ácidos. Se verificó la limpieza del reactor por medio de la transparencia del cristal colocando un papel blanco bajo el reactor.

Los electrodos de tungsteno se limpiaron con mucho cuidado con lijas microfine con movimientos lentos de arriba hacia abajo hasta tener una apariencia brillante. Se procuró no mover bruscamente los electrodos debido a que son altamente sensibles y pueden romperse con facilidad. Las piezas se secan totalmente en una estufa eléctrica a una temperatura entre 90°C – 110°C durante un periodo de 1 hora para retirar toda la humedad contenida por el lavado. Por último se ensamblaron las piezas para continuar con los experimentos.

#### **6.4 APLICACIÓN DE LAS DESCARGAS ELÉCTRICAS**

Una vez lleno el reactor con los gases y proporciones de cada condición de experimentación, se transportó al reactor a otra área del laboratorio designada para realizar las descargas eléctricas.

La intención de simular mini relámpagos fue por medio de una fuente de poder aplicando las descargas eléctricas a una distancia existente entre los dos electrodos de tungsteno. Las irradiaciones son formadas por medio de una fuente de poder que provee de energía eléctrica. La interacción de los gases con la energía de las descargas conlleva a la formación de nuevos compuestos, estos compuestos son los que nos interesan estudiar, por lo que procederemos a identificarlos con las técnicas analíticas.

Esta parte del experimento consiste en simular los relámpagos presentes en la atmósfera Titán, en específico los que se forman en la región de la troposfera. El equipo utilizado en esta sección comprende de una fuente de poder, una computadora y las conexiones de corriente de alto voltaje.

La fuente de poder Glassman High Voltaje INC es el equipo utilizado para generar corriente eléctrica. Los valores máximos de corriente y voltaje que suministra son de 0-3 mA y de 0-30 kV respectivamente. Tiene dos indicadores en la parte frontal que proporcionan los datos de corriente y voltaje en tiempo real. El ajuste de los valores puede ser análogo girando las perillas situadas en la parte lateral de los indicadores en el sentido de las manecillas del reloj o en forma digital mediante un software instalado en la computadora, ingresando los valores deseados de corriente y voltaje en las ventanillas correspondientes del programa. En el equipo tiene la opción de cambiar la polaridad de positiva o negativa.

Para utilizar la corriente eléctrica de alto voltaje se tomaron precauciones para evitar accidentes, instalando cables especiales en el manejo de alto voltaje, uniones aisladas y un cable a tierra para las conexiones del reactor y la fuente de poder, todo esto con el fin de minimizar la posibilidad de fugas eléctricas.

El reactor se conectó con la fuente de poder colocando el cable de corriente en la parte izquierda del electrodo y el cable a tierra en la parte derecha del electrodo. Después se virtió nitrógeno líquido en los orificios del reactor hasta llenarlo por completo dejando un tiempo de reposo de 4 a 5 minutos para homogenizar las bajas temperaturas dentro del reactor, se requería retroalimentarlo cada vez que el nivel de nitrógeno bajaba para no perder la temperatura óptima. El uso de nitrógeno líquido permitió simular el ambiente frío.

## **6.5 CONDICIONES EXPERIMENTALES**

En las simulaciones de la atmósfera de Titán se controlaron los siguientes parámetros: temperatura, composición de gases, polaridad, tipo de sistema, cantidad de presión y tiempo de irradiaciones.

Se plantearon dos tipos de experimentos para las simulaciones.

Experimento 1: se empleó una mezcla compuesta de dos gases, nitrógeno y metano en proporción 98:2 respectivamente, temperatura de 83 K, polaridad positiva, una presión de 650 mbar colocada dentro del reactor y tiempos de irradiaciones de 0.5 a 30 min empleando el sistema cerrado.

Experimento 2: se utilizó una mezcla de gases compuesta por nitrógeno, metano y monóxido de carbono en proporción 94:5:1 respectivamente, temperatura de 83 K, polaridad positiva, una presión constante de 2 mbar y tiempos de irradiaciones de 0.5 a 30 minutos empleando el sistema de flujo continuo.

## **6.6. ELABORACIÓN DE UNA GRÁFICA DE CALIBRACIÓN**

Para conocer el número de moléculas presentes en los experimentos se requirió de la elaboración de una gráfica de calibración a partir de una mezcla estándar de compuestos conocidos. En este caso se utilizó una mezcla certificada de hidrocarburos.

Se realizó el llenado de la bala con la mezcla certificada de hidrocarburos utilizando la mezcladora de gases de cuatro canales, diluyendo al 2% con nitrógeno molecular ( $N_2$ ). La concentración final de cada uno de los constituyentes de la mezcla certificada se muestra en la tabla 4.

**Tabla 4.** Composición de la mezcla certificada de hidrocarburos.

Compuestos	Proporción (cmol/mol)	Concentración (ppm)	Concentración diluida al 2% (ppm)
1.- Etano	1.008	10080	201.6
2.- Etileno	0.996	9960	199.2
3.- Acetileno	1.028	10280	205.6
4.- Cloruro de etilo	1.001	10010	200.2
5.- Propano	1.01	10100	202
6.- Propileno	0.998	9980	199.6
7.- Propadieno	1	10000	200
8.- Diclorodifluorometano	1	10000	200

Para estos experimentos se utilizó un reactor esférico con un volumen de 0.2807 litros integrado con una llave de teflón de alto sello. En la parte superior del manifold se conectó el reactor esférico para llenarlo con la mezcla estándar. Se inyectaron presiones de 800, 600, 400, 200, 100, 50 y 25 mbar de la mezcla estándar al CG-EM. Las mediciones son por triplicado.

El CG-EM realiza la separación e identificación de cada uno de los constituyentes de la mezcla, los cromatogramas que el equipo proporcionó nos permiten conocer los datos de área bajo la curva y el tiempo de retención de los constituyentes de la fase gas.

Se construyó una gráfica de calibración para cada uno de los compuestos identificados en la mezcla, en estas se grafican los números de moléculas de cada compuesto que equivalen a 800, 600, 400, 200, 100, 50 y 25 mbar contra el área bajo la curva de los picos cromatográficos, se realizó un ajuste lineal mediante el método de mínimos cuadrados y se eligió el compuesto a utilizar como estándar de los ocho compuestos de la mezcla estándar. En este caso se eligió al etileno quien presentó mayor similitud con los compuestos sintetizados en los experimentos. A partir de la ecuación de la recta resultante del ajuste lineal, se determinó el número de moléculas de cada compuesto sintetizado en la simulación de la atmósfera de Titán.

### 6.6.1 CÁLCULO DEL NÚMERO DE MOLÉCULAS DE LOS COMPUESTOS

Al ser una fase gas lo que se utilizó en el desarrollo de las simulaciones de la atmósfera, no se puede tomar una balanza analítica y pesar la cantidad de mezcla de cada uno de los constituyentes que se están incorporando en la mezcla estándar, por lo que, para conocer el número de moléculas de cada uno de los constituyentes de la mezcla se hizo uso de la ecuación que describe la ley de los gases ideales.

Ecuación de la ley de los gases ideales:

$$PV = nRT \dots \dots \dots \text{Ecuación 1}$$

Donde:

- P= presión del ambiente (atm o mbar).
- V= volumen del recipiente (L).
- T= temperatura del ambiente (K o °C).
- n= número de moles del compuesto (moles)
- R= constante de los gases ideales

Se despeja la variable de número de moles (n) y se sustituyen cada uno de las variables con los valores correspondientes. Dando la siguiente ecuación:

$$n = PV / RT \dots \dots \dots \text{Ecuación 2}$$

En este caso los valores son iguales para todos los experimentos cambiando únicamente el valor de presión inyectada:

- T= 21 °C o 294.15 K
- V= 0.2807 litros
- P= 600 mbar o 0.6 atm
- R= 0.0820 atm x L / mol x K

De acuerdo con la ecuación despejada  $n = 6.98 \times 10^{-3}$  moles, correspondientes a los 600 mbar de presión inyectada. Una vez obtenido el número de moles podemos calcular el número moléculas de cada uno de los constituyentes de la mezcla multiplicándolo por el número de Avogadro.

$$\text{Número de Avogadro} = 6.022045 \times 10^{23} \text{ moléculas}$$

Ahora es posible calcular la cantidad de moléculas presentes en la mezcla de gases estándar a 600 mbar de presión.

$$\text{Número de moléculas} = \text{número de moles} \times 6.022045 \times 10^{23}$$

### **6.6.2 CÁLCULO DE LA ENERGÍA DEPOSITADA EN LAS SIMULACIONES.**

Es importante conocer la cantidad de energía utilizada en cada uno de los experimentos de la simulación de la atmósfera de Titán, para determinar la eficiencia de las transformaciones químicas, y para comprender el papel que juegan la potencia en la síntesis de los compuestos producidos en las simulaciones de la atmósfera.

A continuación se mostrará los cálculos necesarios para obtener la potencia de cada experimento. Una vez conocida el valor de potencia puede calcularse el rendimiento energético en función de la energía suministrada en las irradiaciones de cada uno de los productos sintetizados en los experimentos de la simulación de la atmósfera del satélite.

Para conocer la potencia de la descarga eléctrica es necesario hacer uso de los valores de corriente y voltaje de salida y la ley de potencia (ver ecuación 3).

$$W = V \times I \dots\dots\dots \text{Ecuación 3}$$

Donde:

W= potencia ( $J s^{-1}$ )

V= voltaje (kV)

I= corriente (mA)

Por medio del producto del voltaje y la corriente puede estimarse el valor de la potencia de las descargas. Por lo tanto los datos capturados por triplicado de los valores de voltaje y corriente en los diferentes tiempo de irradiación se trataron con la ecuación anterior, para obtener el valor numérico de la potencia (P) de cada experimento.

### **6.6.3 CÁLCULO DEL RENDIMIENTO ENERGÉTICO**

El término de rendimiento energético se refiere a la cantidad de compuestos producidos de una mezcla de gases por unidad de tiempo. Los rendimientos energéticos que se obtengan de cada compuesto sintetizado en los experimentos se calcularon graficando el número de moléculas sintetizadas de un compuesto químico contra la cantidad de energía depositada por las irradiaciones.

## **6.7. ANÁLISIS DE LAS MUESTRAS EN EL CROMATÓGRAFO DE GASES ACOPLADO AL ESPECTRÓMETRO DE MASAS.**

Para proceder al análisis de las muestras, se colocó al reactor en la parte superior del equipo analítico sobre una base metálica, se tomó un extremo y se conectó a una extensión metálica del cromatógrafo de gases GC, *Finnigan Trace Ultra K8880272 Thermo Electron-Corporation* acoplado a un espectrómetro de masas EM, *Finnigan PolarisQ Thermo Electron-Corporation* (ver figura 15).



**Figura 15.** Equipo de cromatógrafo de gases acoplado al espectrómetro de masas ambos conectados a un ordenador para la visualización y tratamiento estadístico-matemático de la información.

Antes de la inyección de la muestra en el cromatógrafo de gases se realizó previamente un vacío en las líneas y la válvula neumática que condujeron la muestra al analizador. Para realizar el vacío en el equipo se utilizó una bomba de paletas rotatorias con capacidad de alcanzar presiones de vacío de  $10^{-3}$  mbar.

A continuación la inyección de la muestra al CG es de forma automática, se abrió la válvula de teflón de alto sello de vacío, el reactor dejó pasar la muestra en fase gas a través de la línea metálica que comunica al equipo. La muestra se dirigió hacia la válvula neumática de 6 puertos colocando un volumen de 1 ml. Una vez inyectada la muestra al CG inicia su recorrido por una columna de 30 m de largo x 0.32 mm de diámetro interno con una película de 20  $\mu\text{m}$  de espesor de poliestireno-divinilbenceno (DVB) como fase estacionaria.

El helio es el gas inerte que se utilizó en el cromatógrafo de gases como fase móvil y permitió transportar la muestra a través de toda la columna cromatografica del equipo hasta el detector. El análisis o la corrida de los experimentos tuvo una duración de 25 minutos, durante ese tiempo se programó la siguiente rampa de temperaturas que nos permitió separar adecuadamente los compuestos presentes en la muestra debido a los diferentes puntos de ebullición de cada uno. Se comenzó con una temperatura de 30°C por 2 minutos, luego da paso a un incremento de temperatura de 20 °C por cada minuto hasta llegar a 90 °C. La última variación de temperatura fue de 10°C por cada minuto hasta alcanzar una temperatura final de 260°C. Posteriormente la temperatura del horno disminuyó hasta una temperatura de 30 °C para prepararse para un nuevo análisis.

Los compuestos separados por el CG son enviados al espectrómetro de masas a través de una línea de transferencia, el punto de partida de la muestra es la cámara de ionización que se encuentra a una temperatura de 200°C. En el lugar se lleva a cabo la ionización de los productos formados en la simulación mediante el bombardeo de electrones positivos producidos por un filamento de tungsteno caliente con una energía cinética de 70 eV. Los iones o fragmentos generados son almacenados en el analizador de masas, el instrumento utilizado es una trampa de iones que separa los iones de acuerdo a la relación a la masa/carga ( $m/z$ ). Los fragmentos ionizados son trasferidos a través del analizador hasta llegar al detector que capta la señal del haz de iones produciendo una señal eléctrica particular para cada ion, la cual es procesada y almacenada en la memoria del ordenador.

La presentación de los datos es por medio de cromatogramas y espectros de masas. Los cromatogramas son una representación gráfica de los componentes separados, en el cromatógrafo de gases ocurre la separación de los compuestos químicos en función del tiempo de retención. Los espectros de masas son gráficas que representan la intensidad de los iones o fragmentos formados en función de la masa/carga ( $m/z$ ).

Una vez con los cromatogramas y espectros se procedió a la identificación de cada uno de los compuestos químicos que han sido separados. En mi caso use como ayuda el programa Xcalibur, un software integrado al ordenador que permite comparar cada uno de los picos cromatográficos con una la biblioteca virtual de espectros de diverso compuestos almacenados memoria del ordenador, es así como puedo tener una lista de posibles compuestos y finalmente en base a mi conocimiento en espectrometría de masas, decidir cuál es la identidad del compuesto.

Toda la metodología anterior se aplicó para un sistema cerrado donde se colocó una cantidad fija de mezcla de gases en cada uno de los experimentos. Sin embargo uno de los objetivos planteados en esta investigación es diseñar un sistema de flujo continuo, para conocer la cantidad y naturaleza de los productos formados en este sistema. Ahora se mencionaran los ajustes que se tuvieron que realizar para implementar este proceso.

## **6.8 DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE UN SISTEMA DE FLUJO CONTINUO**

Todos los equipos e instrumentos utilizados en la metodología anterior son empleados para un sistema cerrado.

Uno de los objetivos planteados en el trabajo de tesis fue el diseñar y construir un sistema de flujo continuo que permitiera usar la mezcla de gases de nitrógeno, metano y monóxido de carbono en un régimen de flujo constante, a baja temperatura, con descargas eléctricas y cambios en la alimentación de presión de gases al sistema de vacío durante las irradiaciones. Los tiempos de irradiación fueron de 0.5, 1, 2, 5, 10, 20 y 30 minutos, estando sujetas a interrupciones por incrustaciones de materia orgánica en los electrodos de tungsteno.

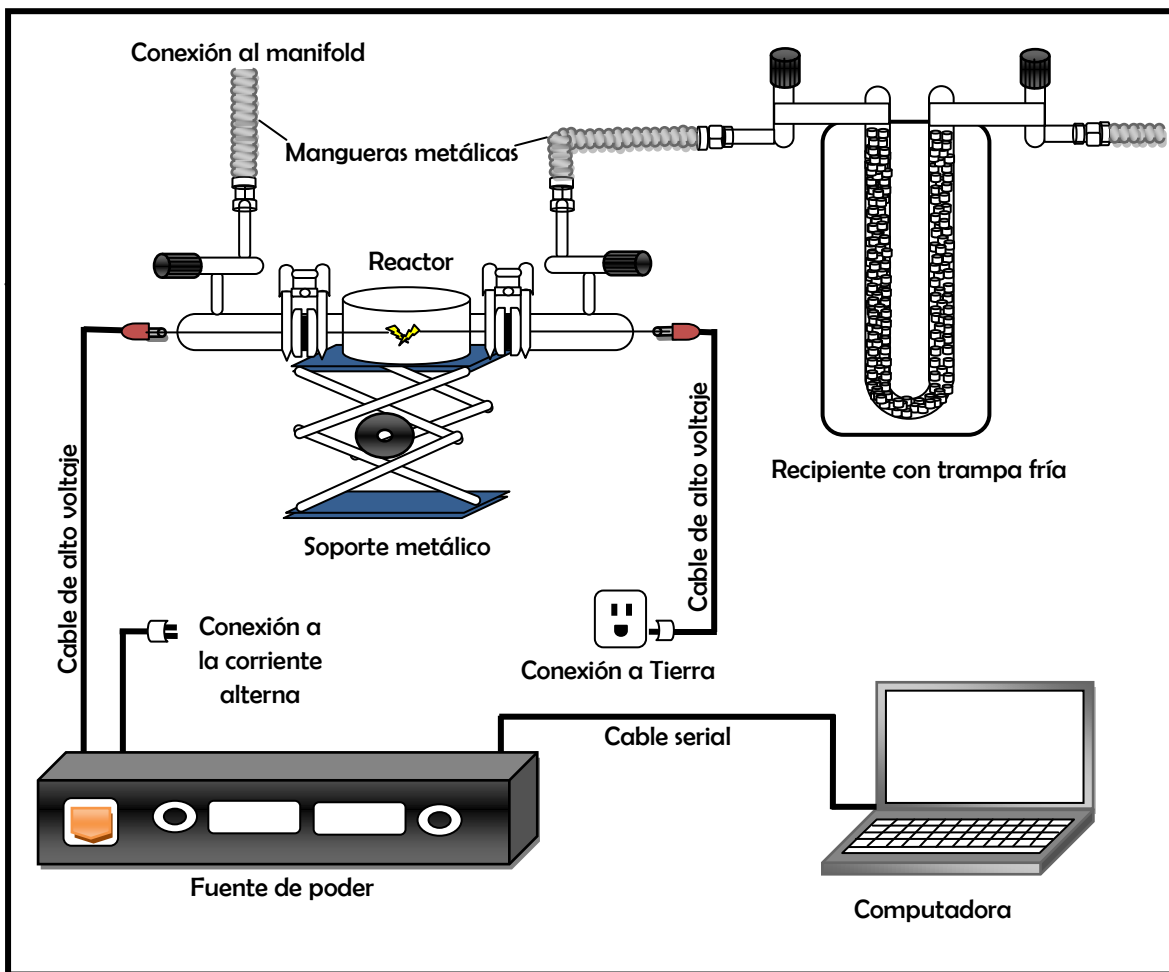
Una vez transcurrido el tiempo de la irradiación se prosiguió con el análisis cualitativo y cuantitativo de las especies químicas formadas, implementando el mismo procedimiento utilizado para conocer la cantidad de moléculas formadas en el sistema cerrado.

Para realizar los experimentos a flujo continuo se tuvieron que realizar algunas modificaciones al sistema de vacío, estas modificaciones consistieron en la adaptación de una llave de alto de sello de vacío en la salida número de uno del manifold que conduce a la bomba mecánica, en la parte lateral se incorporó una llave en forma horizontal proporcionando una salida a los gases producidos en los experimentos, la intención era hacer circular la mezcla de gases sobre todo el sistema de vacío procurando mantener un sistema seguro en donde los gases no interaccionarán con el medio ambiente ni en el espacio designado de los experimentos del laboratorio, asegurando el flujo constante de la mezcla de gases a través del sistema sin repercutir en la salud y seguridad del laboratorio.

Luego de modificar el sistema de vacío para implementarlo hacia el sistema de flujo continuo, era necesario idear y diseñar un recipiente en la parte final del sistema que recolectará los productos sintetizados en las simulaciones. La trampa fría como fue denominada, tenía la función de retener y almacenar la mayor cantidad de compuestos sintetizados en los experimentos, asimismo la de evitar la formación de compuestos secundarios a partir de los productos primarios.

En la figura 16 se muestra el esquema general con los accesorios, equipos y recipientes implementados para desarrollar las simulaciones de la atmósfera de Titán a flujo continuo.





**Figura 16.** Esquema experimental para la generación de las descargas eléctricas en el reactor de flujo continuo, monitoreando los valores de voltaje y corriente generados en las descargas para obtener el valor de potencia.

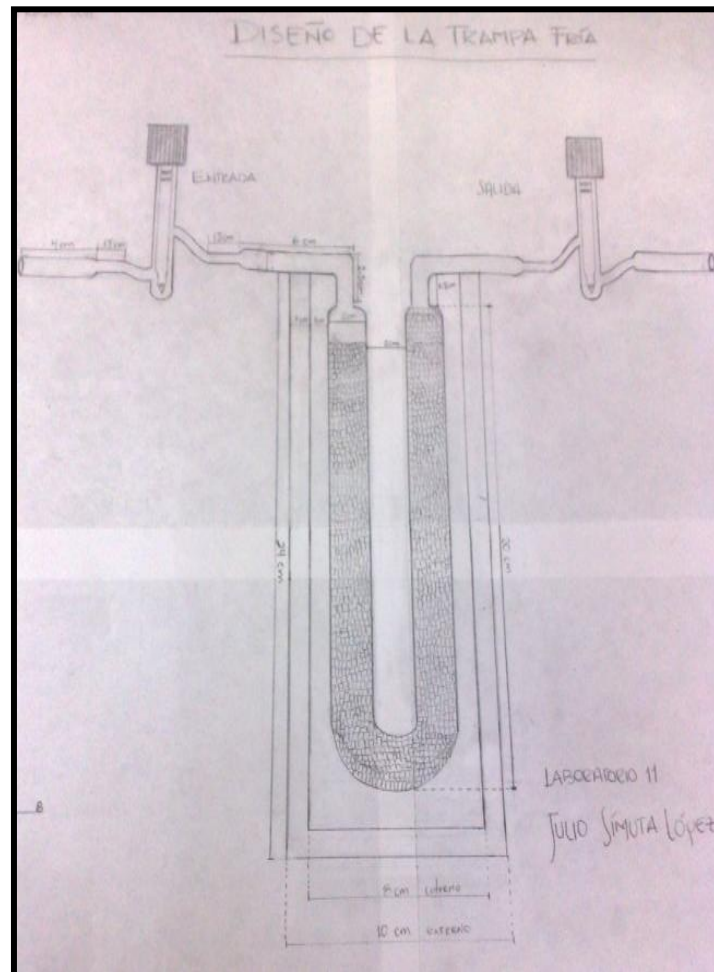
Las especificaciones de la trampa fría se mencionan a continuación: compuesta por dos piezas independientes, la primera es un cilindro con una altura de 24 cm y un diámetro de 10 cm, con un espesor de pared de un centímetro, en ese espacio se le realizó un vacío con la ayuda de una bomba mecánica para garantizar el aislamiento con el medio ambiente, de esta forma permitió que el nitrógeno líquido vertido en el interior del recipiente tuviera un mayor tiempo de vida útil en los experimentos.

La otra pieza es un tubo cilíndrico en forma de U con una altura de 30 cm y un diámetro de 3 cm, el tubo estaba empacado completamente sin dejar espacio alguno con cuerpos cilíndricos de 0.2 mm de diámetro y 0.2 mm de altura para aumentar la capacidad de retención de los compuestos químicos sintetizados en las simulaciones.

Además posee en ambos lados tubos de 2 cm de diámetro, los cuales fungen como conexiones para ensamblarlos a las llaves de alto sello de vacío de teflón que permitieron el acceso de la mezcla de gases, al final de ambas llaves los tubos de salida quedaron con un diámetro de 0.8 mm, los cuales están ajustados a las medidas de los accesorios utilizados en el sistema de flujo continuo.

La trampa fría está fabricada de vidrio pyrex para soportar los cambios bruscos de temperatura a los que se someta.

En la figura 17 se muestra el dibujo del diseño de la trampa fría especificando las medidas para su construcción y en la figura 18 se observa la trampa fría de cristal, la cual fue fabricada en el taller de vidrio del CIQ de acuerdo a las especificaciones del diseño. Asimismo en la figura 19 se visualiza la ubicación de los instrumentos y equipos utilizados en la simulación de la atmósfera de Titán del laboratorio de atmósferas planetarias.



**Figura 17.** Diseño de la trampa fría con sus medidas y especificaciones en papel

Las características principales que debe reunir la trampa fría se describen a continuación:

- Ser de fácil uso, transporte y manejo
- Ser resistente a los cambios bruscos de temperatura
- Mantener las condiciones de la simulación de la atmósfera de Titán
- Permitir el análisis de la muestra en intervalos irregulares.
- Retener los compuestos sintetizados en los experimentos

Durante las simulaciones experimentales la trampa fría al igual que la cavidad del reactor fueron llenados con nitrógeno líquido con la finalidad de enfriar en forma homogénea las partes por donde se transportaban los compuestos químicos formados en las irradiaciones, logrando que se condensaran y quedaran retenidos dentro de la trampa. Después del tiempo programado en las descargas eléctricas se desconectaban las partes que ensamblaban al tubo en forma de U, para transportarlo hacia la plataforma analítica que se conectaba a uno de los extremos de la trampa fría a la extensión del CG, utilizando una secadora calentábamos el recipiente para retornar los compuestos químicos a la fase gas y se introdujeran dentro del equipo analítico para analizarlos.



**Figura 18.** Trampa fría lista para ser usada en las simulaciones experimentales.



**Figura 19.** Manifold, reactor, trampa fría y equipos utilizados en las simulaciones del laboratorio de atmósferas planetarias.

## 7. RESULTADOS Y DISCUSIONES.

En la siguiente sección se presentaran los resultados obtenidos en los experimentos de las simulaciones de la atmósfera de Titán, así como la interpretación.

### 7.1 ANÁLISIS CUALITATIVO DE LOS PRODUCTOS DE LAS IRRADIACIONES.

Las técnicas analíticas utilizadas para la identificación de los compuestos químicos producidos por las descargas eléctricas en la simulación de la atmósfera de Titán son: cromatografía de gases y espectrometría de masas.

La Cromatografía de gases (CG) es una potente técnica analítica con la finalidad de separar de forma individual los compuestos químicos contenidos en una mezcla compleja de gases. El método tiene la ventaja de ser sensible, rápido y sencillo, suministrando información cualitativa con cantidades muy pequeñas de muestra. Los cromatogramas son un registro de los picos cromatográficos, los cuales evidencian la separación de las especies químicas en la mezcla. Esta técnica separa los compuestos de acuerdo a su afinidad química con la columna cromatográfica, a mayor afinidad los tiempos de retención de los compuestos son más largos, caso contrario con los analitos menos afines que saldrán más rápido.

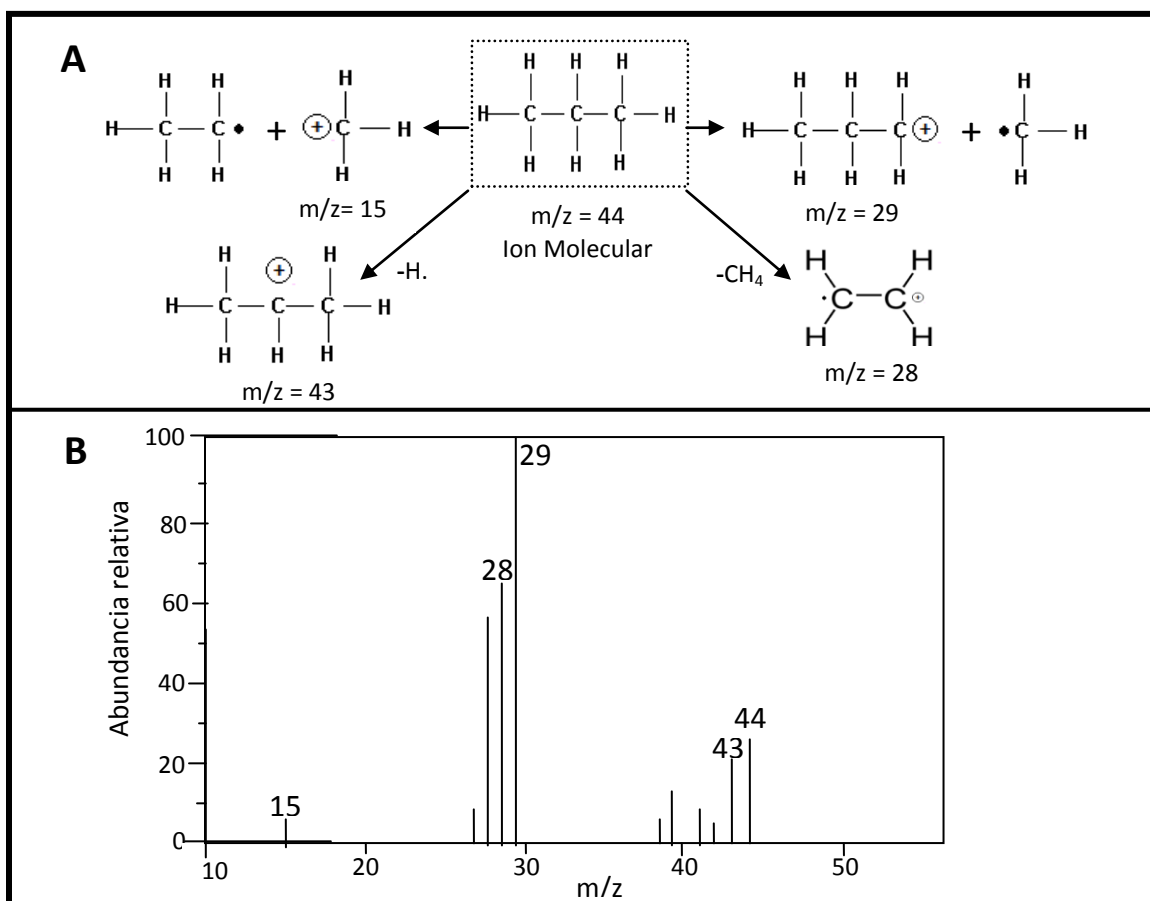
En los cromatogramas correspondientes a 30 segundos de irradiación se lograron observar 15 picos cromatográficos pero muy pequeños, conforme aumentaba el tiempo de exposición en las irradiaciones las áreas de los picos incrementaban en tamaño, asimismo aparecían nuevos compuestos químicos sintetizados en las gráficas. En la siguiente tabla 4 se resume el número de picos cromatograficos observados a los diferentes tiempos de irradiación. La identidad química de cada uno de los compuestos separados se logró determinar gracias al EM, detector acoplado al CG.

**Tabla 5.** Picos cromatograficos a los diferentes tiempos de irradiación en la simulación de la atmósfera de Titán.

Tiempo de irradiación (min)	0.5	1	2	5	10	20	30
Picos cromatograficos	15	17	17	18	18	18	17

La espectrometría de masas es una técnica basada en el análisis de los fragmentos moleculares que se producen por el bombardeo electrónico de las moléculas. En este caso, la fragmentación molecular se lleva a cabo por impacto de electrones que poseen una energía de 70 eV., energía suficiente para arrancar un electrón a una molécula dando origen a un catión, este catión recibe el nombre de ion molecular y posee el mismo peso que la molécula neutra lo que ayuda a su identificación, sin embargo, el ion molecular generalmente es inestable y difícilmente detectado.

La inestabilidad del ion molecular provoca que este se fragmente en iones más estables. El conjunto de todos estos fragmentos forman el espectro de masas, el cual suele ser único y podría considerarse como la huella digital de cada molécula. (Ver figura 20). El espectro de masas proporcionado por el equipo analítico es una gráfica que representa en el eje de las y la abundancia relativa y en el eje de las x la relación masa/carga (m/z).



**Figura 20** Patrón de fragmentación [A] y espectro de masas [B] de la molécula de propano, las señales de menor abundancia representan la contribución isotópica de los átomos de las moléculas (<sup>12</sup>C, <sup>13</sup>C, <sup>1</sup>H, <sup>2</sup>H Y <sup>3</sup>H).

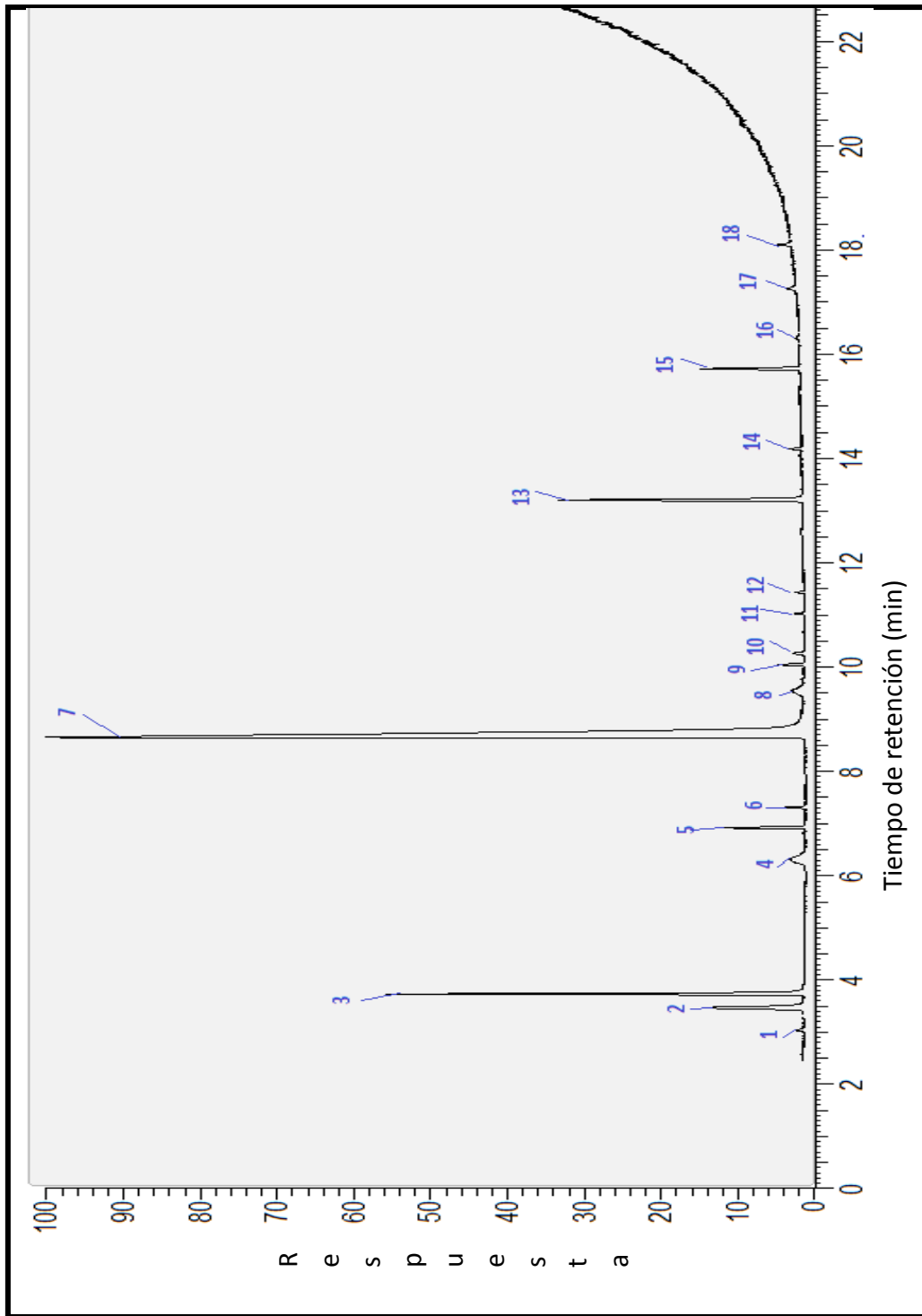
La abundancia relativa es una magnitud de la cantidad de fragmentos moleculares detectados en relación al fragmento de mayor abundancia en la detección, el pico más detectado se le asigna una abundancia de 100%, este pico es denominado pico base.

La identificación de las especies químicas se efectuó con las bases de la espectrometría de masas en conjunto con el programa Xcalibur, un software integrado en el equipo analítico cuya función facilitó la interpretación de los espectros producidos en las simulaciones, esto por medio de la comparación de los espectros de masas teóricos de la biblioteca virtual NIST/EPA/NIH/2.0 contra los espectros de masas obtenidos en los experimentos. El análisis fue detallado para cada patrón de fragmentación que podría generarse teóricamente de cada compuesto, siendo el propósito la identificación correcta otorgada por la biblioteca de Xcalibur.

Los tiempos programados para los experimentos son 0.5, 1, 2, 5, 10, 20 y 30 minutos cada uno con su respectivo triplicado, utilizando como materia prima una mezcla de gases de nitrógeno y metano en una proporción de 98:2 colocando una presión de 650 mbar de esta mezcla en el reactor para cada simulación. La fuente de poder se programó con valores de corriente de 2.5 mA y de voltaje 25 kV teniendo como resultado una potencia usada en las irradiaciones de 62.5 Watts con polaridad positiva. La temperatura alcanzada dentro del reactor con el uso de nitrógeno líquido fue de 83 K.


El análisis del cromatograma que se muestra a continuación (ver figura 21) es base para explicar los compuestos químicos que se identificaron en la fase gas. El tiempo de irradiación es de 20 minutos, se lograron identificar 18 especies químicas: 1= Eteno, 2= Etano, 3= Etino, 4= Isobutano, 5= Etanodinitrilo, 6= Ciclopropeno, 7= Acido cianhídrico, 8= 3-metilbutanodinitrilo, 9= 1-Buten 3-Ino, 10= 1,3 Butadieno, 11= 1,3-Butadiino, 12= 1,2-Butadieno, 13= Etanonitrilo, 14= 2-Propenonitrilo, 15= Propanonitrilo, 16= Benceno, 17= Isobutironitrilo, 18= Butanonitrilo.

En la tabla 5 se muestra los compuestos químicos identificados con su estructura química semidesarrollada y los tiempos de retención a los que fueron saliendo de la columna cromatográfica.





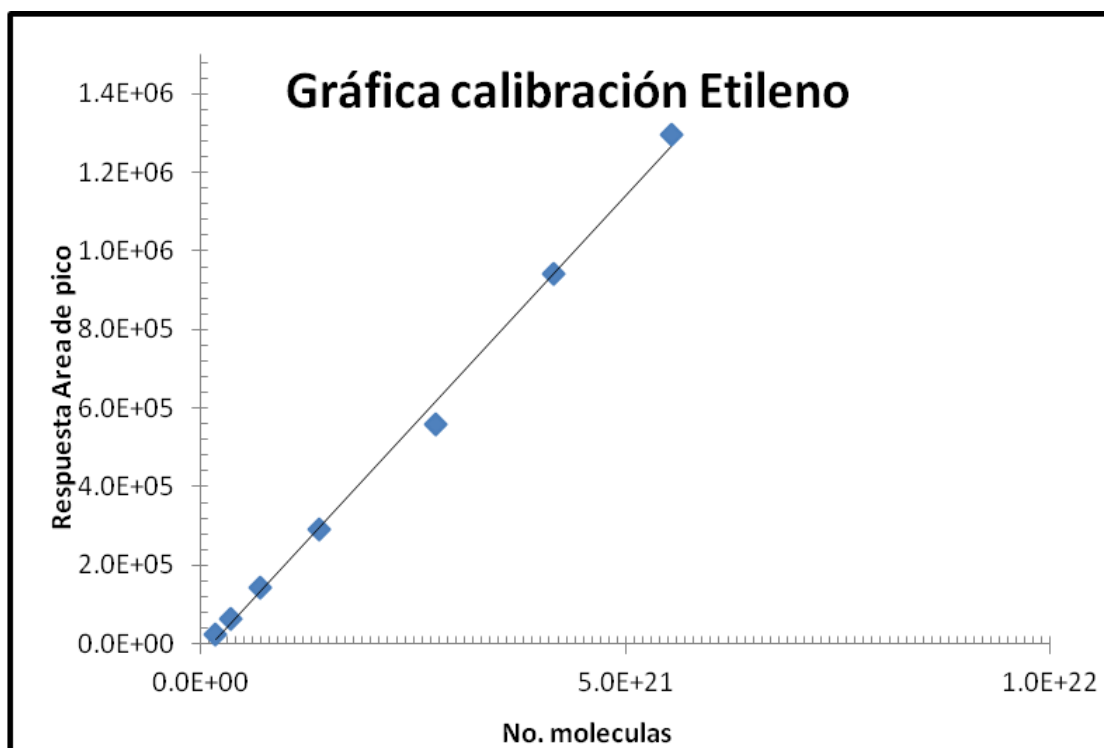
**Tabla 6.** Compuestos químicos identificados como producto de las irradiaciones a 20 minutos de 650 mbar de una mezcla de gases N<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub> (98:2) a temperatura de 83K.

Compuesto	Formula semidesarrollada	Tiempo de retención
1. Eteno	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	3.01
2. Etano	CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub>	3.44
3. Etino	CH≡CH	3.7
4. Isobutano	(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> CH	6.3
5. Etanodinitrilo	CN CN	6.88
6. Ciclopropeno		7.28
7. Ácido cianhídrico	HCN	8.6
8. 3- metilbutanonitrilo	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH (CH <sub>3</sub> ) CN	9.52
9. 1-Buten 3-Iño	CH <sub>2</sub> =CH C≡CH	10.02
10. 1,3-Butadieno	CH <sub>2</sub> =CH CH =CH <sub>2</sub>	10.24
11. 1,3-Butadiiño	CH ≡C C ≡CH	11
12. 1,2-Butadieno	CH <sub>2</sub> =C=CH CH <sub>3</sub>	11.41
13. Etanonitrilo	CH <sub>3</sub> CN	13.18
14. 2-propenonitrilo	CH <sub>2</sub> =CH CN	14.16
15. Propanonitrilo	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CN	15.69
16. Benceno	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	16.28
17. Isobutironitrilo	CH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CN	17.2
18. Butanonitrilo	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN	18.18

## 7.2 ANÁLISIS CUANTITATIVO DE LA FASE GAS

Para conocer la cantidad de producto químico formado a partir de las irradiaciones de la simulación de la atmósfera de Titán se realizó una gráfica de calibración de una mezcla de gases certificada de hidrocarburos. Eteno

La mezcla de gases certificada contiene 8 compuestos químicos en proporciones conocidas (detalles en la sección de la metodología: preparación de una gráfica de calibración). Se inyectaron diferentes presiones de gas al CG-EM, se obtuvieron los espectros de masas e identificaron los 8 compuestos químicos de la mezcla, se calculó el número de moléculas de cada compuesto equivalente a la presión inyectada, además de los cromatogramas se obtuvo el área bajo la curva de cada uno de los picos. De los compuestos de la mezcla estándar se eligió al etileno por tener la mayor similitud con los compuestos producidos en las irradiaciones. Estas similitudes son: la naturaleza química, el tipo de enlace doble y por ser una molécula pequeña.



**Figura 22.** Gráfica de calibración de etileno construida mediante el análisis de las áreas bajo la curva de las inyecciones de 800, 600, 400, 200, 100, 50 y 25 mbar de la mezcla de gases certificada, con sus respectivas desviaciones estándar.

Una vez elegida la molécula patrón se realizó la gráfica de calibración ajustando los datos para obtener por el método de mínimos cuadrados la ecuación que describe a una recta.

$$y = m x + b \dots \text{Ecuación 4}$$

Donde:

$y$  = área bajo la curva de el pico del compuesto a identificar

$m$  = pendiente de la recta de calibración

$x$  = número de moléculas del compuesto químico

$b$  = ordenada al origen de la gráfica de calibración

$$y = 2 \times 10^{-16} x - 2.9963 \times 10^{-4} \dots \text{Ecuación 5}$$

El coeficiente de correlación obtenido de la ecuación lineal es de  $R^2 = 0.9965$ , esto indica que la relación entre las dos variables, área de pico cromatográfico y número de moléculas es lineal en el intervalo de concentraciones utilizado.

### 7.3 DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS CROMATOGRÁFICOS

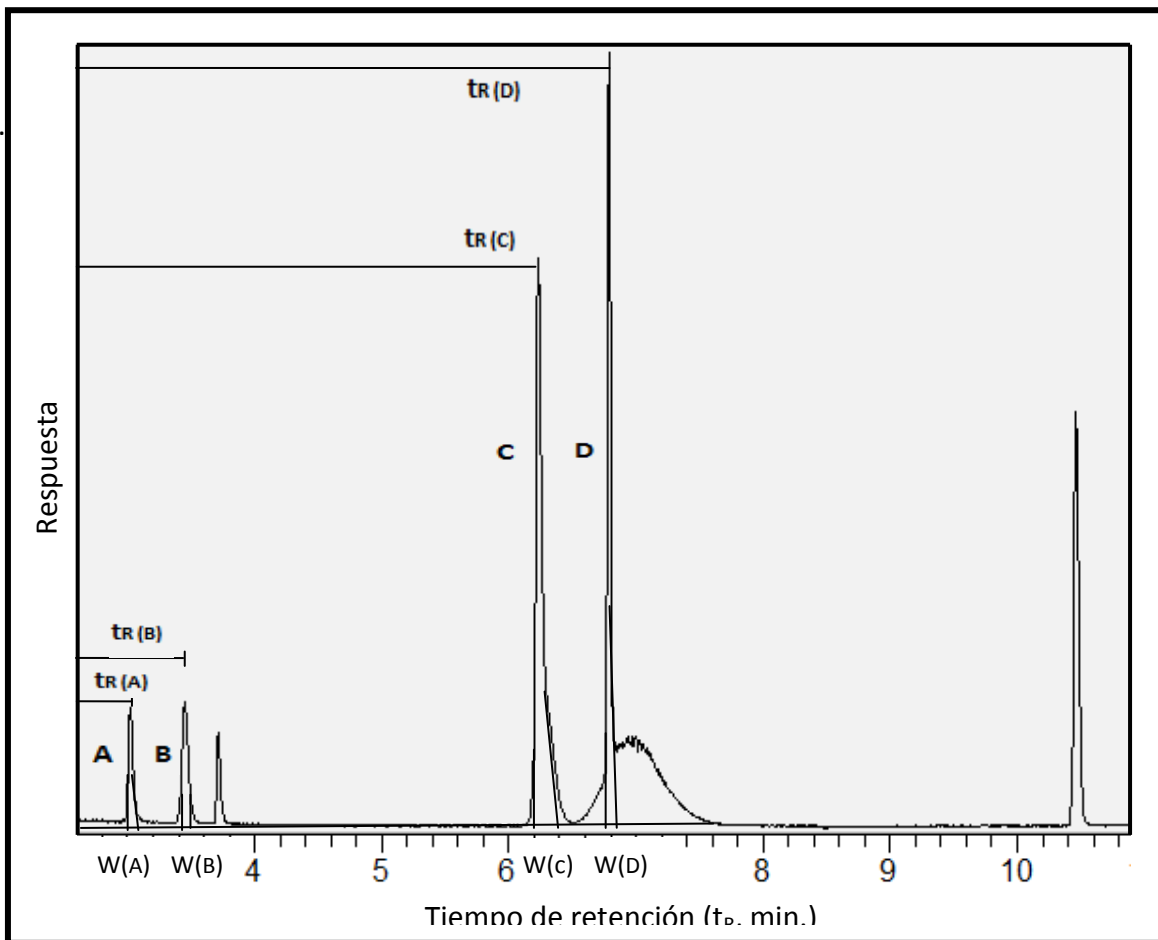
Los parámetros cromatográficos se calcularon a partir del cromatograma de una presión inyectada de 600 mbar de la mezcla de gases certificada (ver la figura 20). Los parámetros estudiados son: el número de platos teóricos ( $N$ ), la altura de los platos teóricos ( $H$ ), el factor de capacidad ( $K'$ ), el factor de selectividad ( $\alpha$ ) y la resolución de la columna ( $R_s$ ). En la tabla 6 se muestran los resultados calculados para cada uno de ellos, en el tratamiento de los datos se utilizó dos pares de picos cromatográficos de compuestos insaturados, el definido por el etileno (A) y el etano (B) (dos hidrocarburos con 2 átomos de carbono) y el definido por el propeno (C) y el propadieno (D) ( dos hidrocarburos con 3 átomos de carbono) (ver figura 23).

El número ( $N$ ) y la altura ( $H$ ) de los platos teóricos se emplean en las mediciones cuantitativas de la eficacia de la columna cromatográfica. La eficacia de la columna aumenta a medida que es mayor el número de platos y disminuye cuanto menor es la altura de platos.

El factor de capacidad es un parámetro que se utiliza para describir las velocidades de migración de los analitos en las columnas. Cuando los valores son menores a uno la elución es tan rápida que es difícil determinar con exactitud los tiempos de retención.

Cuando los valores se encuentran en unidades de 20 a 30 o mayores, la elución de los analitos es muy lenta. Lo ideal es utilizar factores de capacidad de 2 a 10 para obtener separaciones adecuadas de los analitos.

El factor de selectividad ( $\alpha$ ) es usualmente identificado con la selectividad del sistema cromatográfico, es decir la habilidad del sistema a prever diferentes tiempos de retención para dos compuestos específicos. El factor siempre debe ser mayor a 1 pero es recomendable que los valores sean menores a 2 porque esto es traducido a tiempo de espera más prolongada, es utilizado junto con el factor de capacidad para calcular la resolución de la columna.



**Figura 23.** Sección del cromatograma de la mezcla certificada de hidrocarburos. A) etileno; B) etano; C) propeno; D) propadieno.

La resolución de la columna ( $R_s$ ) es una medida que nos indica la capacidad de separar satisfactoriamente a dos sustancias de una mezcla, si la resolución es mayor o igual a 1.5 nos permite una separación prácticamente completa de las sustancias, pues el solapamiento entre los picos adyacentes es aproximadamente del 0.1%.

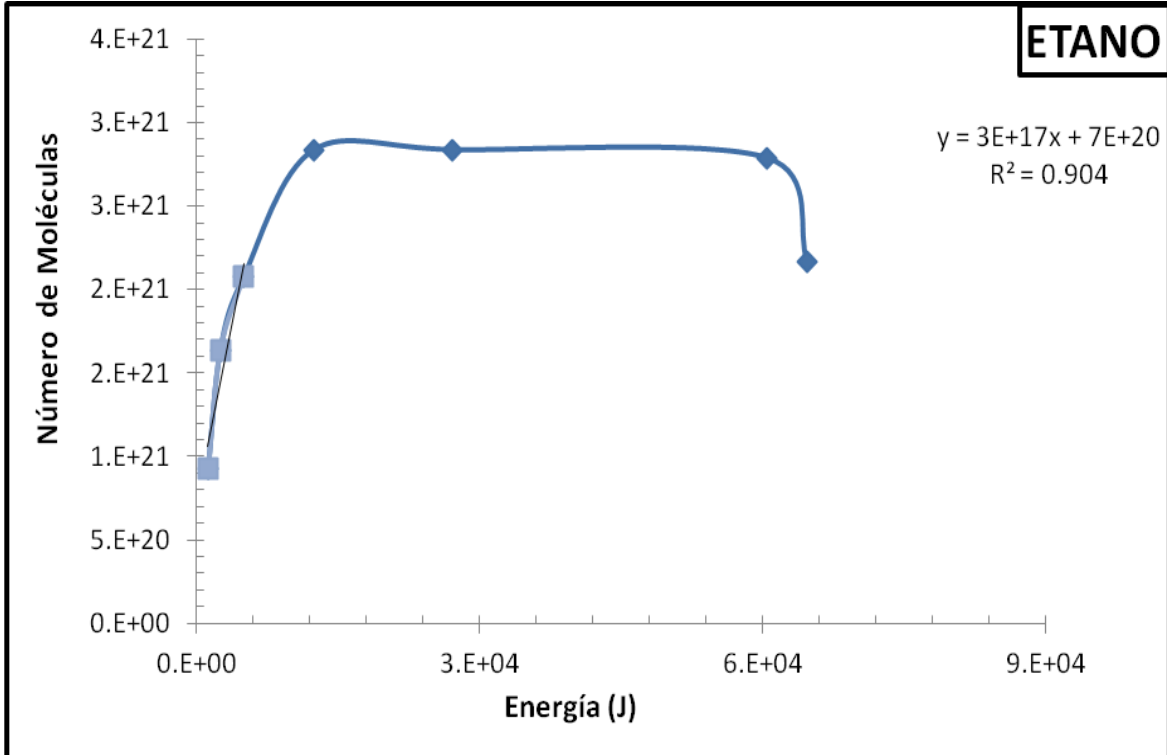
Una vez confirmado que las condiciones de la separación cromatográfica están dentro de los parámetros estándar, se prosigue al análisis cualitativo de los compuestos formados por las irradiaciones

**Tabla 7.** Parámetros cromatograficos obtenidos por la mezcla estándar.

Parámetro	Picos A-B	Picos C-D	Valor ideal
Resolución, $R_s$	3.40	4.16	>1.5
Factor de capacidad, $K'$	1.29; 1.62	3.84; 4.30	$2 < k' < 10$
Factor de selectividad, ( $\alpha$ )	1.26	1.19	Usado para det $R_s$
Número de platos teóricos, N	106 228.88 platos		>100000
Altura de platos teóricos, H	282. 4 um/plato		< 1 mm

#### **7.4 DETERMINACIÓN DE LOS RENDIMIENTOS ENERGÉTICOS PARA LOS COMPUESTOS SINTETIZADOS.**

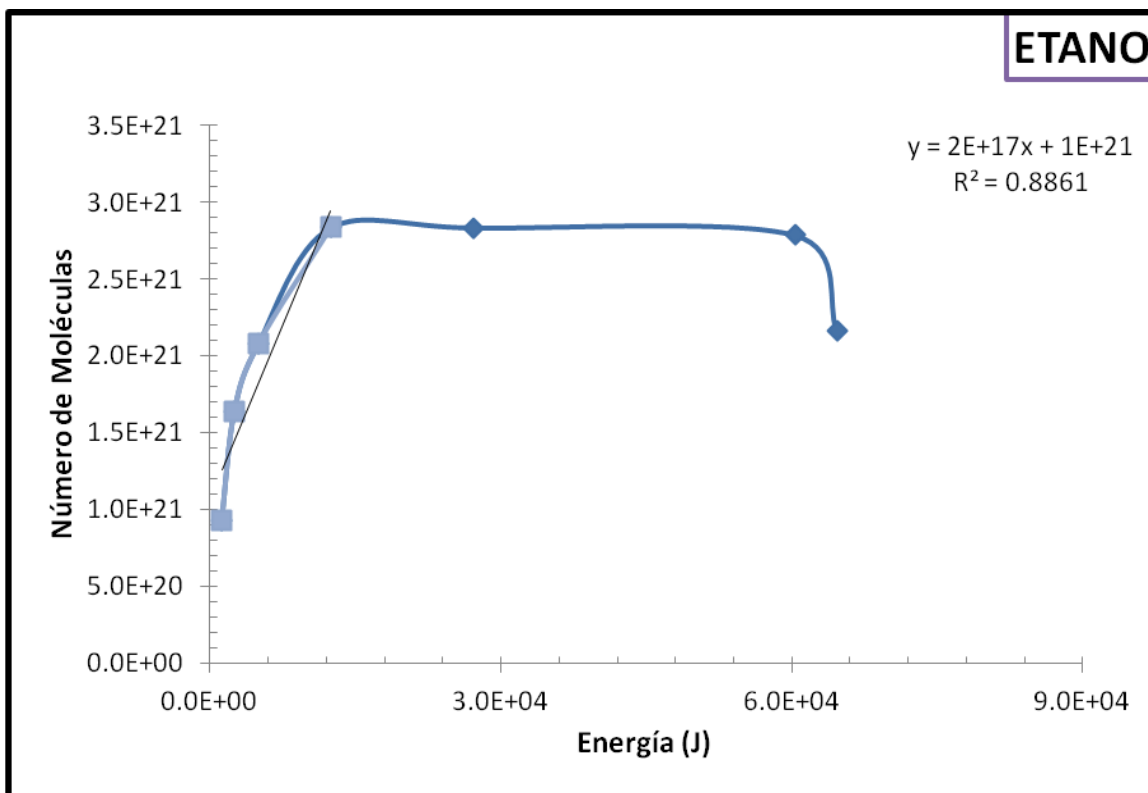
Se calcularon los rendimientos energéticos para cada uno de los productos sintetizados en fase gas en esta etapa. Cada rendimiento energético se calcula graficando el número de moléculas sintetizadas de una especie química contra la cantidad de energía depositada en las irradiaciones. El número de moléculas se determina correlacionando el área bajo la curva de cada pico cromatográfico con la ecuación de la grafica de calibración de eteno para transformarlo en número de moléculas. La energía suministrada (joule) corresponde al producto de la potencia (watts) de las irradiaciones por el intervalo de tiempo (segundos) utilizados en las descargas eléctricas. La potencia por su parte corresponde a la multiplicación de los valores de voltaje (volts) y de corriente (amperes) medidos en tiempo real.



**Figura 24.** Determinación del rendimiento energético para la molécula de etano con tres pares de puntos para la irradiación con descargas eléctricas positivas de 62.5 W a 650 mbar de  $N_2:CH_4$  (98:2) a 83 K.

El rendimiento energético de cierto compuesto es la razón de producción por unidad de energía y corresponde entonces a la pendiente del ajuste lineal realizado por el método de mínimos cuadrados de la gráfica del número de moléculas producidas en función de la energía suministrada. Para el ajuste lineal se consideraron como máximo cuatro pares de datos  $(x_i, y_i)$ . Los valores de coeficientes de correlación se trato de obtener lo más cercano a uno.

En la figura 24 y 25 se ejemplifica como se utilizaron las gráficas para determinar el rendimiento energético para el compuesto de etano. Se observa que para este compuesto el rendimiento energético es de  $3 \times 10^{17}$  moléculas/Joule con un  $R^2 = 0.904$  considerando tres pares de puntos de  $(x_i, y_i)$  y se obtuvo un valor de  $2 \times 10^{17}$  moléculas/Joule con un  $R^2 = 0.886$  al tomar cuatro pares de puntos de  $(x_i, y_i)$ . Se concluye entonces que el valor de los rendimientos energéticos tiene una mejor correlación cuando se considera los primeros tres pares de puntos  $(x_i, y_i)$ , puesto que al considerar los cuatros pares de puntos se percata que la curva tiende a presentar una pendiente menor, esto puede ser a que el compuesto etano está siendo consumido para la transformación de otras moléculas en los experimentos.



**Figura 25.** Determinación del rendimiento energético para la molécula de etano con cuatro pares de puntos para la irradiación con descargas eléctricas positivas de 62.5 W a 650 mbar de  $N_2:CH_4$  (98:2) a 83 K.

Con los resultados obtenidos de los rendimientos energéticos de cada uno de los compuestos identificados se observa que se encuentran en las mismas órdenes de magnitud aún cuando hayan sido expuestos a diferentes tiempos de irradiación. Los compuestos químicos con mayor rendimiento energético fueron el etano, 2-propenonitrilo y ácido cianhídrico. Asimismo se logró sintetizar al compuesto aromático benceno siendo de reciente descubrimiento en los análisis de la sonda Huygens. Los cromatogramas y las gráficas de los rendimientos energéticos correspondientes a las descargas eléctricas positivas de los compuestos sintetizados en todas las simulaciones se presentan en el apéndice C.

Por último se resume en la tabla 7 que se muestra a continuación todos los rendimientos energéticos calculados para las especies químicas identificadas en los experimentos del sistema cerrado. Se confirma que las moléculas formadas en las simulaciones de la atmósfera de Titán han sido reportadas durante el análisis de la misión Cassini-Huygens. De esta manera concluimos que las variables empleadas en el sistema cerrado han sido las correctas para reproducir la atmósfera baja de Titán a nivel laboratorio.

**Tabla 8.** Rendimientos energéticos por unidad de energía de los compuestos químicos caracterizados físicamente.

Compuesto	Masa molecular (uma)	Rendimiento energético por unidad de energía ( $\times 10^{16} \text{ J}^{-1}$ )
1. Eteno	30	0.286
2. Etano	28	79.88
3. Etino	26	0.759
4. Isobutano	58	8.690
5. Etanodinitrilo	52	8.591
6. Ciclopropeno	40	2.034
7. Ácido cianhídrico	27	246.0
8. 3- metilbutanonitrilo	83	3.726
9. 1-Buten 3-Ino	52	6.438
10. 1,3-Butadieno	54	4.714
11. 1,3-Butadiino	50	1.207
12. 1,2-Butadieno	54	0.508
13. Etanonitrilo	41	0.912
14. 2-propenonitrilo	53	281.3
15. Propanonitrilo	55	0.863
16. Benceno	78	8.750
17. Isobutironitrilo	69	0.671
18. Butanonitrilo	70	1.003



## **7.5 ANÁLISIS EN EL SISTEMA DE FLUJO CONTINUO**

Como se detalla en la sección de diseño y construcción del sistema de flujo continuo de la metodología, se realizó el diseño de la trampa fría y la modificación al sistema de vacío para la adecuación de un nuevo sistema, que permitiera dejar pasar una mezcla de gases de manera constante al reactor para la interacción en forma continua con las descargas eléctricas. De esta manera se implementaría un nuevo diseño experimental, utilizando las mismas variables de temperatura, polaridad, y composición de gases correspondientes al sistema cerrado. Con la intención de identificar y cuantificar la naturaleza de los compuestos químicos formados a través del sistema de flujo continuo, para su posterior análisis y comparación en la producción de las especies químicas en los dos sistemas. Desafortunadamente por diversos motivos no se logró realizar los experimentos en el sistema de flujo continuo. Sin embargo las instalaciones y el equipo para implementarlo están listos para continuar con el avance de la investigación.

## 8. CONCLUSIONES

- Se logró simular las condiciones de la atmósfera de Titán, utilizando una mezcla de gases de nitrógeno molecular y metano en una proporción 98:2 reportados para la capa de la troposfera.
- Se realizó las irradiaciones con descargas eléctricas en las simulaciones de la atmósfera de Titán con polaridad positiva, obteniendo especies químicas de la familia de hidrocarburos y nitrilos reportados en la misión Cassini-Huygens.
- Se cuantificó la potencia utilizada en los experimentos siendo el valor calculado a través de la corriente y el voltaje de las irradiaciones de 62.5 Watts.
- Se identificaron un total de 18 compuestos orgánicos, formados por carbono, hidrogeno y nitrógeno empleando el sistema cerrado. Todos en fase gas. A continuación se mencionan en el orden de menor a mayor respecto al tiempo de retención: Eteno, Etano, Etino, Isobutano, Etanodinitrilo, Ciclopropeno, Acido cianhídrico, 3- metilbutanonitrilo, 1-Buten 3-Ino, 1,3-Butadieno, 1,3-Butadiino, 1,2-Butadieno, Etanonitrilo, 2-propenonitrilo, Propanonitrilo, Benceno, Isobutironitrilo, Butanonitrilo.
- Se determinaron los rendimientos energéticos de todos los compuestos producidos en fase gas en todos los experimentos de irradiación con descargas eléctricas. Teniendo valores de rendimiento energético (en un orden de  $10^{16}$  moléculas/Joule) aquellos compuestos orgánicos que han sido directamente detectados en la atmósfera de Titán son: el etano ( $C_2H_6$ ), etino ( $C_2H_2$ ), eteno ( $C_2H_4$ ), acido cianhídrico (HCN), butadiino ( $C_4H_2$ ) y etanodinitrilo ( $C_2N_2$ ).
- Se diseñó y construyó el sistema de flujo continuo para simular la atmósfera baja de Titán, controlando las variables de temperatura, presión, composición de gases y descargas eléctricas, el objetivo planteado no se cumplió en su totalidad al no realizar los experimentos en el nuevo sistema debido a una falla en el equipo analítico impidiendo analizar las muestras de los experimentos. Como trabajo a futuro se podrá implementar el sistema de flujo continuo para identificar los compuestos químicos que generan a partir de este diseño experimental.

## 9. REFERENCIAS

Atreya S., Donahue T., Kuhn W (1978) Evolution of a nitrogen atmosphere on Titán. *Science* 201, pp. 611-613.

Atreya S., Adams E., Niemann H, Demicj-Montelara J, Owen T., Fulchignoni M., Ferri F., Wilson E (2006), Titán's methane cycle, *Planet Space Sci*, Vol. 54, pp. 1177-1187.

Coustenis A., Salama A., Lellouche., Encrenaz T., Bjoraker G., Samuelson R., de Graauw T., Feuchtgruber, H. Kessler M. (1998). Evidence for water vapour in Titán's atmosphere from ISO/SWS data. *Astronomy and Astrophysics*, Vol. 336, pp. 85-89.

Coustenis A., Achterberg R., Conrath B., Jennings D., Marten A., Gautier D., Nixon C., Flasar F., Teanby N., Bézard B., Samuelson R., Carlson R., Lellouch E., Bjoraker G., Romani P., Taylor F., Irwin P., Fouchet T., Orton G., Kunde V., Vinatier S., Mondellini J., Abbas M, Courtin R. (2007). The composition of Titán's stratosphere from Cassini/CIRS, mid-infrared spectra. *Icarus*, Vol. 189, pp. 35-62.

Countenis A., Jennings D. E., Nixon C. A., Achterberg R. K., Lavvas P., Vinatier S., Teanby N. A., Bjoraker G. L., Carlson R. C., Piani L., Bampasidis G., Flasar F. M. and Romani P.N. (2010). Titán traces gaseous composition from CIRS at the end of the Cassini-Huygens prime mission. *Icarus*, Vol. 207, pp. 461-476.

Danielson R. E., Cadwell J. J., Larach D. R. (1973) An inversion in the atmosphere of Titán. *Icarus* 20, pp. 437-443.

Encrenaz Th. (2002). ISO observations of planetary atmospheres. *Advanced in Space Research*, Vol. 30, No. 9, pp. 1967-1970.

Ferris J., Tran B., Joseph J., Vuitton V., Briggs R., Force M. (2005). The role of photochemistry in Titán's atmospheric chemistry. *Advanced in Space Research*, Vol. 36, pp. 251-257.

Flasar F., Achterberg R., Conrath., Gierasch P., Kunde V., Nixon C., Bjoraker G., Jennings D., Romani P., Simon-Miller A., Bezard B., Countenis A., Irwin P., Teanby N., Brasunas J., Pearl J., Segura M., Carlson R., Mamoutkine A., Schinder P., Barucci A., Courtin R., Fouchet T., Gautier D., Lellouch E., Marten A., Prangé R., Vinatier S., Strobel D., Calcutt S., Read P., Taylor F., Bowles N., Samuelson R., Orton G., Spilker L., Owen T., Spencer J., Showalter M., Ferrari C., Abbas M., Raulin F., Edgington S., Ade and Wishnow E. (2005) Titán's atmospheric temperatures and composition. *Science*, Vol. 308, pp. 975-978.

Fulchignoni M., Ferri F., Angrilli F., Ball A. J., Bar-Nun A., Barucci M. A., Bettanini C., Bianchini G., Borucki W., Colombatti G., Coradini M., Coustenis A., Debei S., Falkner P., Fanti G., Flamini E., Gaborit V., Grard R., Hamelin M., Harri A. M., Hathi B., Jernej I., Leese M. R., Lehto A., Lion Stoppato P. F., Lopez-Moreno J. J., Mäkinen T., McDonnell J. A. M., McKay C. P., Molina-Cuberos G., Neubauer F. M., Pirronello M., Rodrigo R., Saggin B., Schwingenschuh K., Seiff A., Simoes F., Svedhem H., Tokano T., Towner M. C., Trautner R., Withers P. and Zarnecki J. C. (2005). In situ measurements of the physical characteristics of Titán's environment. *Nature*, Vol. 438, pp. 785-790.

Griffith C., Zahnle K (1995) Influx of cometary volatiles to planetary moons; atmosphere of 1000 possible Titán's. *Geophys Research*, Vol. 100, pp. 16907-16922.

Gurwell M., Muhleman D. (2000). CO on Titán: More evidence for a well-mixed vertical profile. *Icarus*, Vol. 145, pp. 653-656.

Hanel R., Conrath B., Flasar F. M., Kunde V., Maguire W., Pearl J., Samuelson R., Herath L., Allison M., Cruikshank D., Gautier D., Gierasch P., Horn L., Koppany R. and Ponnamperna C. (1981) Infrared Observations of the Saturnian System from Voyager 1. *Science* 212, pp. 192-200.

Hamelin M., Aydogar Ö., Bianchini G., Brown V., Falkner P., Fulchignoni M., Jernej I., Jeronimo J. M., Grard R., López-Moreno J. J., Molina-Cuberos G., Rodrigo R., Schwingenschuh K. and Svedhem H., (2000). Surface and Sub-surface electrical measurement of Titan with the PWA-HASI experiment Huygens. *Advanced in Space Research*, Vol.26, No. 10, pp. 1697-1704.

Harland David M. (2007). Cassini at Saturn Huygens results. Editorial Springer, pp. 173- 203

Hartle R. E. (1985). Interaction of Titan's atmosphere with Saturn's magnetosphere. *Advanced in Space Research*, Vol. 5, No. 5, pp. 321-332.

Hörst, S. M., Vuitton, and R. V. Yelle (2008), Origin of oxygen species in Titan's atmosphere, *J. Geophys. Res.*, Vol. 113, pp. 1-14.

Hoehler Tori M., Amend Jan P. and Shock Everett L. (2007). A "Follow the Energy" Approach for Astrobiology. *ASTROBIOLOGY*, Vol. 7, No. 6, pp.820- 825.

Hunten D. M., (1978) A Titán atmosphere and surface temperature of 200 K. In JPL (ed.) *The Saturn System*, University of Arizona Press Tucson. pp. 127-140

Kok R., Irwin P. G. J., Teanby N. A., Lellouch E., Bezaud B., Vinatier S., Nixon C. A., Fletcher L., Howett C., Calcutt S. B., Bowles N. E., Flasar F. M., Taylor F. W. (2007). Oxygen compounds in Titan's stratosphere as observed by Cassini CIRS. *Icarus*, Vol. 186, pp. 354-363.

Kostiuk T., Hewagama T., Fast K. E., Livengood T. A., Annen J., Buhl D., Sonnabend G., Shumölling F., Delgado J. D., Achterberg R. (2010). High spectral resolution infrared studies of Titan: Winds, temperature and composition. *Planetary and Space Science*, Vol. 58, pp. 1715-1723.

Kuiper G. P. (1944). Titán a satellite with an atmosphere. *Astrophys Journal* 100, pp. 378-383.

Lebonnois Sébastien (2005). Benzene and aerosol production in Titan and Jupiter's atmosphere: a sensitivity study. *Planetary and Space Science*, Vol. 53, pp. 486-497.

Ledvina S. A., Luhmann J. G., Brecht S. H. and Cravens T. E. (2004). Titan's induced magnetosphere. *Advanced in Space Research*, Vol. 33, pp. 2092-2102.

Lellouch E., Coustenis A., Sebag B., Cuby J-G., López-Valverde M., Schmitt B., Fouchet T., Crovisier J. (2008). Titán's 5  $\mu\text{m}$  window: Observations with the Very Large Telescope. *Icarus*, Vol. 162, pp. 125-142.

López-Valverde, Lellouch E., Coustenis A. (2005). Carbon monoxide fluorescence from Titán's atmosphere. *Icarus*, Vol.175, pp. 503-521.

Lutz B., Bergh C., Owen T. (1983). Titán: Discovery of Carbon Monoxide in its atmosphere. *Science*, 220, pp. 1374-1375.

Miller SL (1953) A production of amino acids under possible primitive Earth conditions. *Science*, Vol. 117, pp.528-529.

Morente J. A., Portí J. A., Salinas A., Navarro E. A. (2008). Evidence of electrical activity on Titan drawn from the Schumann resonances sent by Huygens probe, *Icarus*, Vol. 195, pp. 802-811.

Muhleman D. O., Berge G. L. and Clancy R. T. (1984). Microwave measurements of carbon monoxide on Titan. *Science*, Vol. 223, pp. 393-396.

Navarro-Gonzalez R., Ramirez S. I., De la Rosa J. G., Coll P. and Raullin F. (2001). Production of hydrocarbons and nitriles by electrical processes in Titan's atmosphere. *Adv. Space Res.* Vol. 27, No. 2, pp. 271-282.

Navarro-Gonzalez Rafael (2005). Búsqueda de vida en Marte. *Revista especializada en ciencias químicas y biológicas*. Vol 8. No. 2. pp. 103-111.

Niemann H. B., Atreya S. K., Bauer S. J., Carignan G. R., Demick J. E., Frost R. L., Gautier D., Haberman J. A., Harpold D. N., Hunten D. M., Israel G., Lunine J. I., Kasprzak W. T., Owen T. C. (2005). The abundances of constituents of Titan's atmosphere from the GCMS instrument on the Huygens probe. *Nature*, Vol. 438, pp. 779-783.

- Owen T, Bar-Nun A (1995) Comets, impacts and atmospheres. *Icarus* Vol.116, pp. 215–226.
- Owen Tobias C. (2000). On the origin of Titan's atmosphere. *Planetary and Space Science*, Vol. 48, pp. 747-752.
- Ramirez S. I., Navarro-Gonzalez R., Coll P and Raullin F. (2001). Possible contribution of different energy sources to the production of organics in Titan's atmosphere, *Advanced in Space Research*, Vol. 27, No. 2, pp. 261-270.
- Raullin F, Nguyen M.J. and Coll P. (2007) Titan: an astrobiological laboratory in the solar system. *Instruments, Methods, and Missions for Astrobiology X*, Editors, SPIE Publisher, Washington USA.
- Raullin F (2008b) Astrobiology and habitability of Titan. *Space Sci Rev* 135(1–4):37–48
- Segura Peralta Antígona (2008). Un laboratorio de otro mundo. *Revista de divulgación ¿Cómo ves?*. Vol. 134, pp.8-15.
- Sotin C., Jaumann R., Buratti B. J., Brown R. H., Clark R. N., Soderblom L. A., Baines K. H., Bellucci G., Bibring J. P., Capaccioni F., Cerroni P., Combes M., Coradini A., Cruikshank D.P., Drossart P., Formisano V., Langevin Y., Matson D. L., McCord T. B., Nelson R. M., Nicholson P. D., Sicardy B., LeMouelic S., Rodriguez S., Stephan K. and Scholz C. K. (2005). Release of volatiles from a possible cryovolcano from near-infrared imaging of Titan. *Nature*, Vol. 435, pp 1- 4.
- Stone E. C., and Miner E. D. (1981) Voyager 1 encounter with the saturniana system. *Science* 212, pp. 159-162.
- Taylor F. W. and Coustenis A. (1998). Titan in the Solar System. *Planetary and Space Science*, Vol. 46, No. 9/10, pp. 1085-1097.
- Teanby N., Irwin P., de Kok R., Nixon C., Coustenis A., Bézard B., Calcutt S., Bowles S., Flasar N., Fletcher F., Howett L., Taylor C. (2006). Latitudinal variations of HCN, HC3N and C2H2 in Titán's stratosphere derived from Cassini CIRS data. *Icarus*, Vol. 181, pp. 243-255.
- Tomasko M., A., Bezaud B., Coustenis A., Irwin P., Teanby N., Brasunas J., Pearl J., Segura M., Carlson R., Mamoutkine A., Schinder P., Barucci A., Courtin R., Fouchet T., Gautier D., Lellouch E., Marten A., Prangé R., Vinatier S., Strobel D., Calcutt S., Read P., Taylor F., Bowles N., Samuelson R., Orton G., Spilker L., Owen T., Spencer J., Showalter M., Ferrari C., Abbas M., Raulin F., Edgington S., Ade and Wishnow E. (2005), Rain, Winds and haze during the Huygens probe's descent to Titan's surface. *Nature*, Vol. 438, pp. 765-778.
- Trafton L. (1972 a) On the possible detection of the in Titán's atmosphere. *Astrophys Journal* 175, pp. 298-306.

Wilson E. H., Atreya S. K. (2004). Chemical sources of haze formation in Titán's atmosphere, *Planetary and Space Science*, Vol. 51, pp. 1017-1033.

Witasse O., Lebreton J. D., Bird M., Dutta- Roy R. et al (2006). Overview of the coordinated ground-based observations of Titan during the Huygens mission. *Journal Geophys Research Planets* 111, pp. 12-24.

Wong A., Morgan C., Yung Y., Owen T. (2002). Evolution of CO on Titán. *Icarus*, Vol. 155, pp. 382-392

## **10. ANEXOS**

## ANEXO A. Ecuaciones de los parámetros cromatograficos

### A1. Número de platos teórico

$$N = 16 \left( \frac{t'_R}{W_x} \right)^2 \dots\dots\dots\text{Ecuación 6}$$

### A2. Altura de los platos

$$H = \frac{L}{N} \dots\dots\dots\text{Ecuación 7}$$

### A3. Resolución

$$R_s = \frac{2 \cdot [(t_R)_B - (t_R)_A]}{W_A + W_B} \dots\dots\dots\text{Ecuación 8}$$

### A4. Factor de selectividad

$$\alpha = \frac{(t_R)_B - (t_M)}{(t_R)_A - (t_M)} \dots\dots\dots\text{Ecuación 9}$$

### A5. Factor de capacidad

$$K' = \frac{t_R - t_M}{t_M} \dots\dots\dots\text{Ecuación 10}$$

Donde:

$t_R$  = Tiempo de retención de cierta especie.

$W_x$  = Anchura de pico de una especie química.

$L$  = Longitud de relleno de la columna.

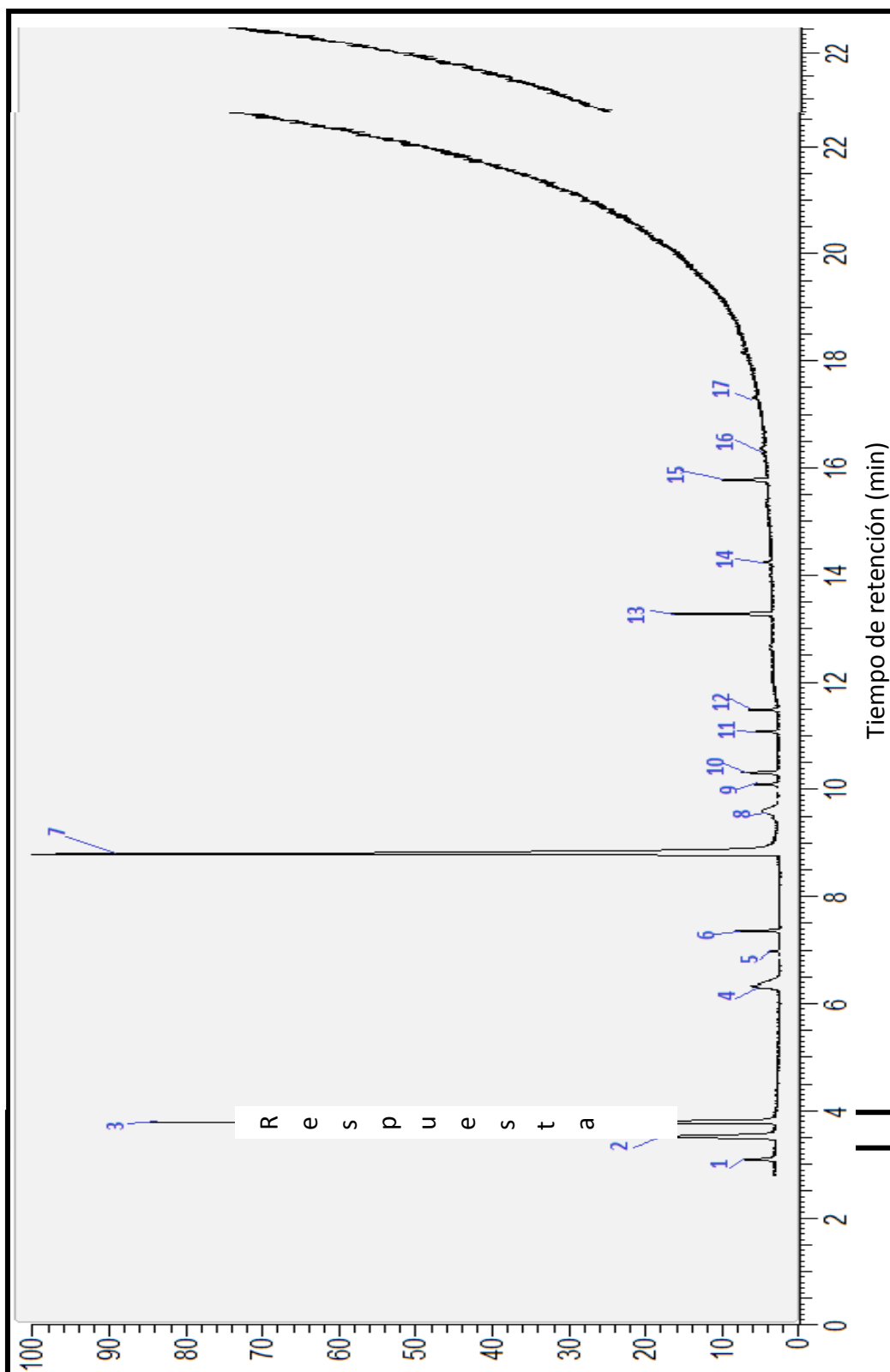
$t_M$  = Tiempo de migración de una especie no retenida en la columna. En este caso se utilizó el tiempo de migración del nitrógeno.

## ANEXO B. Cromatogramas de los compuestos producidos en fase gas

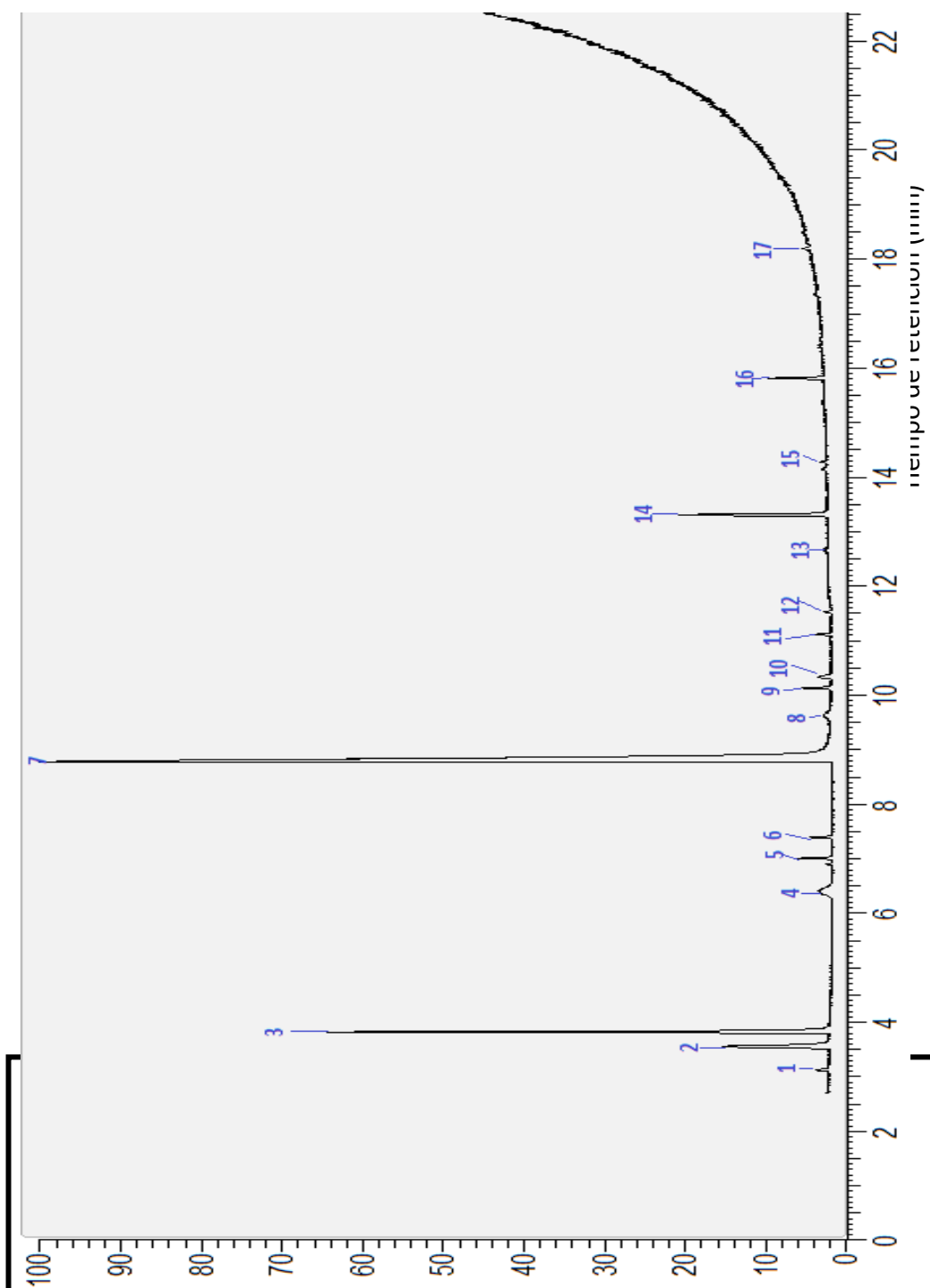


Para facilitar la apreciación de la formación y desaparición de los compuestos químicos sintetizados en la fase gas se presentan los cromatogramas obtenidos del análisis con las técnicas analíticas.

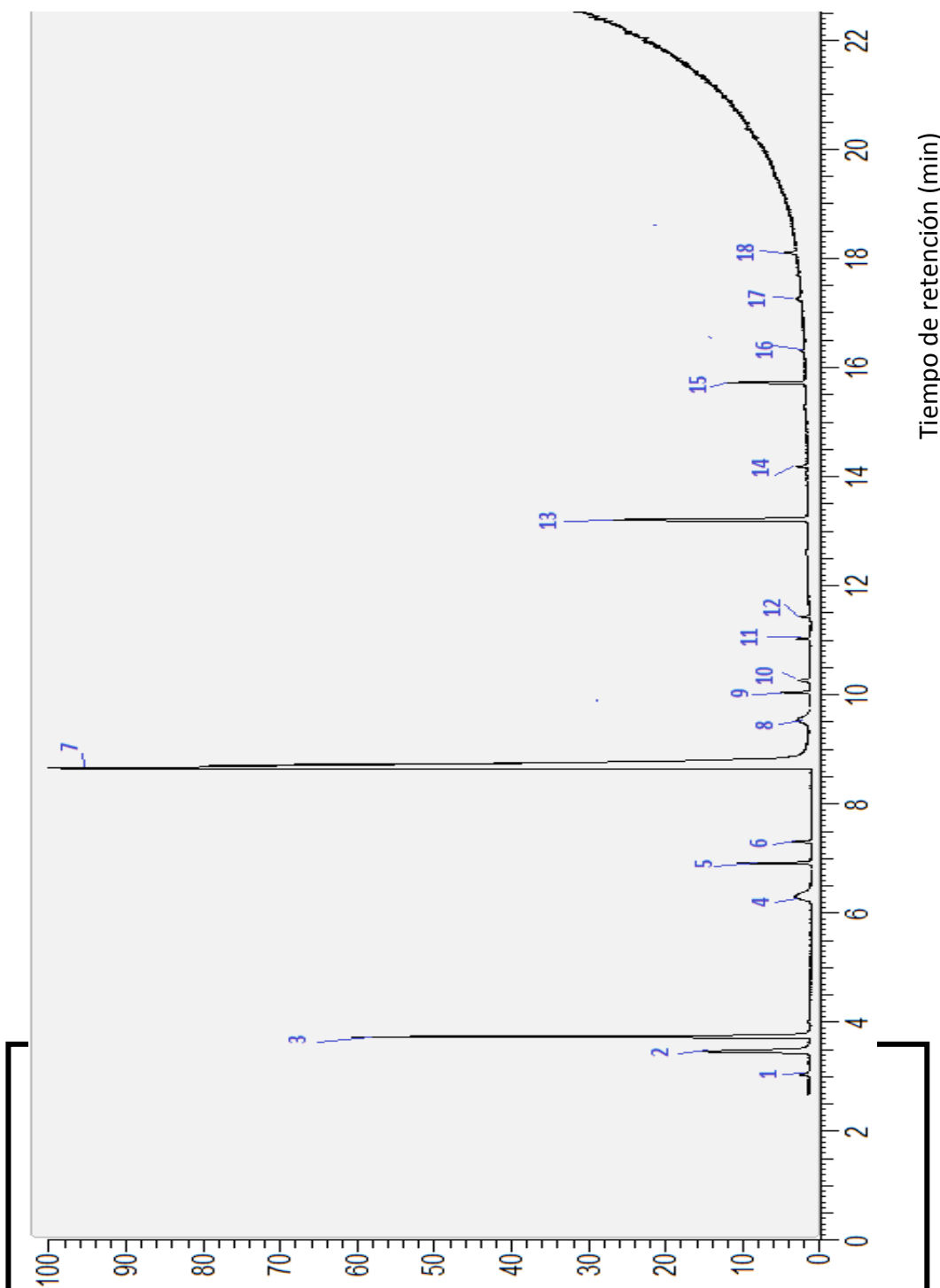
Los cromatogramas que se muestran a continuación corresponden a la mezcla con 650 mbar de presión de una mezcla de  $N_2:CH_4$  (98:2). De esta manera se observan los 18 compuestos químicos que se generan y como se mencionan en la tabla 7 de discusiones y resultados cada uno de ellos.



B1. Cromatogramas [ 62.5 W /  $N_2:CH_4$  / 98.2 / [+] / 83K / 0.5min

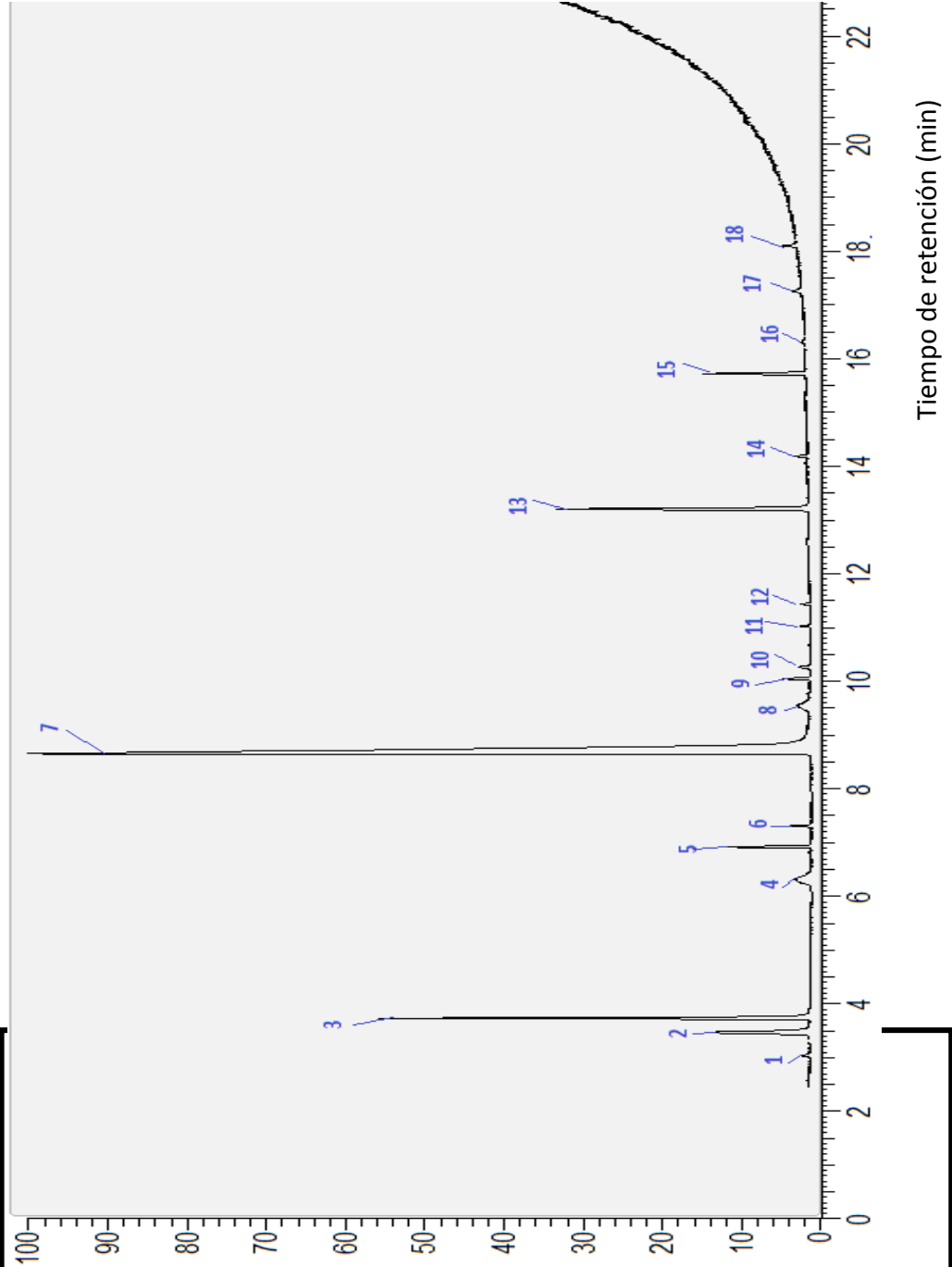


B2. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2 / [+ ] / 83K / 1min

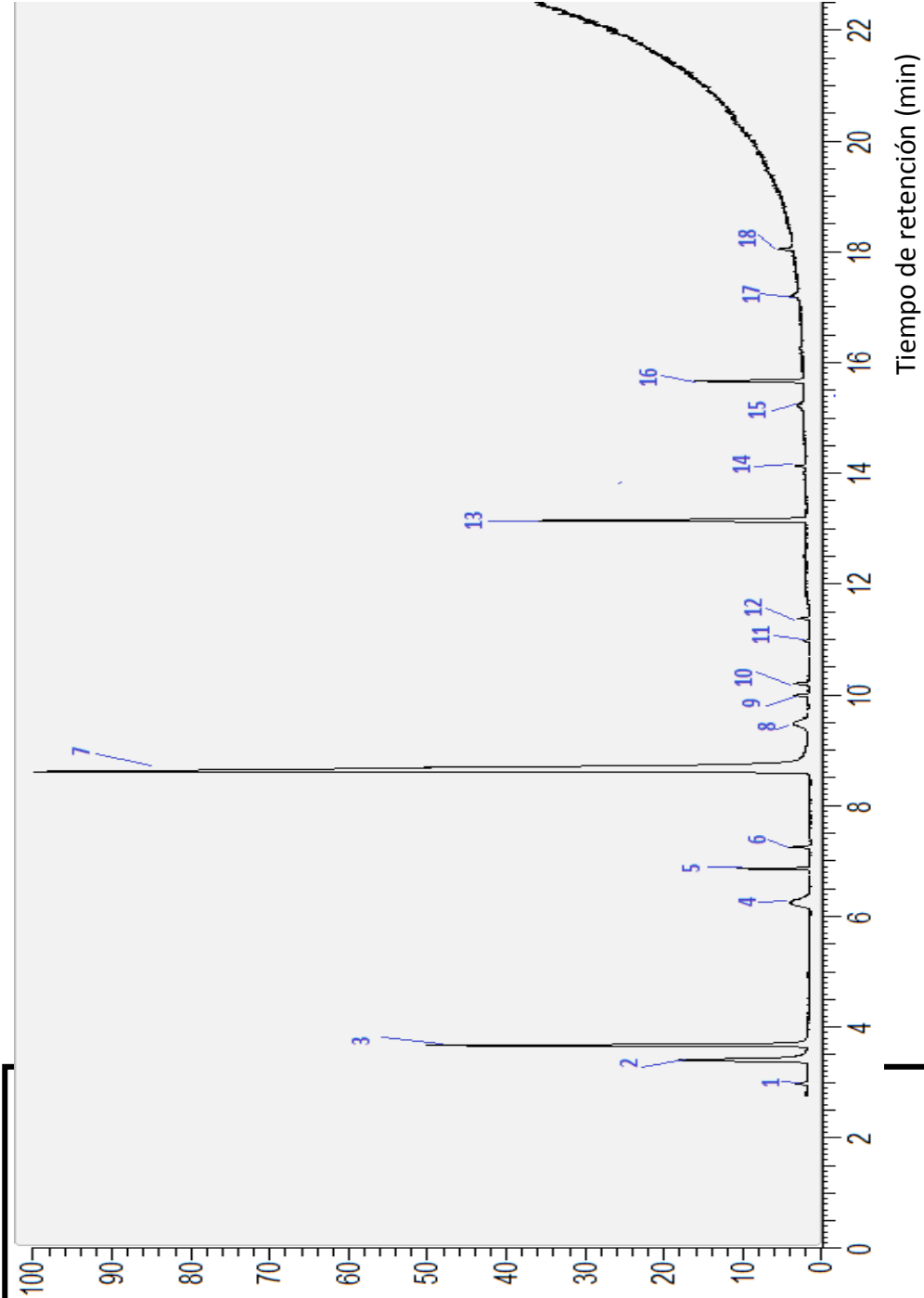


Tiempo de retención (min)

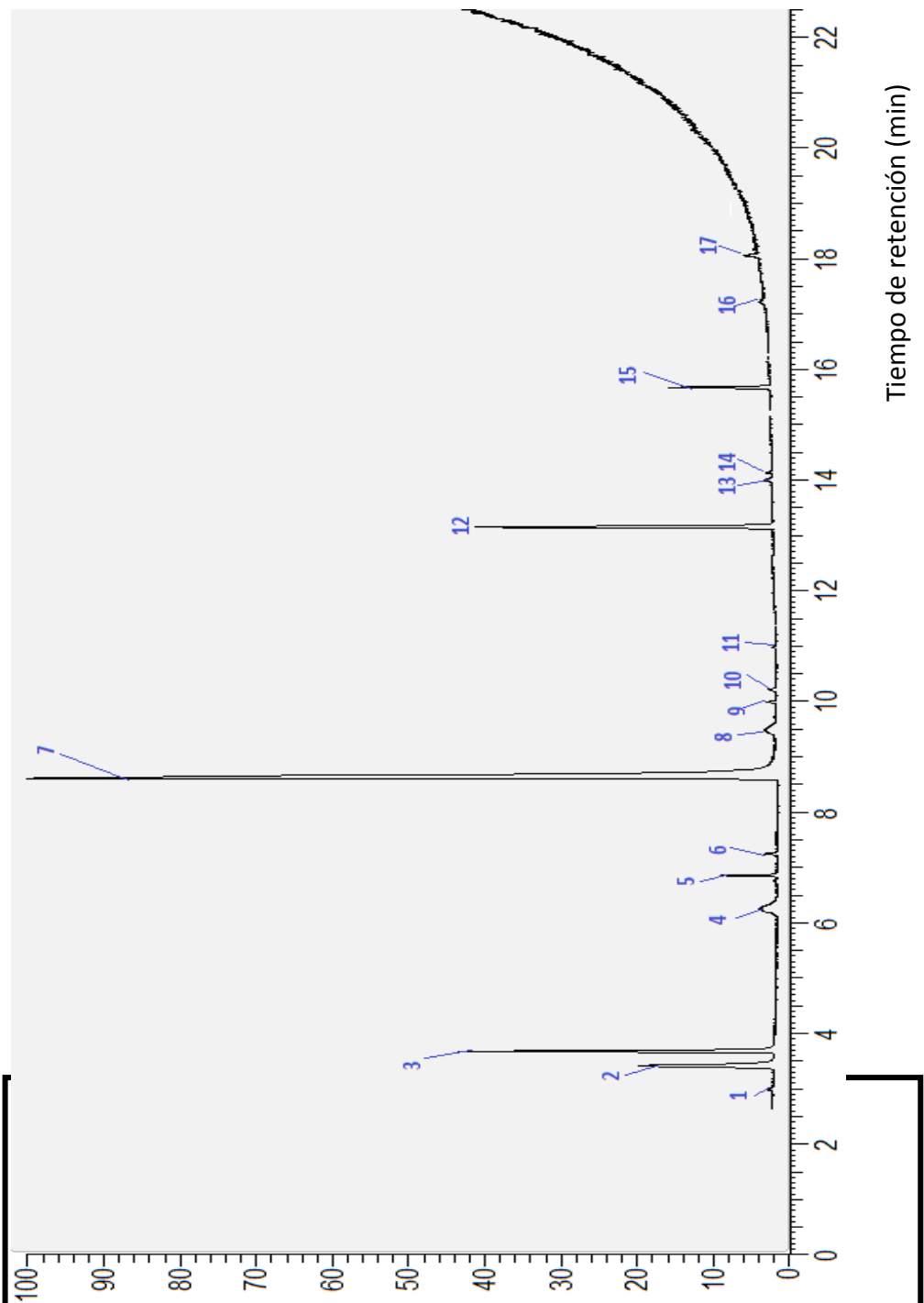
B3. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> / 98.2 / [+ ] / 83K / 2 min



B4. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> / 98:2 / [+] / 83K / 5 min



B5. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> / 98:2 / [+] / 83K / 10 min



B6. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> / 98.2 / [+ ] / 83K / 20 min

R E S P U E S T A

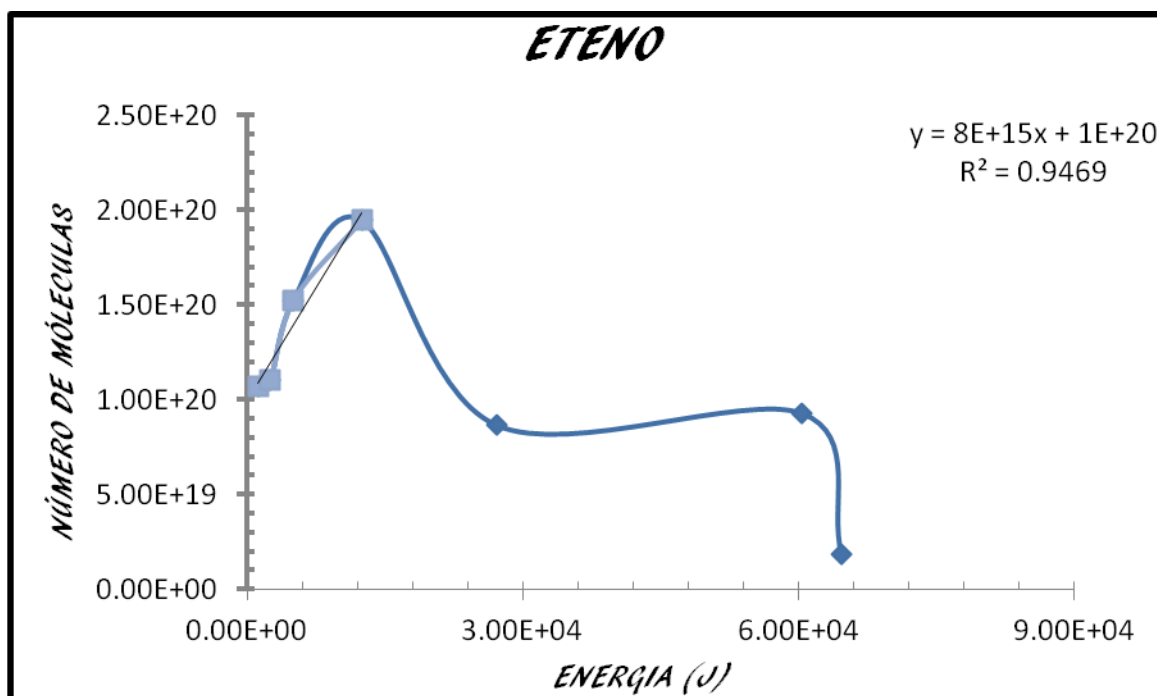
**ANEXO C. Gráficas de rendimientos energéticos de los compuestos identificados en la fase gas.**

Tiempo de retención (min)

**B7. Cromatogramas [ 62.5 W / N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub> / 98:2 / [+ ] / 83K / 30 min**

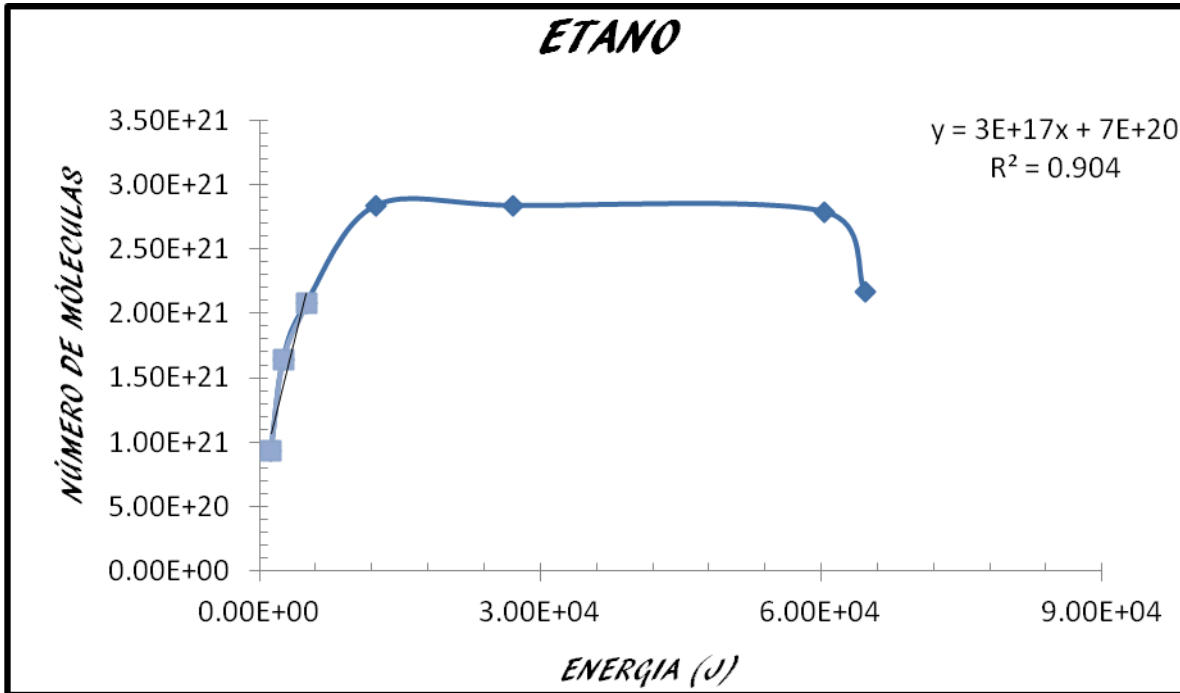
A continuación se presentan los diversos rendimientos energéticos obtenidos de los compuestos sintetizados en la atmósfera simulada de Titán.

Todas las gráficas están en función del número de moléculas contra energía suministradas en las descargas eléctricas. Los datos de la ecuación lineal se presentan a lado derecho así como el coeficiente de correlación de cada especie química. La mayoría de los compuestos químicos identificados se tomaron 3 pares de puntos para obtener la ecuación lineal.

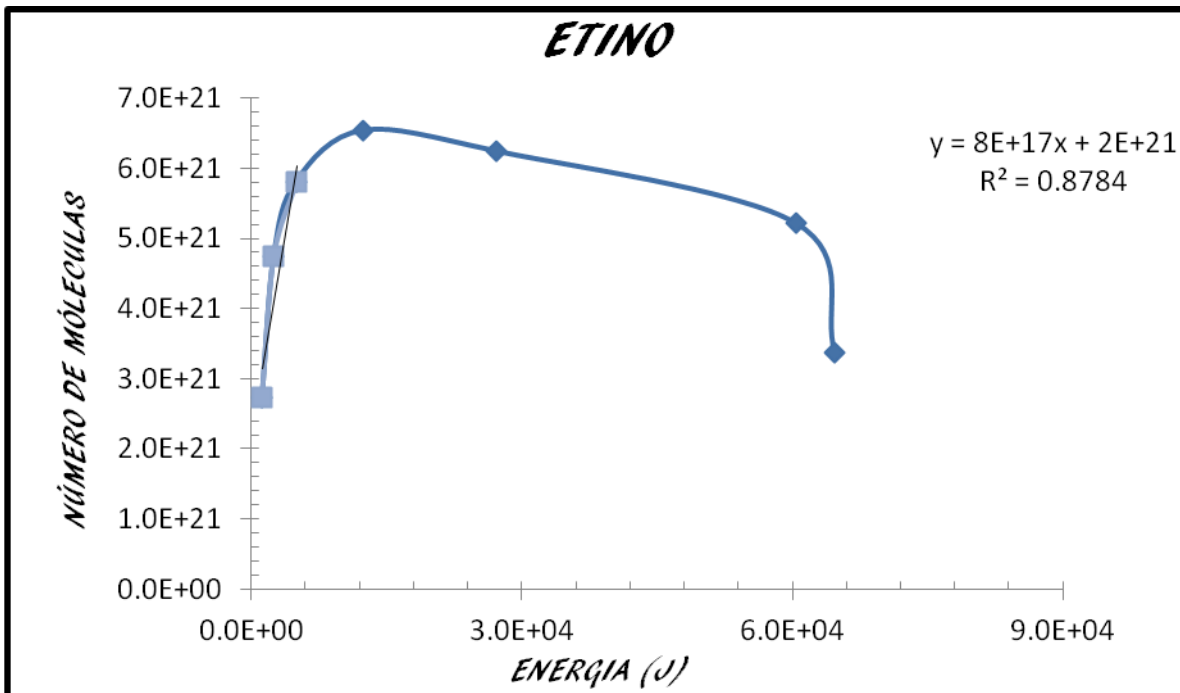


C1. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [+]/ 83 K] Eteno.

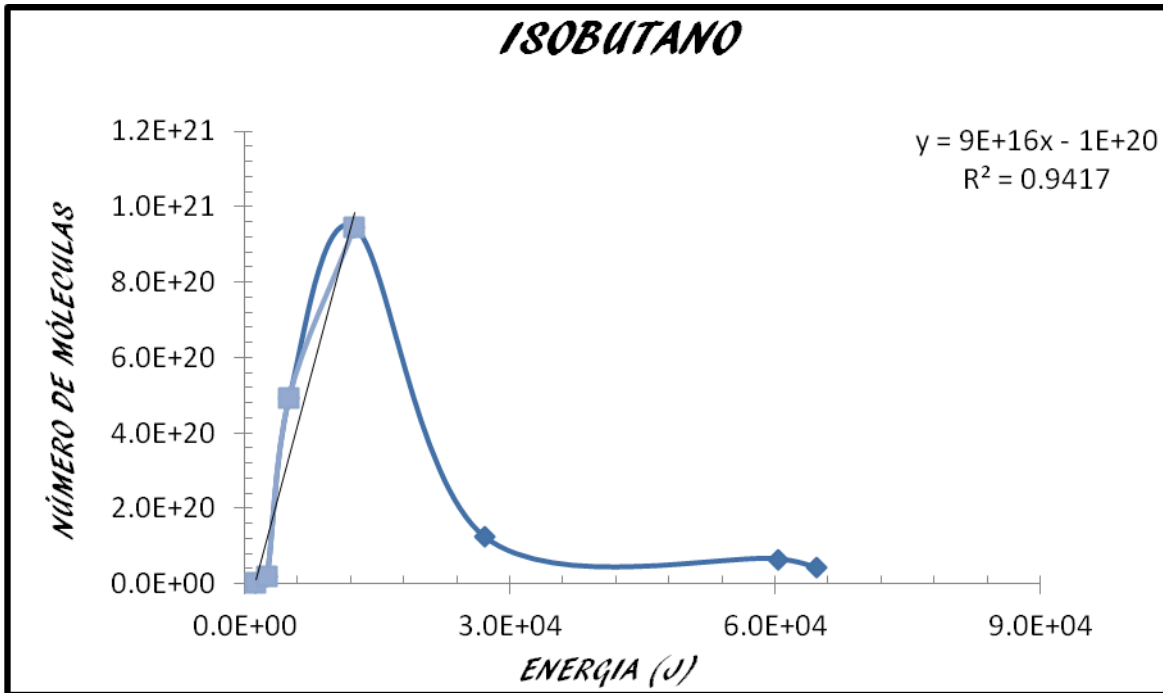




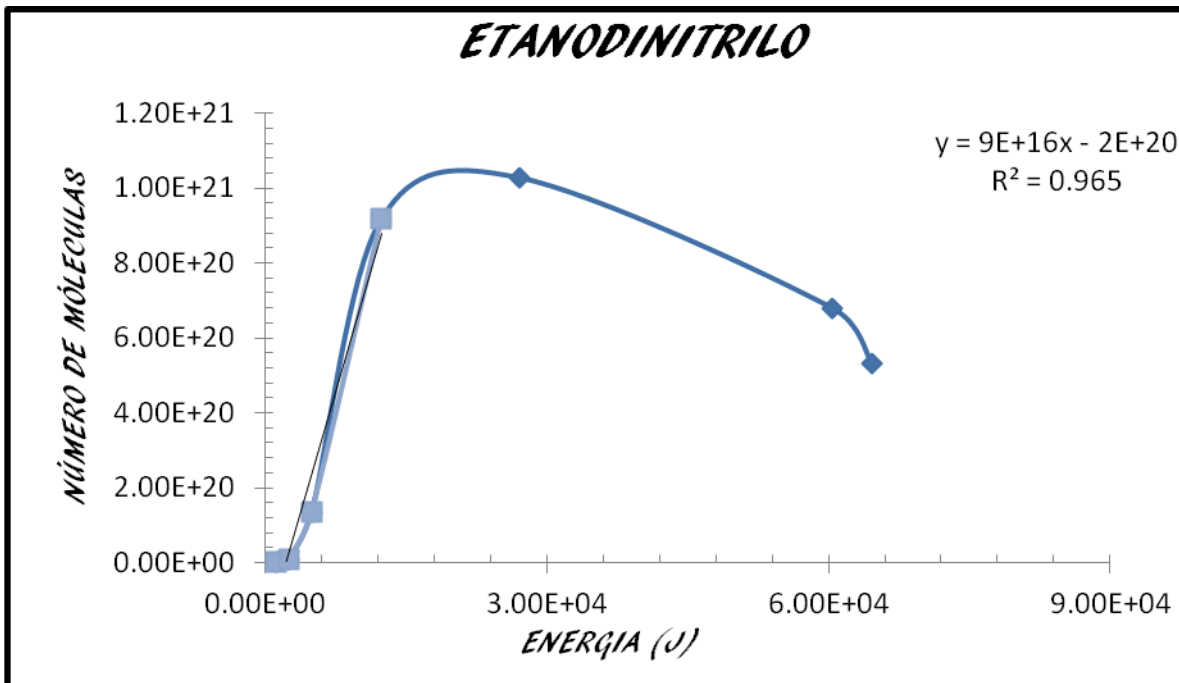
C2. . Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] Etano



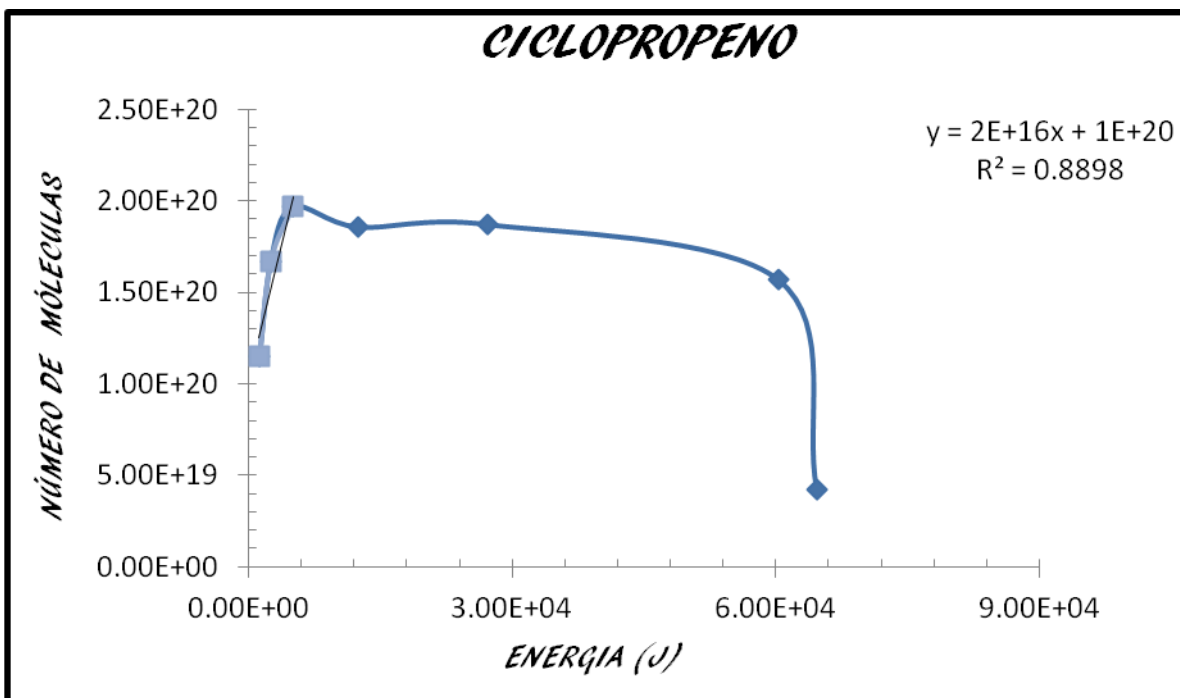
C3. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] Etino



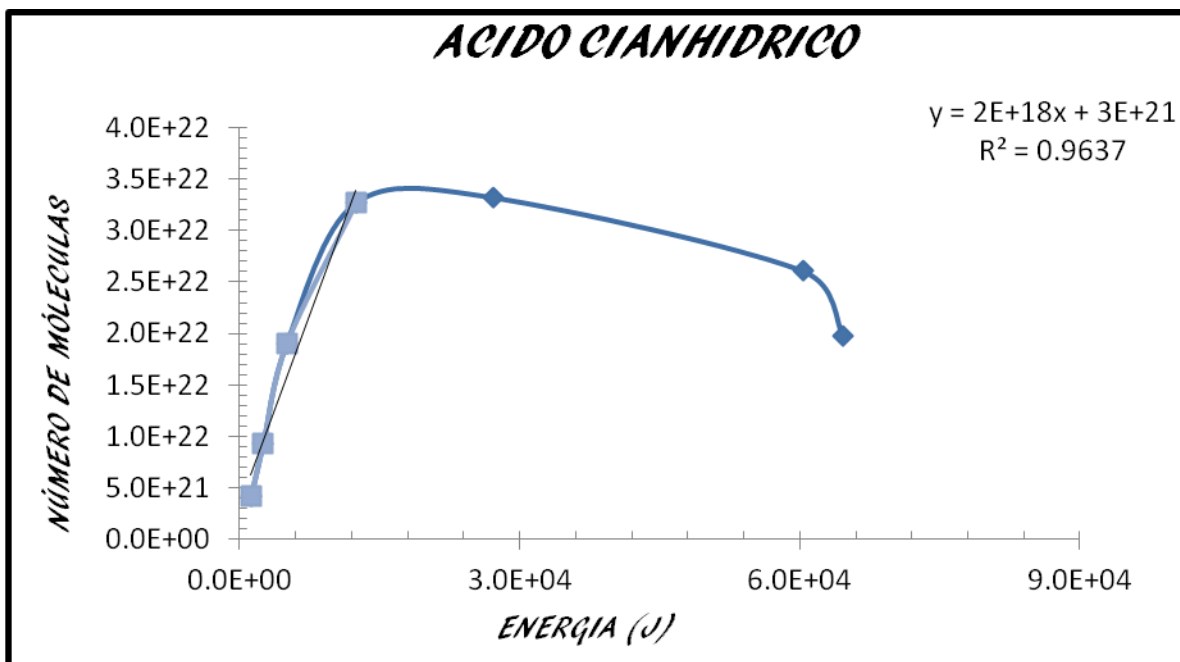
C4. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] Isobutano.



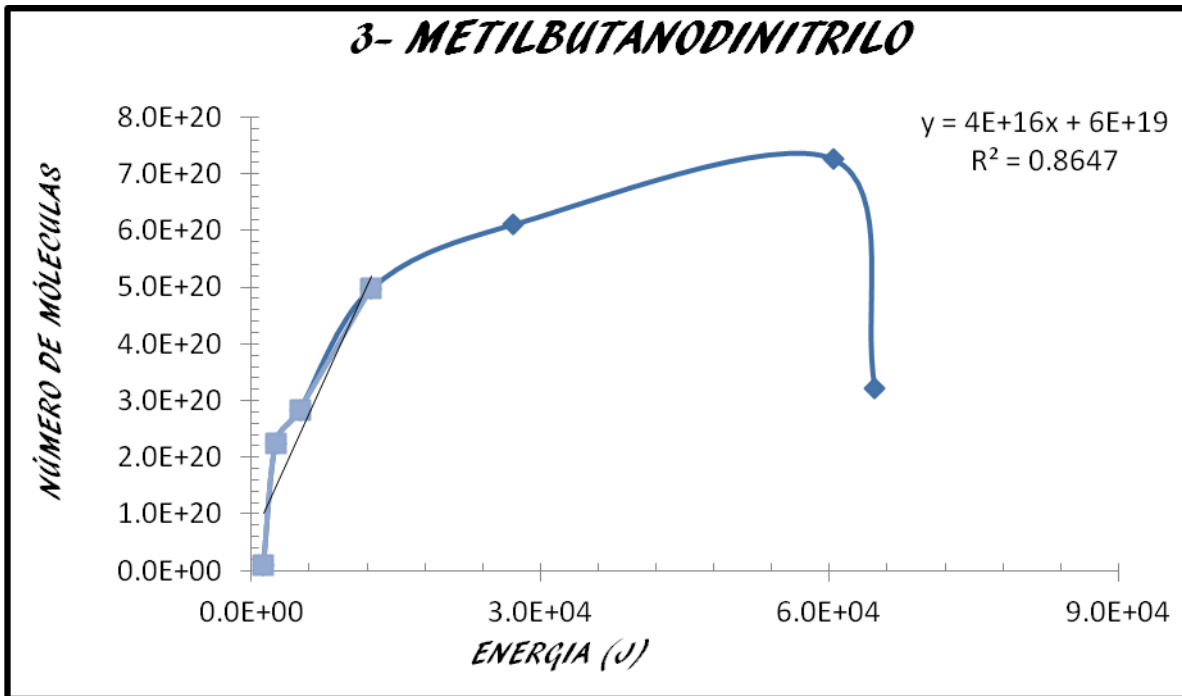
C5. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] Etanodinitriilo.



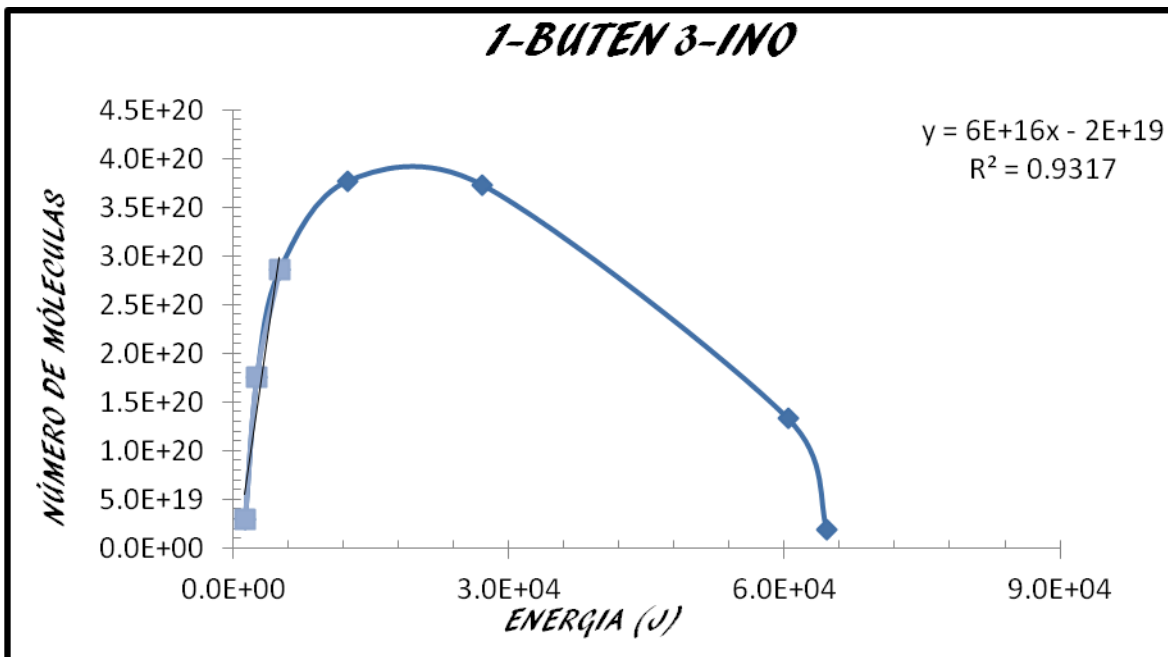
C6. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] Ciclopropeno.



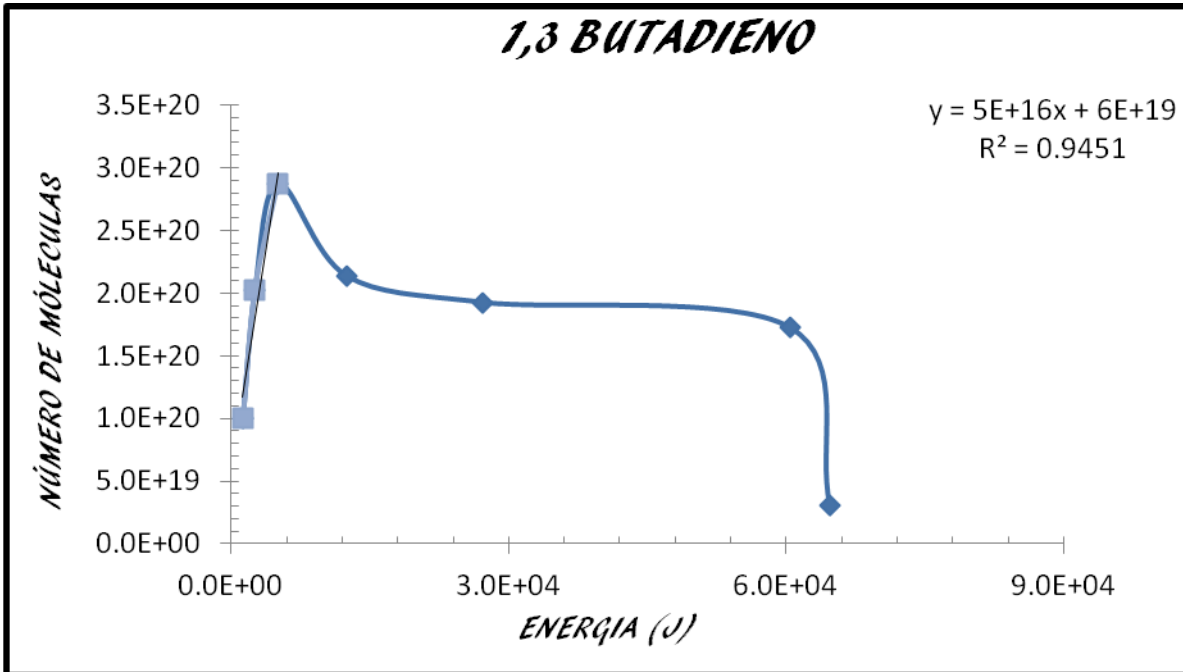
C7. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] Acido Cianhídrico.



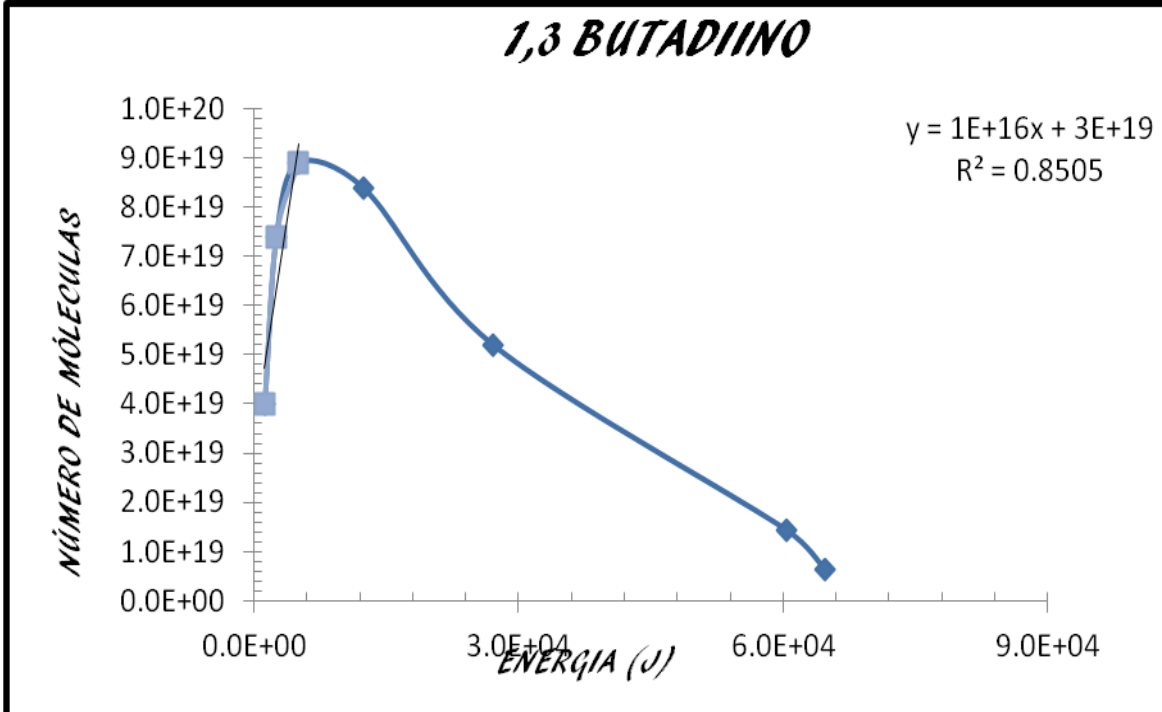
C8. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] 3-metilbutanodinitriilo



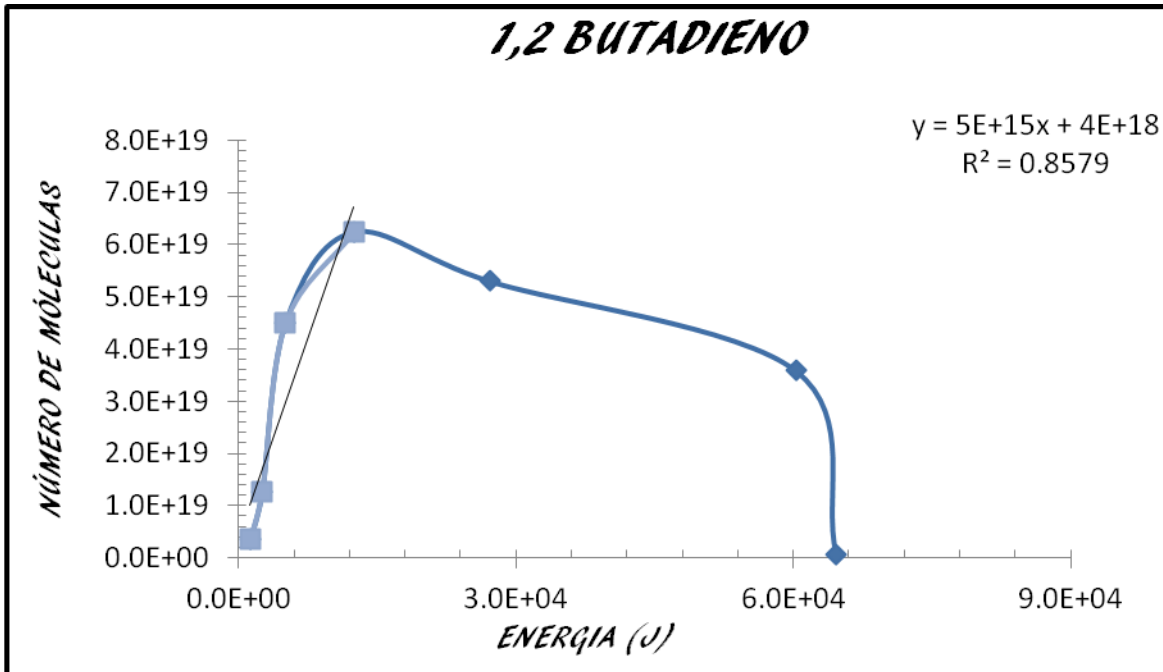
C9. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] 1-Buten 3-Iño.



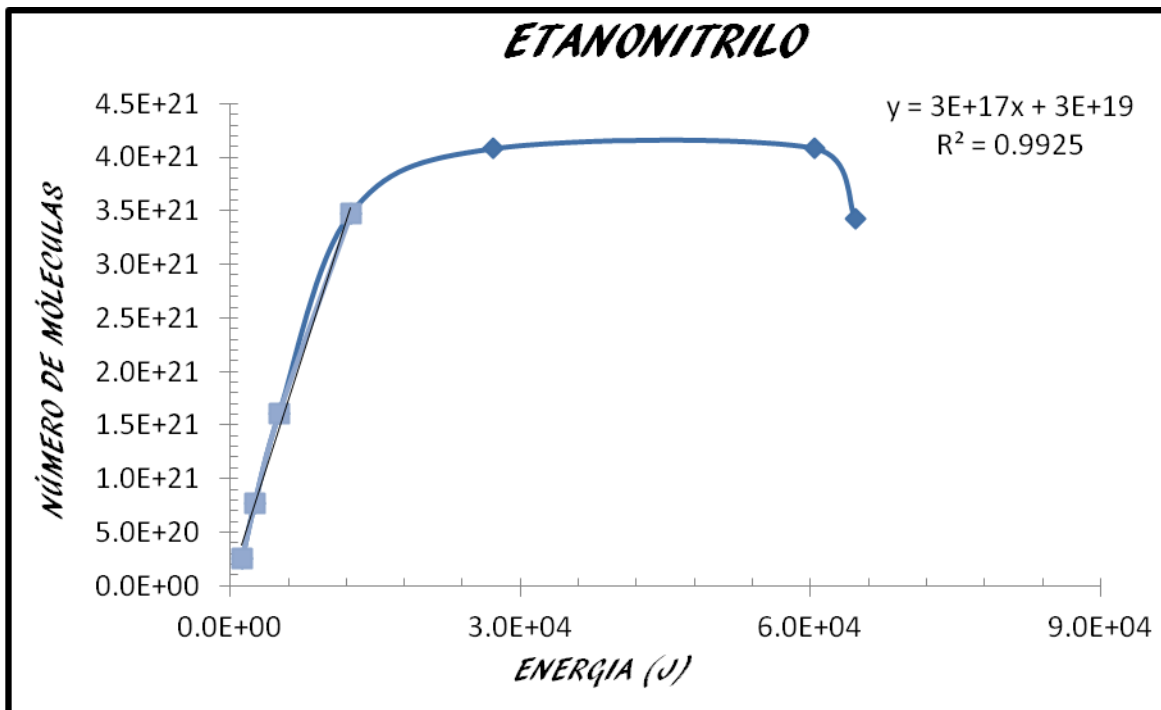
C10. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [+]/ 83 K] 1,3 Butadieno.



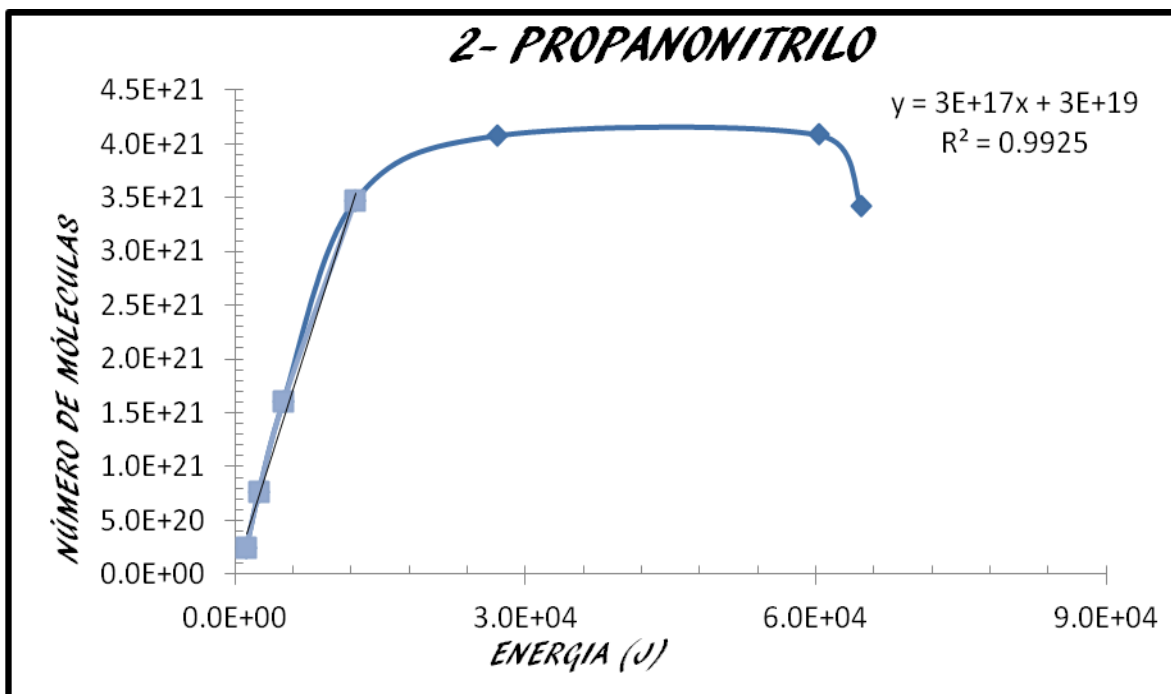
C11. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [+]/ 83 K] 1,3 Butadieno.



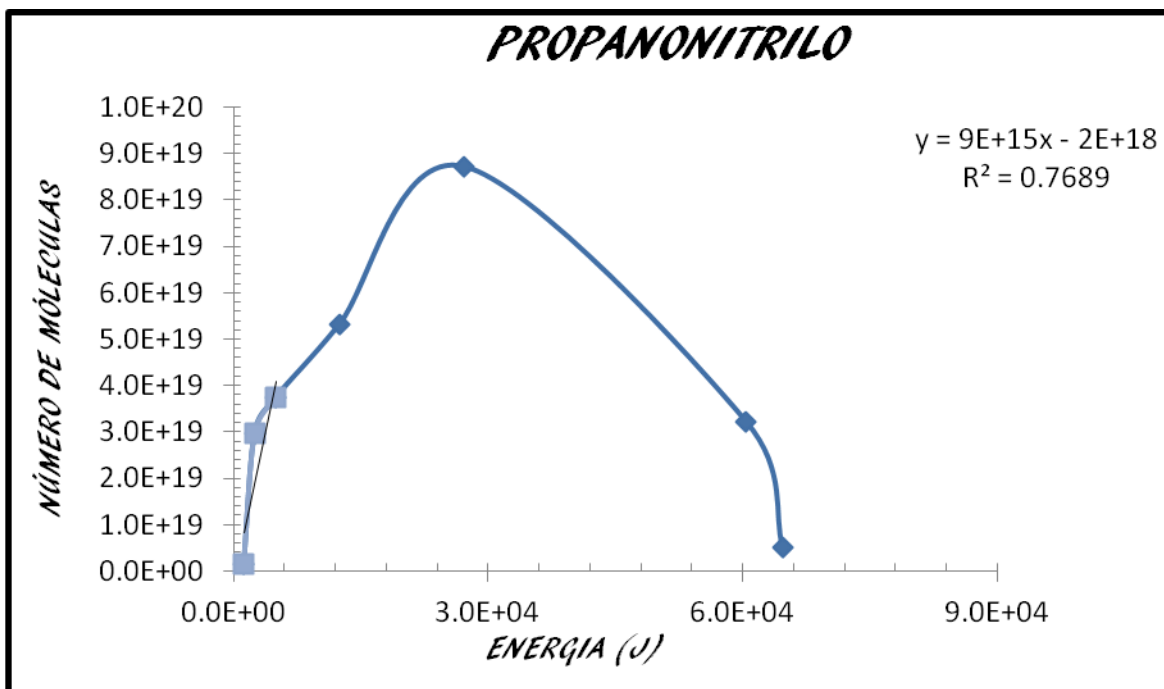
C12. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] 1,2 Butadieno.



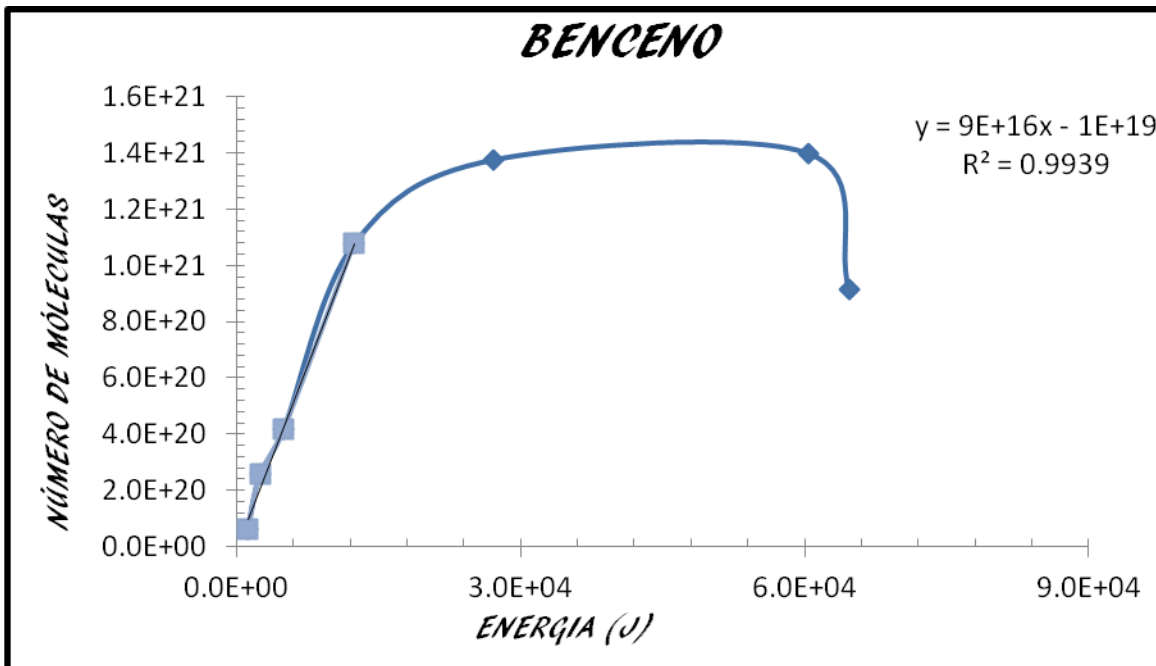
C13. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] Etanonitrilo.



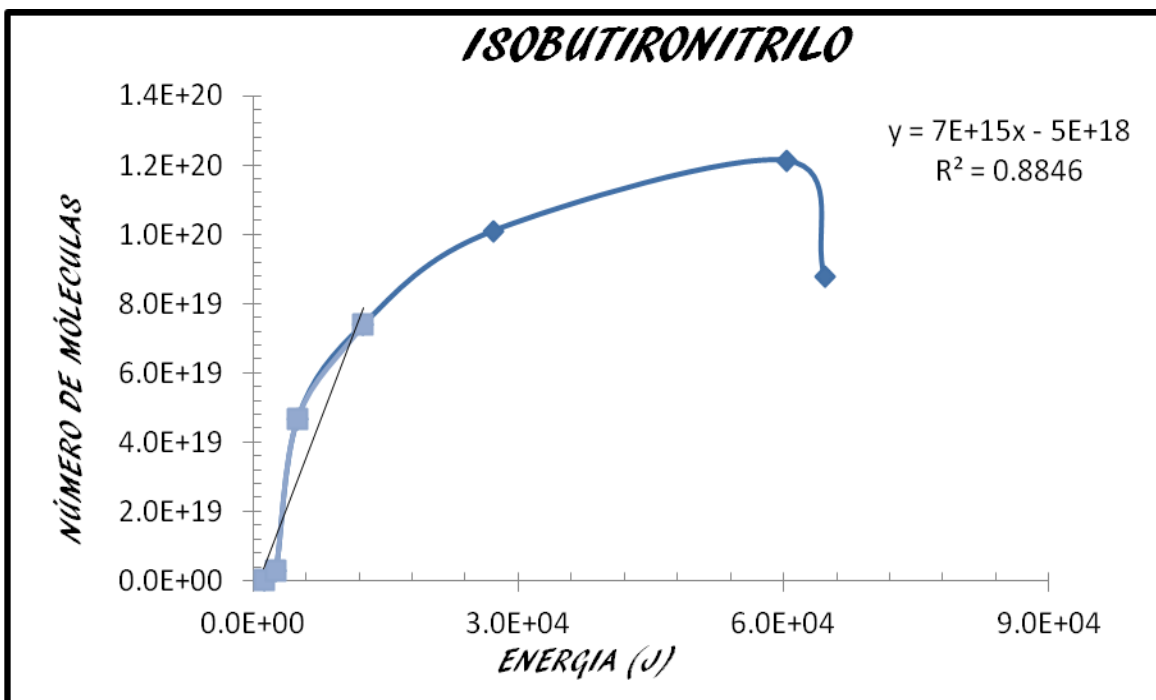
C14. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] 2-Propanonitrilo.



C15. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ +]/ 83 K] Propanonitrilo.

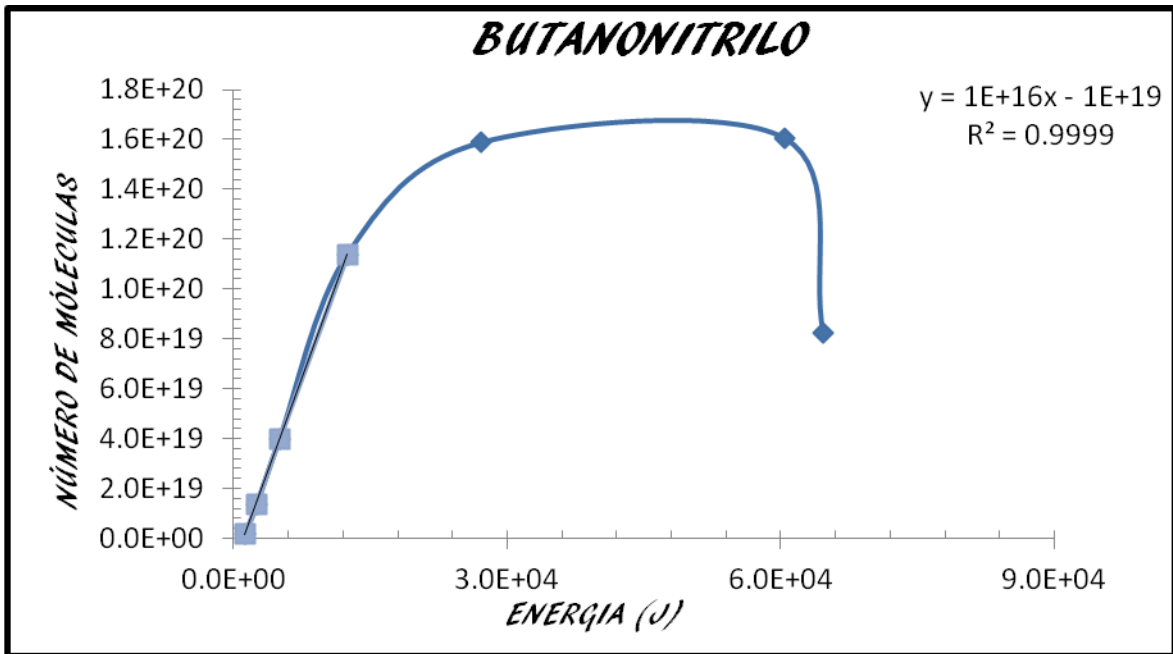


C16. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] Benceno.



C17. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [ + ]/ 83 K] Isobutironitrilo.





C18. Gráfica de rendimiento energético [62.5 W/ N<sub>2</sub>:CH<sub>4</sub>/ 98:2/ [+]/ 83 K] Butadonitrilo.