

Capítulo 3

Termodinámica y mecánica estadística

Alberto Carramiñana, 2 de septiembre de 2020.

3.1. Las leyes de la termodinámica

La termodinámica estudia el comportamiento de *sistemas macroscópicos* con su entorno. Estos sistemas se consideran acotados por una frontera que define su tamaño y funciona como interfaz con los alrededores. El tamaño del sistema puede cuantificarse a través de parámetros dimensionales, como el volumen, o el número de partículas que lo componen. Las partículas que componen el sistema tienen manifestación en el comportamiento macroscópico a través de variables como la densidad o la presión.

Las leyes de la termodinámica establecen un marco formal para el estudio de sistemas macroscópicos basado en el concepto de equilibrio termodinámico:

Un sistema está en equilibrio termodinámico cuando las variables que lo describen no varían con el tiempo.

Se desprende que dos sistemas están en equilibrio termodinámico mutuo si al establecer contacto en ellos las variables termodinámicas que describen a cada uno no varían. Por construcción, la termodinámica se aplica a sistemas en equilibrio y se basa en las leyes descritas someramente a continuación.

Ley cero - definición de temperatura

La ley cero define el equilibrio termodinámico entre sistemas a través de conjuntos, o *clases de equivalencia*:

Dados tres sistemas termodinámicos A, B y C, si los sistemas A y B están cada uno en equilibrio termodinámico con C, entonces A y B se encuentran en equilibrio entre ellos.

Partiendo de esta ley, se distinguen las distintas clases de sistemas en equilibrio definiendo el concepto de temperatura. Los estados de equilibrio propio de cada uno de dos sistemas A y B están descritos por las variables $\{X_A, Y_A\}$ y $\{X_B, Y_B\}$, constantes en el tiempo, siendo la temperatura una función de estas variables, $T = f(X, Y)$. La función f es particular a cada sistema. El equilibrio entre sistemas se da cuando los valores numéricos de T coinciden,

$$\{T_A = f_A(X_A, Y_A)\} = \{T_B = f_B(X_B, Y_B)\}.$$

Cada función f define la *ecuación de estado* del sistema respectivo, la cual puede depender de muchas variables. Un punto en el plano $\{X, Y\}$, o espacio multi-dimensional correspondiente, define un estado del sistema. Un valor de temperatura corresponde una curva *isotérmica* en el plano $\{X, Y\}$. Las curvas isotérmicas pueden ordenarse para establecer una escala de temperaturas. Las variables $\{X, Y, \dots\}$ se denominan *variables de estado*.

En el caso particular de un gas ideal clásico las variables de estado son la presión, P , y el volumen, V . La ecuación de estado del gas ideal es,

$$PV = NkT, \tag{3.1}$$

con N el número de partículas que constituyen el gas, y k la constante de Boltzmann¹.

Primera ley - conservación de la energía

El estado termodinámico de un sistema depende de su *energía interna*, E , constante para un sistema aislado. Un sistema que interacciona con sus alrededores tiene un cambio en energía interna dado por,

$$dE = dQ + dW, \tag{3.2}$$

con Q el calor absorbido por el sistema y W el trabajo realizado sobre el mismo como resultado de la variación de algunos de sus parámetros. El

¹ $k = 1.380\,650\,5(24) \times 10^{-16} \text{erg K}^{-1}$

símbolo barrado d indica que las diferenciales respectivas no son necesariamente exactas. Una diferencial es exacta si se anula al integrarla sobre una trayectoria cerrada. Las diferenciales de las variables de estado son exactas.

Los términos en la expresión (3.2) ameritan discusión. El trabajo termodinámico W describe interacciones del sistema con sus alrededores, alterando su estado y energía interna. El trabajo termodinámico puede referirse a una interacción mecánica, eléctrica, química, etc... Su forma es del tipo $dW = \vec{F} \cdot d\vec{\lambda}$, siendo F una *fuerza generalizada* y λ un *desplazamiento generalizado*, formando ambos una pareja de variables termodinámicas *conjugadas*. Una de las variables conjugadas es *intensiva*, independiente de las dimensiones del sistema, y la otra es *extensiva*, dependiente de las dimensiones del sistema. Ejemplos comunes son:

- el **trabajo mecánico** ejercido al comprimir un gas: $dW = -P dV$, siendo P la presión y V el volumen;
- el **trabajo magnético** ejercido al aumentar la magnetización: \vec{M} , de un sistema en un campo magnético, \vec{H} , dado por $dW = \vec{H} \cdot d\vec{M}$;
- de manera análoga, la polarización \vec{P} de un material es modificada por un campo eléctrico \vec{E} realizando un **trabajo eléctrico** $dW = \vec{E} \cdot d\vec{P}$;
- el **trabajo químico** es realizado mediante una reacción química que altera el número de partículas de tipo j : $dW = \mu_j dN_j$, con μ_j la energía necesaria para generar una partícula, o *potencial químico*.

Estas relaciones presuponen que las interacciones se dan mediante procesos *cuasi-estáticos*, definidos como sucesiones de estados de equilibrio.

El calor es, por defecto, una diferencial inexacta y no representa una variable de estado. Sin embargo, el trabajo W es una diferencial exacta en procesos adiabáticos, $dQ = 0$, como consecuencia de que la energía interna es una variable de estado. La forma en que un sistema absorbe o da calor puede describirse mediante los *calores específicos*. Estos coeficientes se definen para procesos que mantienen alguna variable de estado fija, como el volumen o la presión en el caso de un gas ideal,

$$C_v \equiv \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V, \quad C_p \equiv \left(\frac{dQ}{dT} \right)_P. \quad (3.3)$$

Para un gas ideal (ec. 3.1) podemos relacionar estas dos cantidades mediante la primera ley de la termodinámica (ec.3.2),

$$C_v = \left(\frac{dQ}{dT} \right)_V = \frac{dE}{dT}, \quad C_P = \frac{dE}{dT} + P \left(\frac{dV}{dT} \right)_P = C_v + Nk. \quad (3.4)$$

Definiendo el *índice adiabático* como el cociente de los calores específicos, $\gamma \equiv C_p/C_v$, obtenemos la siguiente expresión para energía interna de un gas ideal,

$$\gamma = 1 + \frac{Nk}{C_v} = 1 + \frac{Nk}{dE/dT} \Rightarrow E = \frac{NkT}{\gamma - 1}.$$

Nótese que la energía interna de un gas ideal es independiente del volumen.

Segunda ley - entropía

Partiendo del concepto de calor se define la entropía, S , una variable de estado, mediante

$$dQ = TdS. \quad (3.5)$$

La segunda ley de la termodinámica establece que:

en un sistema cerrado la entropía nunca decrece.

Simplemente,

$$dS \geq 0. \quad (3.6)$$

De manera muy genérica, esta aserción incluye al Universo en su totalidad, un sistema cerrado cuya entropía debe ser creciente con el tiempo. Procesos que cumplen $dS = 0$ en un sistema cerrado son *reversibles*; cualquier otro proceso en un sistema cerrado implica $dS > 0$ y es *irreversible*. Como consecuencia de la segunda ley, un estado de equilibrio tiene máxima entropía y mínima energía. Este principio establece que el equilibrio termodinámico entre sistemas requiere no sólo el equilibrio térmico, $T_A = T_B$, sino también el equilibrio mecánico, $P_A = P_B$. Si consideramos también interacciones químicas, tenemos el requerimiento adicional $\mu_A = \mu_B$.

De la definición (3.5) podemos encontrar la expresión termodinámica para la entropía de un gas ideal,

$$S = Nk \ln T/(\gamma - 1) + Nk \ln V + S_0, \quad (3.7)$$

con S_0 una constante de integración.

Tercera ley - el estado de mínima energía

La tercera ley establece que la entropía de un sistema se anula en el estado definido por

$$\left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V,N} = 0.$$

Este estado corresponde al de mínima energía interna y permite definir una escala de temperaturas donde el cero absoluto corresponde con entropía nula. En la práctica esta escala define los grados Kelvin. Por su parte Nernst enunció en 1906 el siguiente postulado:

la isoterma de un sistema a temperatura cero corresponde con una de sus adiabáticas.

El postulado de Nernst representa un enunciado alternativo de la tercera ley de la termodinámica².

Existe un conflicto entre la expresión(3.7) para la entropía de un gas ideal y la existencia de una escala absoluta de temperatura, definida por $S \rightarrow 0$ para $T \rightarrow 0$. La ecuación de estado del gas ideal clásico pierde validez a temperaturas bajas, donde es necesaria una descripción cuántica (§3.3).

3.2. Mecánica estadística

La mecánica estadística interpreta las variables macroscópicas como manifestación colectiva de las propiedades individuales de las partículas que constituyen al sistema. Requiere una descripción estadística de los micro-estados de un sistema ligada al formalismo termodinámico.

3.2.1. Descripción estadística de un sistema

Estado de un sistema

La descripción de un sistema puede hacerse conforme a las leyes de la mecánica clásica o de la mecánica cuántica. En mecánica clásica el estado de una partícula queda especificado por su posición y momento en función del tiempo, $\{\vec{x}(t), \vec{p}(t)\}$, con su movimiento determinado por las fuerzas que actúan sobre ella. Para un sistema con N partículas requerimos el conjunto de posiciones y momentos en un instante dado, $\{\vec{x}_j(t), \vec{p}_j(t); j = 1, \dots, N\}$, y las interacciones entre ellas para poder especificar completamente el estado del sistema. Esta descripción es posible en teoría pero no en la práctica: además de ser N un número inmanejable, es imposible determinar con precisión absoluta las posiciones y momentos en un instante dado.

En mecánica cuántica el estado de un sistema se describe mediante la función de onda, $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$, que depende de las $3N$ coordenadas de las partículas que lo constituyen, y por el hamiltoniano que describe sus interacciones. Frecuentemente la función de onda puede especificarse mediante

²para más detalles consultar los libros de termodinámica de García-Colín y Callen.

variables alternas, como los números cuánticos. Así, un sistema formado por cuatro osciladores armónicos unidimensionales está suficientemente descrito con cuatro números cuánticos $\{n_1, n_2, n_3, n_4\}$, siendo cada n_i un número natural. Nótese que distintos estados pueden tener una misma energía, $E = (n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + 2)\hbar\omega$. El conjunto de funciones de onda $\psi_{\{n_1, \dots, n_4\}}$ es enumerable, permitiendo la descripción estadística del sistema.

Ensemble estadístico

No todos los micro-estados posibles son consistentes con un estado termodinámico dado. En particular, la energía interna del sistema limita los micro-estados que son accesibles. Los estados que cumplen con las restricciones macroscópicas específicas se denominan *estados accesibles*, mismos que definen lo que se conoce como el *ensemble estadístico*. En el caso simplista de un conjunto de osciladores unidimensionales, al asignar a la energía interna un valor dado, por ejemplo $E = 5\hbar\omega$, se restringe el ensemble estadístico a los micro-estados que satisfacen la restricción $(n_1 + n_2 + n_3 + n_4) = 3$.

Espacio fase

Es generalmente ventajoso localizar los estados de un sistema en el *espacio-fase*, formado por las posiciones y momentos que pueden tener las partículas. Esta descripción permite mudar el enfoque estadístico de las partículas individuales al espacio-fase, el cual se discretiza en celdas de dimensiones finitas, $\Delta x \Delta p = h_0$ (figura 3.1). Esta división es congruente con el principio de incertidumbre que rige en mecánica cuántica, el cual impide el conocimiento perfecto de la posición y el momento de una partícula³, $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Más aún, el principio de exclusión de Pauli prohíbe que dos partículas con espín semi-entero ocupen la misma celda en el espacio fase. Así, en el caso cuántico se emplean celdas de dimensiones h , con sus respectivos números de ocupación. El límite clásico, $h_0 \rightarrow 0$, corresponde con un espacio-fase continuo.

Dos ensembles comunes son el canónico, dónde la restricción está en la asignación de la energía interna a un valor E ; y el ensemble gran canónico, que restringe simultáneamente energía y número de partículas, $\{E, N\}$.

3.2.2. Definición estadística de la entropía

Para un sistema dado con energía interna E es posible calcular el número de estados accesibles correspondientes, $\Omega(E)$. El número de estados accesibles

³ $\hbar = h/2\pi$ con $h = 6.626\,069\,3(11) \times 10^{-27}$ erg s la constante de Planck.

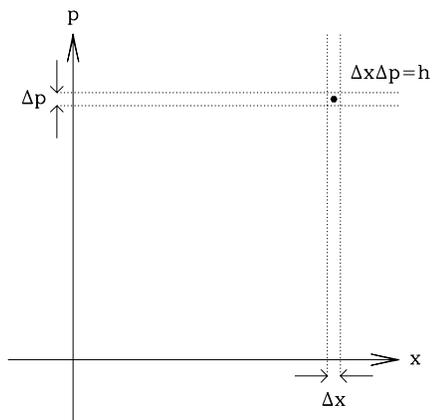


Figura 3.1: Partición del espacio en celdas de tamaño finito, $\Delta x \Delta p = h_0$; la descripción cuántica se hace con $h_0 = h$, mientras que $h_0 \rightarrow 0$ es el límite clásico.

permite establecer una conexión con la termodinámica definiendo la entropía de forma estadística,

$$S(E) \equiv k \ln \Omega(E), \quad (3.8)$$

con k la constante de Boltzmann. Esta definición es congruente con la segunda y tercera ley de la termodinámica:

- Ω es, de manera natural, una función creciente de E ;
- si sólo hay un estado de mínima energía, $\Omega(E_{\min}) = 1 \Rightarrow S(E_{\min}) = 0$.

Podemos considerar la dependencia del número de estados accesibles con E y las variables extensivas, $\Omega = \Omega(E; x = V, N, \dots)$, para conectar la descripción estadística con la termodinámica. De la primera ley obtenemos,

$$T = \frac{\partial E}{\partial S} \Rightarrow \beta(E) \equiv \frac{1}{kT} = \frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}. \quad (3.9)$$

Y de manera similar,

$$P = -\frac{\partial E}{\partial V} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Omega}{\partial V}, \quad \mu = \frac{\partial E}{\partial N} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Omega}{\partial N}, \quad \dots$$

En un sistema con $\Omega(E)$ estados accesibles podemos definir $\Omega(E, y_j)$ como el número de estados que cumplen la restricción adicional, $y = y_j$. La probabilidad de medir $y = y_j$ está dada entonces por $P(y_j) = \Omega(E; y_j) / \Omega(E)$, y el valor promedio de la variable y es:

$$\bar{y} = \frac{1}{\Omega(E)} \sum_j y_j \Omega(E, y_j). \quad (3.10)$$

En la práctica resulta más conveniente calcular variables termodinámicas empleando la función de partición, definida a continuación.

3.2.3. La función de partición

Consideremos el equilibrio entre dos sistemas desde el punto de vista estadístico. Sean A y A' dos sistemas cerrados de energías respectivas E y E' en contacto térmico. El sistema conjunto $A^{(0)} = A + A'$ es también cerrado, y tiene energía total $E^{(0)} = E + E'$. Los números respectivos de estados accesibles son $\Omega(E)$ y $\Omega'(E')$, y el sistema conjunto tendrá a su vez $\Omega^0(E + E') = \Omega(E)\Omega'(E')$ estados accesibles. La probabilidad de que A tenga energía E es

$$P(E) = C \Omega(E) \Omega'(E^0 - E),$$

con C una constante de normalización sobre todos los estados (energías) posibles. Esta probabilidad es máxima si su logaritmo también lo es,

$$\frac{d \ln P(E)}{dE} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d \ln \Omega(E)}{dE} + \frac{d \ln \Omega'(E')}{dE} = 0,$$

que, considerando $E' = E^0 - E$, implica

$$\frac{d \ln \Omega(E)}{dE} - \frac{d \ln \Omega'(E')}{dE'} = \beta(E) - \beta'(E') = 0, \quad (3.11)$$

es decir $T = T'$. La relación (3.11) equivale al principio de máxima entropía.

Si ahora suponemos que A' es un *reservorio de energía*, en el sentido de que sus dimensiones son mucho mayores que las de A (figura 3.16), en particular $E' \gg E$, la probabilidad de que el sistema A esté en un estado r es de la forma

$$P_r = C \Omega'(E^{(0)} - E_r), \quad (3.12)$$

con C la constante de normalización tal que $\sum_r P_r = 1$. La expansión de $\ln \Omega'(E')$ alrededor de $E^{(0)}$ da

$$\ln \Omega'(E^{(0)} - E_r) \simeq \ln \Omega'(E^{(0)}) - \left[\frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \right]_0 E_r. \quad (3.13)$$

El equilibrio termodinámico entre A y A' se establece cuando

$$\frac{\partial \ln \Omega}{\partial E} = \frac{\partial \ln \Omega'}{\partial E'} \quad \Rightarrow \quad \beta = \beta', \quad (3.14)$$

indicando que T es igual a la temperatura del reservorio. Se tiene entonces $P_r \propto e^{-\beta E_r}$, que nos permite escribir la probabilidad del estado r como

$$P_r = \frac{e^{-\beta E_r}}{\sum_{r'} e^{-\beta E_{r'}}}. \quad (3.15)$$

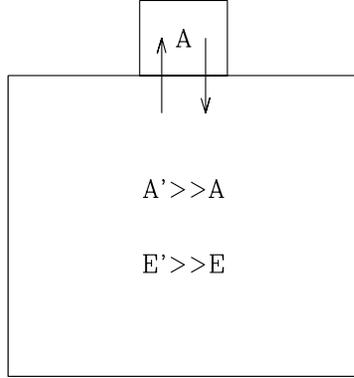


Figura 3.2: Intercambio de energía entre un sistema termodinámico, como una taza de café, y un reservorio de energía que representa el entorno, como la cafetería, hasta alcanzar el equilibrio termodinámico.

Definimos aquí la función de partición del ensemble canónico:

$$Z \equiv \sum_r e^{-\beta E_r}. \quad (3.16)$$

Esta función permite el cálculo de variables termodinámicas. La energía media del sistema es,

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -\frac{1}{Z} \sum_r (-E_r) e^{-\beta E_r}. \quad (3.17)$$

La derivada de la función de partición sobre una variable extensiva,

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial x} = \frac{1}{Z} \sum_r \left(-\beta \frac{\partial E_r}{\partial x} \right) e^{-\beta E_r} = -\beta X,$$

de dónde

$$P = +\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial V}, \quad \mu = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial N}. \quad (3.18)$$

La expresión 3.18 viene siendo la ecuación de estado del sistema. Una relación útil entre la función de partición y la entropía se obtiene derivando⁴

$$d \ln Z = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial \ln Z}{\partial x} dx = -E d\beta - \beta X dx \Rightarrow S = k(\ln Z + \beta E).$$

La función de partición está directamente relacionada con la energía libre de Helmholtz,

$$F = E - TS = -\ln Z.$$

⁴entendiendo que $X dx$ se refiere a $\sum X dx = -PdV + \mu dV + \dots$

Finalmente, la función de partición de un sistema compuesto, $A^{(0)} = A' + A$, está dada por el producto de las funciones de partición de sus sub-sistemas, $Z^{(0)} = Z'Z$. Este resultado es congruente con el hecho de que tanto la energía interna como la entropía son propiedades aditivas.

3.2.4. Gas ideal clásico

Función de partición y relaciones termodinámicas

Un gas ideal consiste en un conjunto de N partículas libres. Su energía está dada por la suma de las energías cinéticas individuales, que en el caso clásico es igual a

$$E = \sum_{j=1}^N \frac{|\vec{p}_j|^2}{2m}. \quad (3.19)$$

En el límite clásico, $h_0 \rightarrow 0$, la sumatoria sobre estados tiende a una integral sobre los valores de $\{\vec{r}, \vec{p}\}$ de cada una de las partículas,

$$Z = \int \exp \left\{ -\frac{\beta}{2m} \sum_{j=0}^N p_j^2 \right\} \frac{d^{3N} r_j d^{3N} p_j}{h_0^{3N}}, \quad (3.20)$$

que se convierte en un producto de N integrales idénticas, resultando en la función de partición:

$$Z = V^N \left(\frac{2\pi mkT}{h_0^2} \right)^{3N/2} = \zeta^N, \quad (3.21)$$

dónde $\zeta = V (2\pi mkT/h_0^2)^{3/2}$ es la función de partición por partícula. De la relación (3.18) se obtiene la ecuación de estado del gas ideal,

$$P = NkT/V.$$

Al derivar con respecto a β obtenemos

$$\bar{E} = 3N/2\beta = (3/2)NkT,$$

la energía interna de un gas ideal clásico de N partículas, que es independiente del volumen. Para la entropía obtenemos

$$S = Nk \left[\ln V + \frac{3}{2} \ln T + \sigma \right] \quad \text{con} \quad \sigma = 3/2 \ln \left(\frac{2\pi mk}{h_0^2} e \right), \quad (3.22)$$

expresión equivalente a la obtenida a través de la termodinámica (ec. 3.7), para $\gamma = 5/3$, $S_0 = Nk\sigma$. Esta expresión presenta dos inconvenientes: uno

es el no comportarse como una variable extensiva - la *paradoja de Gibbs*. Supongamos dos sistemas, A y B, dónde B duplica al sistema A, es decir $V_B = 2V_A$ y $N_B = 2N_A$. Siendo la entropía una variable extensiva debería cumplirse $S_B = 2S_A$, lo cual no es consistente con (3.22). Gibbs resolvió esta paradoja al considerar que el intercambio de partículas microscópicas idénticas no modifica el estado del sistema por lo que la función de partición debe dividirse por $N!$, el número de permutaciones entre N partículas. Es decir,

$$Z = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{2\pi mkT}{h_0^2} \right)^{3N/2}. \quad (3.23)$$

Usando la aproximación de Stirling, $\ln N! \simeq N \ln N - N$, Gibbs obtuvo

$$S = Nk \left[\ln \left(\frac{V}{N} \right) + \frac{3}{2} \ln T + \sigma_s \right], \quad (3.24)$$

dónde $\sigma_s = \sigma + 1$. Esta expresión satisface $S_B = 2S_A$, resolviendo la paradoja de Gibbs. El segundo problema, irresoluble en un contexto clásico, es la incongruencia con la tercera ley de la termodinámica, ya que $S \rightarrow -\infty$ para $T \rightarrow 0$. El límite de bajas temperaturas requiere un tratamiento cuántico.

La distribución de Maxwell-Boltzmann

La función de distribución de Maxwell-Boltzmann describe la probabilidad que tiene una partícula de tener momento en $(\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p})$, y posición en $(\vec{r}, \vec{r} + d\vec{r})$. Esta probabilidad se relaciona directamente con la probabilidad de un estado r , dada por $P_r \propto e^{-\beta E_r}$. La función que describe cuantas partículas tienen momento alrededor de \vec{p} y posición alrededor de \vec{r} en un gas ideal clásico tiene la forma,

$$f(\vec{r}, \vec{p}) d^3r d^3p = \frac{n}{(2\pi mkT)^{3/2}} \exp \left\{ -p^2/2mkT \right\} d^3r d^3p, \quad (3.25)$$

con n la densidad de partículas. La distribución de Maxwell-Boltzmann depende solamente de $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$, y se define normalizada al número de partículas, $\int f(p) d^3r d^3p = N$. Es común escribirla de forma alternativa en términos de la velocidad \vec{v} de las partículas,

$$f(\vec{v}) d^3v = f(v) 4\pi v^2 dv = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} 4\pi v^2 dv,$$

dónde se emplea que f solo depende de la magnitud de la velocidad, y $d^3v = 4\pi v^2 dv$. La distribución de Maxwell-Boltzmann se emplea para cálculos como el de la velocidad promedio de las partículas, o la presión del gas,

dónde se considera la fuerza que las partículas ejercen sobre un elemento de superficie normal al eje z :

$$P = \int m v_z^2 f(v) d^3v = \frac{1}{3} n m \langle v^2 \rangle. \quad (3.26)$$

El límite cuántico

Un gas ideal puede describirse de manera clásica cuando la ocupación de las celdas de espacio-fase es suficientemente baja. Esta condición puede escribirse como

$$N \ll [\Delta x]^3 [\Delta p]^3 / h^3,$$

dónde $[\Delta x]$, $[\Delta p]$ denotan los rangos de posiciones y momentos ocupados por las N partículas. Claramente $[\Delta x]^3 = V$, mientras que $[\Delta p]^3 \simeq (mkT)^{3/2}$. La condición para la aplicabilidad de la estadística clásica viene siendo,

$$T \gg n^{2/3} h^2 / mk, \quad (3.27)$$

con $n = N/V$, la densidad numérica. En condiciones ambientales típicas, el aire tiene $n \simeq 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ partículas de masa $m \approx 29$ uma $\simeq 5 \times 10^{-23}$ g. La condición para que la ocupación del espacio fase sea baja es $T \gg 0.047 \text{ K}$. Alternativamente, a temperatura ambiente, $T = 300 \text{ K}$, la descripción clásica es buena para $n \ll 10^{25} \text{ cm}^{-3}$. El régimen cuántico se aplica para temperaturas muy bajas y/o densidades muy altas.

3.3. Gases cuánticos

3.3.1. Función de partición de un ensemble gran canónico

El ensemble gran canónico considera el intercambio de partículas entre el sistema y el reservorio. Un estado r se caracteriza tanto por su energía, E_r , como por el número de partículas, N_r . Considerando nuevamente la interacción del sistema A con el reservorio A' , con la consideración adicional $N' \gg N$, el sistema compuesto $A^{(0)} = A + A'$ cumple ahora dos restricciones:

$$E^{(0)} = E + E', \quad N^{(0)} = N + N'. \quad (3.28)$$

De manera análoga al procedimiento seguido para el ensemble canónico, se obtiene la función de probabilidad del ensemble gran-canónico,

$$P_r \propto \exp\{-\beta(E_r - \mu N_r)\}, \quad (3.29)$$

dónde μ es el potencial químico del sistema, que corresponde con la energía requerida para producir una nueva partícula. La función de partición gran canónica está dada por

$$Z = \sum_r e^{-\beta(E_r - \mu N_r)}.$$

Podemos relacionar la energía total del sistema y el número de partículas con la ocupación n_j de las celdas,

$$E_r = \sum_j n_j \varepsilon_j, \quad N_r = \sum_j n_j, \quad (3.30)$$

donde ε_j es la energía correspondiente a la celda j , para obtener:

$$P_r \propto \exp \left\{ - \sum_j \beta (n_j \varepsilon_j - \mu n_j) \right\} = \prod_j [\exp(-\beta(\varepsilon_j - \mu))]^{n_j}. \quad (3.31)$$

La sumatoria de la exponencial sobre estados r nos da la función de partición:

$$Z = \sum_r \left(\prod_j w_j^{n_j} \right) = \prod_j \left(\sum_{n_j} w_j^{n_j} \right), \quad (3.32)$$

abreviando $w_j = \exp\{-\beta(\varepsilon_j - \mu)\}$. La primera igualdad indica que la función de partición es la sumatoria sobre todos los estados r del producto sobre los números de ocupación correspondientes a cada estado, definido por el conjunto de números de ocupación $\{n_1^{(r)}, n_2^{(r)}, n_3^{(r)}, \dots\}$. El término de la derecha indica el producto sobre todas las celdas de espacio fase de la sumatoria sobre todos los *posibles* números de ocupación. Las energías ε_j dependen de la ubicación de la j -ésima celda de espacio-fase, y no de su ocupación, lo cual permite permutar el producto y la suma sobre estados. Considerando como ejemplo un sistema con tres micro-estados representados por las celdas $j = \{a, b, c\}$ que pueden ser ocupadas por cero o una partícula, $n_j \in \{0, 1\}$, hay ocho estados r con distintos valores de E_r y N_r . En este sistema los dos términos de la igualdad (3.32) se escriben como:

$$\begin{aligned} \sum_{r=000}^{111} \left(\prod_{j=0}^1 w_j^{n_j} \right) &= 1 + w_a + w_b + w_c + w_a w_b + w_a w_c + w_b w_c + w_a w_b w_c, \\ \prod_{j=a,b,c} \left(\sum_{n_j=0}^1 w_j^{n_j} \right) &= (1 + w_a)(1 + w_b)(1 + w_c). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Se puede verificar que la igualdad se cumple en este caso particular. Se puede inferir también que la igualdad se cumplirá si aumentamos el número de celdas o las posibilidades del número de ocupación.

Las tres estadísticas más relevantes son:

1. Bose-Einstein: partículas de espín entero no tienen restricciones en la ocupación del espacio fase, $n_j \in \{0, 1, 2, \dots\}$. Una aplicación es la estadística de un gas de fotones que se desarrolla en la siguiente sección.
2. Fermi-Dirac: partículas de espín semi-entero siguen el principio de exclusión de Pauli que restringe la ocupación del espacio fase a $n_j \in \{0, 1\}$, con la debida consideración de las dos orientaciones posibles del espín. La aplicación a gases de fermiones se muestra más adelante.
3. Maxwell-Boltzmann: el caso clásico corresponde a números de ocupación muy pequeños y temperatura altas, $\beta(\varepsilon_j - \mu) \gg 1 \Rightarrow w_j \ll 1$, resultando en $\ln Z \approx N \ln \left(\sum_r e^{-\beta\varepsilon_r} \right)$.

3.3.2. Aplicación a un gas de fotones

Un gas de bosones no tiene restricción en el número de partículas que pueden ocupar un estado dado. La función de partición se obtiene de la sumatoria del lado derecho de la expresión 3.32, sumando desde $n_j = 0$ a infinito,

$$\sum_{n_j=0}^{\infty} w_j^{n_j} = \frac{1}{1 - w_j} \quad \Rightarrow \quad Z = \prod_j \left\{ \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}} \right\}. \quad (3.34)$$

La ocupación del espacio fase se obtiene de la función de partición, a través del número total de partículas,,

$$N = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \sum_j \frac{1}{e^{(\varepsilon_j - \mu)/kT} - 1} = \sum_j n_j. \quad (3.35)$$

En el caso de un gas de fotones usamos $\mu = 0$, y caracterizamos el micro-estado de cada fotón con su frecuencia, $\varepsilon_j = h\nu$, por lo que la ocupación media está dada por

$$\bar{n}_\nu = \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (3.36)$$

Por otro lado, el número \mathcal{N} de estados accesibles corresponde al número de celdas que tiene el espacio-fase, de dimensiones $\Delta^3 x \Delta^3 p = h^3$ cada uno e incluyendo un factor por los dos valores posibles de la *helicidad* del fotón,

$$d\mathcal{N} = 2 \frac{d^3 x d^3 p}{h^3} \quad \Rightarrow \quad \frac{d\mathcal{N}}{dV} = 2 \left(\frac{\nu^2}{c^3} \right) d\nu d\Omega, \quad (3.37)$$

empleando $d^3p = p^2 d\Omega dp$, con $p = h\nu/c$. La densidad de energía de radiación en equilibrio termodinámico, $u_\nu(T)$, viene dada por la energía de cada estado ($h\nu$), la densidad de estados (3.37), la isotropía ($d\Omega \rightarrow 4\pi$), y la ocupación de cada estado (3.36), dando lugar a la distribución de Planck:

$$u_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (3.38)$$

Al integrar sobre frecuencias obtenemos $u(T) = aT^4$.

3.3.3. Gas ideal de fermiones en degeneración

En un gas de fermiones, partículas de espín semi-entero, un estado dado puede ser ocupado a lo más por una partícula, con lo que la sumatoria sobre ocupaciones es trivial,

$$Z = \prod_j \left\{ 1 + e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)} \right\}. \quad (3.39)$$

Podemos encontrar el número de fermiones en un estado de energía ε_j , bajo un potencial químico μ :

$$N = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \sum_j \frac{1}{e^{(\varepsilon_j - \mu)/kT} + 1} = \sum_j n_j, \quad (3.40)$$

es decir

$$\bar{n}_j = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} + 1}. \quad (3.41)$$

Esta función se muestra en la figura 3.3. \bar{n}_j cumple $0 \leq \bar{n}_j \leq 1$, como corresponde al principio de exclusión de Pauli. La ocupación pasa de 1 a 0 en un intervalo $\Delta E \sim kT$, tendiendo a una función escalón para $kT \ll \mu$. El caso $T \rightarrow 0$ corresponde al límite de *degeneración*.

En un gas ideal degenerado podemos identificar el potencial químico con la *energía de Fermi*, $\mu = \varepsilon_f(p_f)$, siendo p_f el momento de Fermi. En el límite $\varepsilon_f/kT \rightarrow \infty$ todos los estados con energía $\varepsilon < \varepsilon_f$ están ocupados por una partícula mientras que aquellos con $\varepsilon > \varepsilon_f$ están todos vacíos. La energía cinética se relaciona con el momento de acuerdo a la expresión general $\varepsilon_f = \sqrt{p_f^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2$, siendo m la masa de las partículas. Para partículas no relativistas $\varepsilon_f \approx p_f^2/2m$, mientras que en el límite relativista $\varepsilon_f \approx p_f c$. A continuación mostramos las propiedades de los gases de fermiones degenerados, y su aplicación a estrellas compactas⁵

⁵Siguiendo la presentación del libro de Weinberg (1973).

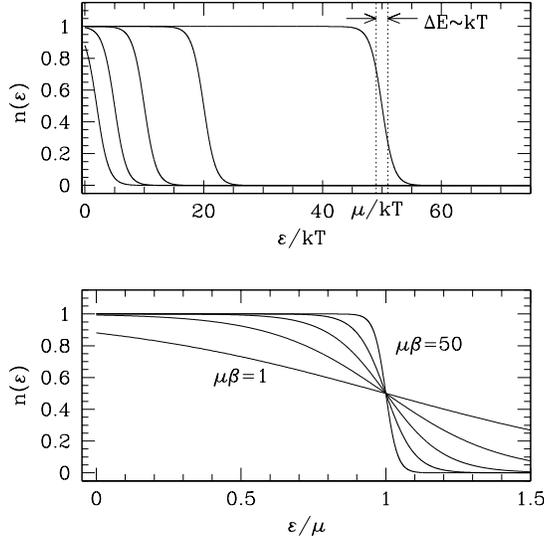


Figura 3.3: *Arriba*: ocupación media de estados, \bar{n}_j , en un gas de fermiones como función de la energía del estado, para $\mu/kT = 1.0, 5, 10, 20, 50$. La función tiende a un escalón centrado en $\varepsilon = \mu$, de ancho $\Delta E \sim kT$, a medida que μ/kT aumenta, como se ilustra en la figura de *abajo*, con ε normalizada a μ .

Gas degenerado no relativista

Consideremos un gas de electrones en estado de degeneración, como descripción de una estrella enana blanca. Tomando en cuenta que los núcleos son quienes le dan la masa a la estrella, escribimos la densidad de masa como $\rho = \Gamma n_e m_H$, siendo n_e la densidad de electrones, m_H la unidad de masa atómica y Γ el cociente de nucleones a electrones, el cual tiende a 2 para material procesado (en particular $\Gamma = 56/26$ para Fe). El número total de partículas es igual al número de estados dentro de una esfera de Fermi, considerando los dos estados del espín,

$$N = 2\mathcal{N} = 2 \int d^3x \int_0^{p_f} \frac{d^3p}{h^3} = \frac{2V}{h^3} \left(\frac{4\pi}{3} p_f^3 \right), \quad (3.42)$$

es decir $n = k_f^3/3\pi^2$, empleando $p_f = \hbar k_f$. Combinando ambas expresiones obtenemos el momento de Fermi en función de la densidad:

$$p_f = \left(\frac{3h^3 \rho}{8\pi \Gamma m_H} \right)^{1/3} \iff k_f = \left(\frac{3\pi^2 \rho}{\Gamma m_H} \right)^{1/3}. \quad (3.43)$$

Suponiendo un gas ideal no relativista es posible calcular una temperatura de Fermi, por debajo de la cual el gas está en estado de degeneración

$$kT_f = \frac{p_f^2}{2m} \Rightarrow T_f \simeq 2.4 \times 10^9 \text{ K} \left(\frac{\rho}{10^6 \text{ g cm}^{-3}} \right)^{2/3} \left(\frac{\Gamma}{1.4} \right)^{-2/3}. \quad (3.44)$$

La temperatura de Fermi es muy superior a la del interior de una estrella enana blanca, el cual está por tanto en estado de degeneración.

La densidad de energía, u , y la presión, P , para un gas degenerado están dadas por las integrales respectivas sobre el espacio fase,

$$u = \int_0^{p_f} \varepsilon \left(2h^{-3} d^3p \right), \quad P = \int_0^{p_f} \frac{1}{3} \vec{p} \cdot \vec{v} \left(2h^{-3} d^3p \right). \quad (3.45)$$

Usando la forma de energía cinética de una partícula relativista y la igualdad $\vec{v} = \vec{p}c^2/\varepsilon$, se tiene la expresión general para densidad de energía, u , y la presión, P , para un gas degenerado está dadas por integrales sobre el espacio de momentos derivadas de las integrales sobre espacio fase⁶,

$$\begin{aligned} u &= \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} \left[\sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \right] 4\pi p^2 dp, \\ P &= \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} \frac{1}{3} \left[\frac{p^2 c^2}{\sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4}} \right] 4\pi p^2 dp. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Para el caso no relativista, $p \ll mc$:

$$u = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} \left(\frac{p^2}{2m_e} \right) 4\pi p^2 dp, \quad P = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} \frac{1}{3} \left(\frac{p^2}{m_e} \right) 4\pi p^2 dp. \quad (3.47)$$

Se obtiene $u = 3P/2$, misma expresión que para un gas ideal clásico, y,

$$P = \left(\frac{3}{\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{20m_e} \left(\frac{\rho}{\Gamma m_H} \right)^{5/3} \quad \longrightarrow \quad P \propto \rho^{5/3}. \quad (3.48)$$

Esta es la ecuación de estado de un gas degenerado de fermiones no relativista, en el límite $T = 0$. La transición al caso relativista se da cuando $p_f = m_e c$, que implica

$$\rho = \rho_c \equiv \frac{8\pi (\Gamma m_H) m_e^3 c^3}{3h^3} \simeq 0.97 \times 10^6 \Gamma \text{ g cm}^{-3}. \quad (3.49)$$

Esta es la densidad típica de una estrella enana blanca.

Gas degenerado relativista

La expresión general para densidad de energía, u , y la presión, P , para un gas degenerado está dadas por las integrales 3.46, que para un gas relativista ($p \gg mc$) se aproximan como

$$u = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} (pc) 4\pi p^2 dp, \quad P = \frac{2}{h^3} \int_0^{p_f} \frac{1}{3} (pc) 4\pi p^2 dp. \quad (3.50)$$

⁶planteadas en el libro de Weinberg

En el caso relativista, $\rho \gg \rho_c$, el término de momento domina en las integrales 3.46, resultando en $u = 3P$, análogo al caso del gas de fotones, y la ecuación de estado,

$$P = \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \frac{hc}{8} \left(\frac{\rho}{\Gamma m_H}\right)^{4/3} \longrightarrow P \propto \rho^{4/3}, \quad (3.51)$$

para un gas degenerado de partículas relativistas en $T = 0$.

Estrellas degeneradas

La estructura de una estrella degenerada puede investigarse de manera cualitativa y semi-cuantitativa con las expresiones derivadas anteriormente. La energía total de la estrella está dada por la suma de la energía interna (térmica) y gravitacional,

$$E_{tot} = \int_0^R u(r) 4\pi r^2 dr - \int_0^R \rho(r) \frac{GM(r)}{r} 4\pi r^2 dr, \quad (3.52)$$

siendo $u = K\rho^\gamma/(\gamma - 1)$ la densidad de energía, R el radio de la estrella y $M(r)$ la masa contenida dentro de un radio r . Un ejemplo simplificado es una estrella con densidad constante, para la cual obtenemos,

$$E(R) = \frac{KM^\gamma}{(\gamma - 1)} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\gamma-1} R^{-3(\gamma-1)} - \frac{3}{5} \frac{GM^2}{R}. \quad (3.53)$$

La configuración de equilibrio está determinada por la condición de mínima energía, $dE/dR = 0$. Distinguimos los límites no relativista y relativista,

- **Caso no relativista:** $\Rightarrow \rho \ll \rho_c \Rightarrow \gamma = 5/3$. La configuración de mínima energía se da para

$$R = \frac{5K}{G} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3} M^{-1/3}, \quad (3.54)$$

resultando en una relación $R \propto M^{-1/3}$ para estrellas degeneradas. Con la expresión para K resultante de 3.47 obtenemos,

$$R = \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{4/3} \frac{h^2 M^{-1/3}}{4Gm_e(\Gamma m_h)^{5/3}} \simeq 7153 \text{ km} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-1/3}.$$

Nótese que una estrella de mayor masa tiene menor radio.

- **Caso relativista:** $\Rightarrow \rho \gg \rho_c \Rightarrow \gamma = 4/3$. La expresión para la energía de la estrella queda como,

$$E(R) = \frac{3GM^2}{5R} \left[\left(\frac{M_\star}{M} \right)^{2/3} - 1 \right], \quad (3.55)$$

con

$$M_\star = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{5K}{G} \right)^{3/2}. \quad (3.56)$$

No hay un radio que defina una configuración de equilibrio a partir de la expresión 3.55: $M < M_\star \Rightarrow E(R) > 0$ y la estrella se expande buscando la mínima energía, $E \rightarrow 0$ en $R \rightarrow \infty$. Si $M > M_\star \Rightarrow E(R) < 0$ y la estrella se colapsa al buscar la mínima energía, $E \rightarrow -\infty$ en $R \rightarrow 0$. El valor M_\star representa la masa límite para una estrella degenerada, marcada por la transición de la ecuación de estado del régimen no relativista al relativista. Substituyendo K para $\gamma = 4/3$ se obtiene la masa límite para una estrella sostenida por electrones degenerados,

$$M_\star = M_{ch} = \frac{3(5hc/8G)^{3/2}}{2\pi(\Gamma m_h)^2} \simeq 3.42 \times 10^{33} \text{ g} \simeq 1.72 M_\odot. \quad (3.57)$$

Esta expresión corresponde a la masa de Chandrasekhar, para el caso simplificado de una estrella con densidad constante.

El mismo análisis se puede hacer para una estrella de neutrones, reemplazando $m_e \rightarrow m_N \simeq m_H$ y $\Gamma = 1$. La densidad crítica queda como

$$\rho_c = \frac{m_H^4 c^3}{3\pi^2 \hbar^3} \simeq 6.1 \times 10^{15} \text{ g cm}^{-3}, \quad (3.58)$$

obteniéndose para el caso no relativista

$$R = \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{4/3} \frac{\hbar^2 M^{-1/3}}{4Gm_N^{8/3}} \simeq 4.9 \text{ km} (M/M_\odot)^{-1/3}, \quad (3.59)$$

y una masa límite

$$M_{ns} = \frac{3(5hc/8G)^{3/2}}{2\pi m_h^2} \simeq 6.9 M_\odot. \quad (3.60)$$

El radio de la estrella queda subestimado con respecto a un análisis más riguroso, en particular porque hemos despreciado la interacción entre partículas. Los valores actualmente aceptados para las dimensiones de las estrellas de neutrones son $M_\star \simeq 1.44 M_\odot$ y $R_\star \simeq 10 \text{ km}$.

3.4. Reacciones en equilibrio

La mecánica estadística permite tratar problemas que involucran la co-existencia de partículas distintas, o especies químicas distintas, en equilibrio. Ejemplos son el equilibrio entre especies neutras, iones y electrones; o la creación y destrucción conjunta de partículas en reacciones químicas, o en reacciones nucleares. El proceso de destrucción y creación puede darse en un estado de equilibrio con la reacción inversa, por ejemplo:

- la ionización y recombinación del hidrógeno: $\text{H} \longleftrightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$;
- la producción y aniquilación de pares: $\gamma + \gamma \longleftrightarrow \text{e}^+ + \text{e}^-$;
- la fusión de dos núcleos de helio en un núcleo de berilio y el decaimiento del berilio-8: ${}^4\text{He} + {}^4\text{He} \longleftrightarrow {}^8\text{Be}$.

El equilibrio entre una reacción y su inversa establece una relación entre las funciones de partición de las partículas involucradas que da lugar relaciones entre las densidades de las distintas especies. Se presenta la ley de acción de masas y dos aplicaciones.

3.4.1. La ley de acción de masas

Para varias especies de partículas en co-existencia tenemos,

$$dE = TdS - PdV + \sum_{\ell=1}^m \mu_{\ell} dN_{\ell},$$

dónde el índice ℓ enumera m especies. En equilibrio se minimiza la energía y se maximiza la entropía, lo cual requiere

$$\sum_{\ell} \mu_{\ell} dN_{\ell} = 0. \quad (3.61)$$

La ley de acción de masas surge al considerar la función de partición dada por el producto de las funciones de partición de las distintas especies, $Z = \prod_{\ell} Z_{\ell}$, las cuales se pueden escribir como los productos de las funciones de partición, ζ_{ℓ} , de las N_{ℓ} partículas individuales agrupadas por especie,

$$Z = \prod_{\ell=1}^m Z_{\ell} = \prod_{\ell=1}^m \frac{\zeta_{\ell}^{N_{\ell}}}{N_{\ell}!}, \quad (3.62)$$

con el factor $N_\ell!$ indicando la indistinguibilidad de las partículas de la especie ℓ . El potencial químico de cada especie se calcula de la función de partición,

$$\mu_\ell = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial N_\ell} \approx -kT \ln \left(\frac{\zeta_\ell}{N_\ell} \right), \quad (3.63)$$

que, junto con la condición de equilibrio 3.61 y la aproximación de Stirling da,

$$\sum_\ell \ln \left(\frac{\zeta_\ell}{N_\ell} \right) dN_\ell = 0 \Rightarrow \prod_\ell \left(\frac{\zeta_\ell}{n_\ell V} \right)^{\nu_\ell} = \prod_{\ell'} \left(\frac{\zeta_{\ell'}}{n_{\ell'} V} \right)^{\nu_{\ell'}}, \quad (3.64)$$

con ℓ denotando las especies del lado izquierdo de la reacción, ℓ' las del lado derecho, y ν_ℓ la proporción relativa de la especie ℓ en la reacción, que se introduce como factor de proporcionalidad, $dN_\ell \propto \nu_\ell$, empleando la densidad de partículas en lugar del número, $N_\ell = n_\ell V$.

Para partículas libres podemos emplear la expresión para un gas ideal clásico, $\zeta = V(2\pi mkT/h^2)^{3/2}$. Para partículas con grados de libertad adicionales a los traslacionales, por ejemplo un sistema ligado con potencial de ionización χ , la función de partición puede separarse en la parte traslacional y la interna, $\zeta = \zeta_t \zeta_{int}$, donde ζ_t es una función de partícula libre y $\zeta_{int} = g e^{-E/kT}$, con g el peso estadístico por degeneración de estados.

Dos aplicaciones importantes de la ley de acción de masas en astrofísica son la ley de Boltzmann y la ecuación de Saha, a continuación.

3.4.2. Ley de Boltzmann

El equilibrio entre átomos en dos estado 1 y 2 puede describirse como la reacción $(1) \rightleftharpoons (2)$, de dónde la ley de acción de masas (ec. 3.64) da:

$$n_2/n_1 = \zeta_2/\zeta_1. \quad (3.65)$$

El potencial químico para los fotones es nulo y por tanto podemos despreciarlos en estas expresiones. En un sistema cuántico $\zeta_j = g_j e^{-E_j/kT}$, con g_j el número de estados degenerados de energía E_j , por lo que obtenemos la ley de Boltzmann:

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{(E_1 - E_2)/kT}. \quad (3.66)$$

Para un sistema con un número arbitrario de niveles tenemos:

$$\frac{n_j}{n} = \frac{g_j e^{-E_j/kT}}{\sum_\ell g_\ell e^{-E_\ell/kT}}. \quad (3.67)$$

En la práctica el rápido aumento de la degeneración g_ℓ con el número de estados se ve eventualmente compensado por el término exponencial, permitiendo realizar el cálculo correspondiente considerando un número finito de estados.

3.4.3. Ecuación de Saha

Para procesos como la ionización y recombinación del hidrógeno,

$$H(0) \rightleftharpoons H(1) + e, \quad (3.68)$$

dónde el número entre paréntesis denota el grado de ionización, la ley de acción de masas queda como:

$$\frac{\zeta_0}{n_0 V} = \left(\frac{\zeta_1}{n_1 V} \right) \left(\frac{\zeta_e}{n_e V} \right). \quad (3.69)$$

Tanto el electrón como el protón, $H(1)$, son partículas libres, por lo que la ley de acción de masas para $H \leftrightarrow p^+ + e^-$, da:

$$\zeta_{H/V} = (1/\lambda_H^3) g e^{\chi/kT}, \quad \zeta_{p/V} = 2/\lambda_p^3, \quad \zeta_{e/V} = 2/\lambda_e^3, \quad (3.70)$$

dónde introducimos $\lambda \equiv h/\sqrt{2\pi m kT} = h/p$, la longitud de onda de Broglie para partículas térmicas de momento p , g la degeneración, y $\chi > 0$ el potencial de ionización. Los factores de dos representan los estados de espín para el electrón y el protón. En estos términos, y con $\lambda_H \simeq \lambda_p$, obtenemos:

$$\frac{n_p}{n_H} = \frac{2}{n_e \lambda_e^3} \left(\frac{2}{g} \right) e^{-\chi/kT}. \quad (3.71)$$

Consideremos las condiciones de una atmósfera estelar, de acuerdo a la ecuación 3.71. Las longitudes de onda de De Broglie se pueden estimar en

$$\lambda_e = 0.75 \times 10^{-7} \text{cm} \left(T/10^4 \text{K} \right)^{-1/2}, \quad \lambda_p = 1.74 \times 10^{-9} \text{cm} \left(T/10^4 \text{K} \right)^{-1/2},$$

para electrones y protones respectivamente a 10^4K . En el caso de los electrones, para una densidad típica $n_e \sim 10^{10} \text{cm}^{-3}$ tenemos $n_e \lambda_e \sim 10^{-10}$, reflejando el bajo nivel de ocupación del espacio fase en estas condiciones, lejos del límite de degeneración $n_e \lambda_e^3 \rightarrow 1$. Los electrones tienen una ocupación $\Delta x \Delta p \gg h$, que se puede expresar de forma exponencial, $n_e \lambda_e^3 / 2 = e^{-\xi}$, con ξ típicamente entre 10 y 30. La ec. 3.71 puede generalizarse a otros estados de ionización $i \neq 0$ y reescribirse como:

$$\frac{n_{i+1}}{n_i} = \frac{g_{i+1}}{g_i} \exp \{ \xi - \chi_i / kT \}, \quad (3.72)$$

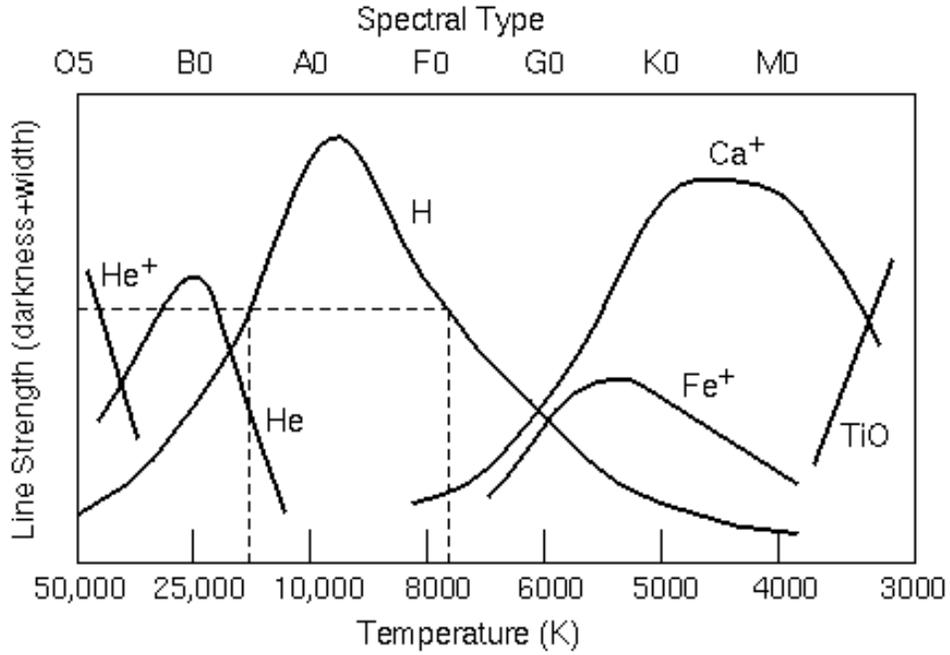


Figura 3.4: Intensidad de las principales líneas espectrales en función de la temperatura. La secuencia de tipos espectrales se define a partir de las intensidades de las distintas líneas y por tanto la relación entre intensidad de líneas y temperatura define la secuencia espectral como una secuencia de temperaturas.

dónde g_{i+1} es la degeneración de estados de la especie ionizada y g_i la de la especie no-ionizada.

Para que exista una ionización apreciable se requiere que el término dentro de la exponencial no sea mucho mayor que uno, es decir $kT \lesssim \chi_i/\xi$, indicando que la ionización ocurre a temperaturas más de un orden de magnitud por debajo de χ_i/k . La dificultad en ionizar un átomo es compensada con creces por la amplitud del espacio fase disponible para el electrón libre. Así, mientras que el potencial de ionización del hidrógeno corresponde a $13.6 \text{ eV}/k \approx 158,000 \text{ K}$, es en las estrellas tipo A, $T_e \approx 10,000 \text{ K}$ y $\xi \approx 15$, dónde la secuencia de Balmer es más pronunciada. La ecuación de Saha es básica para obtener la relación entre la intensidad de las líneas espectrales y la temperatura, correspondiendo a la relación entre tipo espectral y temperatura (fig 3.4).