

Interstellar Chemistry of Binary Phosphorus-Carbon Compounds

Largo, J. Antonio;
Barrientos, Carmen
Universidad de Valladolid
Facultad de Ciencias
Dpto. de Química - Físicas
47005 Valladolid

Río, Emma del
Universidad de Oviedo
Facultad de Química
Dpto. de Química
33006 Oviedo

BIBLID [1137-4411(1997), 4; 111-150]

Hainbat C_nP ($n = 2 - 4$) molekularen egitura eta energia aztertu dira, erradikal interesgarri hauen gas faseko kimikaren zenbait argibide erakusteko asmoz. Hala nola, C_3P^+ katioiaren azterketa sakona egin dugu, izarren arteko espazioan aurkitu daitekeen kumuleno tankerako espezie bat delako. Azkenik, ioi-molekula erreakzio katea bat aurkezten dugu, zeinek C_3P^+ eman dezakeen izarren arteko espazioaren baldintzapetan.

Se presentan la estructura y energías de varias C_nP ($n = 2 - 4$) moléculas con la intención de aclarar la química en fase gaseosa de estos interesantes radicales. También, presentamos un estudio detallado del cation C_3P^+ puesto que es una especie parecida a los cumulenos que se encuentran en el espacio interestelar. Finalmente, discutimos un estudio teórico de un posible mecanismo de reacción ión-molecula, el cual nos conduce a la formación de C_3P^+ bajo condiciones compatibles con las del espacio interestelar.

On présente la structure et les énergies de plusieurs molécules C_nP ($n = 2 - 4$), dans l'intention d'éclaircir la chimie en phase gazeuse de ces intéressants radicaux. Aussi, on présente un étude en détail du cation C_3P^+ étant donné qu'il s'agit d'une espèce semblable aux cumulènes qui se trouvent à l'espace interstellaire. Finalement, on discute sur l'étude théorique d'un possible mécanisme de réaction ion-molécule qui nous mène à la formation de C_3P^+ sous des conditions compatibles avec celles de l'espace interstellaire.

Giltz-Hitzak: Izararteko kimika. Ioi-molekula erreakzioak.

Palabras Clave: Química interestelar. Reacciones ion-molekular.

Mots Clés: Chimie interstellaire. Réactions ion-molécule.