



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE SAN NICOLÁS DE
HIDALGO

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS
“MAT. LUIS MANUEL RIVERA GUTIÉRREZ ”

**ENTENDIENDO EL UNIVERSO TEMPRANO: LA
RECOMBINACIÓN DEL HIDRÓGENO Y EL FREEZE-OUT
DE LOS ELECTRONES**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:
LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

PRESENTA:

JUAN LUIS CALDERÓN ZAVALA

DIRECTOR DE TESIS:

DR. FRANCISCO ANTONIO ASTORGA SÁENZ



MORELIA, MICH.

Septiembre 2021

*... Dijo pues Dios: Sea hecha la luz. Y la luz quedó hecha.
Y vio Dios que la luz era buena, y dividió la luz de las tinieblas.
A la luz la llamó día, y a las tinieblas noche; y así de la tarde aquella y de la mañana
siguiente, resultó el primer día.*

Génesis 1:3-1:5

*Aún cuando haya pasado por todo lo que pasé, no me arrepiento de los problemas en que
me metí, porque fueron ellos los que me condujeron hasta donde deseé llegar. Ahora, todo
lo que tengo es esta espada, y la entrego a cualquiera que desee seguir su peregrinación.
Llevo conmigo las marcas y las cicatrices de los combates; ellas son testimonio de lo que
viví y recompensas de lo que conquisté.*

Fragmento de El Progreso del Peregrino, de John Bunyan.

*Me gusta andar pero no sigo el camino, pues lo seguro ya no tiene misterio ...
Me gusta ir con el verano, muy lejos, pero volver donde mi madre en invierno, y ver los
perros que jamás me olvidaron ... y los abrazos que me dan mis hermanos.*

Facundo Cabral.

AGRADECIMIENTOS

A Dios, por permitirme llegar con salud y al lado de los que quiero al final de mi camino académico.

A mis padres, José Calderón Baldovinos y Ángela Zavala Medrano, por su amor, comprensión y apoyo durante toda mi vida.

A mi hermana, Ma. Guadalupe, por su apoyo moral y soporte económico y por aguantarme mi mal genio todos estos años.

Al Dr. Francisco Antonio Astorga Saénz, por introducirme al mundo de la Cosmología y ayudarme a realizar este trabajo; profesor, mentor académico y amigo, con quien estaré eternamente agradecido.

A mis sinodales: Dr. Jorge Isidro Aranda Sánchez, M.C. Gabriel Arroyo Correa, Dr. Joaquín Estevez Delgado, Dr. Héctor Igor Pérez Aguilar y Dr. Fernando Iguazú Ramírez Zavaleta, por tomarse el tiempo de leer mi tesis y por las observaciones dadas, mil gracias por su tiempo y consejos.

A mi amigo Eber (Everardo *El Viejón*), cómplice académico y de parranda, con quien tantas cosas compartí y pasé durante mi paso por la Facultad.

A mis tantos amigos de la Facultad: Carlos Javier Servín *Señor Javi*, Gustavo Paredes *Señor Gus*, Andrea Rosales *Camarada Andrea*, Luisei Jiménez *Don Luis*, Genaro Salto Alegre *Don Gena*, Antonio Rosales *Tony, Tona*, Juan Rosales Bárcenas, Rodolfo *El Inge* (ex FisMat), Francisco Javier Cira *El Cira Osuna*, Oscar Arellano *Señor Óscar*, Jorge Antonio Morfín *El Niño*, Juan Rivera *Tocayo* ... y a los que no mencioné pero llevo en mi mente y corazón, a todos gracias por su amistad y los momentos vividos, Dios los bendiga siempre.

A mis amigos de la Facultad de Ingeniería Química: Edgar, Alonso, Chema, Portillo y Fabián por nunca dejar de brindarme su amistad y apoyo.

A mi amiga y confidente María José Garfias Carmona, *Mary, Marita*, por seguir mi paso académico y alentarme a nunca rendirme en la búsqueda de este sueño.

A la institución denominada *Banda Sabrosa de Morelia*, por ser mi fuente de trabajo durante los últimos 11 años, y a mis amigos Rosendo *El Wero*, José *Tacho*, Edgar *El Chino* y a cada miembro de la banda.

Morelia, Michoacán, México, Agosto de 2021.

RESUMEN

La Recombinación se refiere al proceso que ocurrió en la época en que los electrones y protones estaban totalmente ionizados por la radiación térmica y al descender la temperatura del universo, los electrones se unen con los protones para formar átomos de hidrógeno. Este proceso es importante pues es seguido del llamado Desacoplamiento, que es cuando los fotones dejan de interactuar con la materia en estado ligado y el universo se hace transparente a la radiación. Este es el origen de la Radiación Cósmica de Fondo, una de las evidencias observacionales del Big Bang.

La Recombinación también deja una fracción de ionización residual de electrones libres, fundamental para la formación de hidrógeno molecular H_2 , que es el principal agente en la refrigeración del gas primordial, que al enfriarse colapsa en nubes de H_2 y da paso a la formación de las primeras estructuras cósmicas.

Se puede estudiar la evolución de este proceso desde dos enfoques: dentro del equilibrio y fuera de éste. El análisis en el equilibrio se hará a través de la ecuación de Saha, suponiendo el proceso en un estado de equilibrio térmico y químico de un gas de partículas sin interacciones y solo dos especies: protones y electrones. Sin embargo, esta aproximación tiene sus fallos y no representa la realidad de nuestro universo.

Con el uso de la Teoría Cinética, se puede estudiar el proceso haciendo el anclaje con una ecuación de Boltzmann dinámica que considere colisiones entre especies, rompa el estado de equilibrio e involucre un poco más de física que Saha.

En este trabajo, se harán ambos análisis: dentro y fuera del equilibrio; se verán pros y contras del equilibrio y se hará énfasis en el proceso fuera del equilibrio, pues es éste el que nos describe la realidad de nuestro Universo y concuerda con las observaciones y mediciones cosmológicas actuales.

Las aportaciones principales del trabajo serán encontrar y acotar el tamaño de la fracción residual de electrones, cuando ocurre y enfatizar su relación con la formación de H_2 , primordial para procesos cosmológicos posteriores.

Palabras clave: Formación de hidrógeno, Saha, Boltzmann, equilibrio, teoría cinética.

ABSTRACT

Recombination refers to the process that occurred at the time when electrons and protons were totally ionized by thermal radiation and as the temperature of the universe decreased, the electrons bond with protons to form hydrogen atoms. This process is important because it is followed by the so-called Decoupling, which is when photons stop interacting with matter in a bound state and the universe becomes transparent to radiation. This is the origin of Cosmic Background Radiation, one of the observational evidences of the Big Bang.

Recombination also leaves a residual ionization fraction of free electrons, fundamental for the formation of molecular hydrogen H_2 , which is the main agent in refrigeration of primordial gas, which when cooling, collapses into H_2 clouds and leads to the formation of the first cosmic structures.

The evolution of this process can be studied from two approaches: within equilibrium and outside equilibrium. The analysis in equilibrium will be done through the Saha equation, assuming the process in a state of thermal and chemical equilibrium of a gas of particles without interactions and only two types: protons and electrons. However, this approach has its flaws and does not represent the reality of our universe.

Using Kinetic Theory, the process can be studied by anchoring with an equation of Boltzmann dynamics that considers collisions between species, breaks the equilibrium state and involves a little more physics than Saha.

In this work, both analyzes will be done: in and out of equilibrium; pros and cons of each equilibrium and emphasis will be placed on the process out of the equilibrium, since this is what describes the reality of our Universe and agrees with current cosmological observations and measurements.

The main contributions of the work will be to find and limit the size of the residual fraction electrons, when it occurs and emphasize its relationship with the formation of H_2 , essential for later cosmological processes.

Keywords: Hydrogen formation, Saha, Boltzmann, equilibrium, kinetic theory.

Índice general

1. Introducción	8
2. La Ecuación de Saha	12
2.1. La Función de Partición	12
2.2. Función de Partición de un Gas Ideal Clásico	15
2.3. Energía Libre para un Gas Ideal Clásico y Potencial Químico	17
2.4. La Recombinación	19
2.5. Reescribiendo Saha	21
2.6. Evolución	23
3. Teoría Cinética y la Ecuación de Boltzmann	26
3.1. Elementos de Teoría Cinética	26
3.1.1. Colisiones Binarias	30
3.1.2. La Ecuación de Transporte de Boltzmann	35
3.2. Formalismo de la Teoría Cinética	37
3.2.1. De Liouville a BBGKY	37
3.2.2. La Jerarquía BBGKY	40
3.2.3. La Ecuación de Boltzmann	43
3.2.4. Equilibrio y Equilibrio Detallado	46
3.2.5. La Ecuación de Boltzmann Cuántica	47
3.3. La Ecuación de Boltzmann en un Universo en Expansión	48
3.3.1. Teoría Cinética en el Universo de FWR	49
3.3.2. La Ecuación de Boltzmann en el Universo de FWR	49
3.3.3. La Ecuación para la Densidad de Partículas	52
3.3.4. La Ecuación de Boltzmann Simplificada	53
3.3.5. La Ecuación de Boltzmann para la Recombinación	55
4. La Recombinación del Hidrógeno fuera del equilibrio y el <i>freeze-out</i> de los electrones: un enfoque cinético	58
4.1. Revisión a la Recombinación en el Equilibrio	58
4.2. La Recombinación Fuera del Equilibrio	62

4.2.1.	La Recombinación <i>a la Mukhanov</i> : un primer vistazo al proceso fuera del equilibrio.	65
4.2.2.	Recombinación <i>a la Peebles</i> : Aproximación de Tres Niveles.	71
4.2.3.	Recombinación <i>a la Peebles</i> : Aproximación Multinivel.	78
4.2.4.	Recombinación <i>a la Weinberg</i>	81
4.2.5.	Recombinación <i>a la HyRec Code</i>	91
4.3.	Comparando los resultados	93
5.	El Papel Cosmológico del <i>freeze-out</i> y La Fracción Residual de Electrones	96
5.1.	El Papel del H_2 como Refrigerante.	97
5.2.	La Química del Universo Temprano.	99
5.2.1.	Química del H_2	99
5.2.2.	Canales de Formación del H_2	99
5.3.	Procesos de Enfriamiento.	100
5.3.1.	Enfriamiento con H_2	101
5.4.	Discusión.	101
6.	Conclusiones	103
A.	Obtención de la Energía Libre de Helmholtz y el Potencial Químico para un Gas Ideal Clásico	107
A.1.	Energía Libre	107
A.2.	Potencial Químico	108
B.	Digresiones	109
B.1.	La densidad de fotones n_γ	109
B.2.	La densidad de bariones n_b	112
B.3.	La razón barión-fotón η	113
C.	Unidades Naturales en Cosmología	115
C.1.	Fundamento de las Unidades Naturales	115
C.2.	Ejemplos	117
	Bibliografía	120

Capítulo 1

Introducción

En un universo en expansión, en el pasado tenía mayor densidad de radiación y de materia y tenía mayor temperatura. En algún momento la temperatura era tan alta que toda la materia del universo estaba ionizada y a medida que se expandía la temperatura descendió a niveles que permitieron que los bariones pasaran del estado ionizado al estado ligado con los electrones. Ese instante es lo que se llama época de recombinación (en realidad debiera llamarse época de combinación ya que nunca antes los bariones habían estado ligados).

Antes de la recombinación la densidad de los bariones y de los electrones libres (que debiera ser la misma en un universo neutro) era suficientemente alta como para encontrarse en equilibrio térmico. A su vez los fotones y los electrones interactuaban frecuentemente de modo que la radiación tenía un espectro de cuerpo negro a la temperatura de los bariones. A medida que los bariones se recombinan la densidad de los electrones disminuye y en algún instante los fotones cesan de interactuar con los bariones. Esta es la época de desacoplamiento de los fotones.

Antes del desacoplamiento los fotones no podían viajar por mucho tiempo sin sufrir una interacción: el universo era opaco. Luego del desacoplamiento los fotones comienzan a viajar sin obstáculos y el universo se hace transparente a la radiación.

Estamos ahora en posición de discutir el origen de la Radiación Cósmica de Fondo, que es justamente en el momento del desacoplamiento. El ingrediente crucial que necesitamos es que un átomo de hidrógeno tenga una energía de ionización mínima; es bien sabido que dicha energía es de alrededor de 13.6 eV ; si un electrón encuentra su camino hacia el estado fundamental, entonces se necesitan 13.6 eV de energía para liberarlo. Como mínimo, se necesitan 10.2 eV para elevarlo a su primer estado excitado, desde el cual otros 3.4 eV lo ionizarán. Mientras el universo esté lo suficientemente caliente, los fotones tendrán esta energía fácilmente y podrán mantener el hidrógeno completamente ionizado.

Comencemos considerando un momento oportuno, por ejemplo, cuando el universo tenía una millonésima parte de su tamaño actual. En ese momento la temperatura habría sido de aproximadamente $3,000,000 \text{ K}$.

Tal temperatura era lo suficientemente alta como para que la energía típica de un fotón en la distribución térmica fuera considerablemente más que la energía de ionización de los átomos de hidrógeno, por lo que los átomos no hubieran podido existir en esa época. Cualquier electrón que intente unirse a un protón se desligaría de inmediato por colisión con un fotón de luz.

El universo en ese momento era por lo tanto un mar de núcleos y electrones libres, y porque los fotones interactuaban fuertemente con los electrones libres (a través de la dispersión de Thomson), la trayectoria libre media de cualquier fotón era corta. Así que imaginemos un mar de partículas que chocan frecuentemente, formando un plasma ionizado.

Cuando el universo se expandió y se enfrió, los fotones de luz perdieron energía y se hicieron menos y menos capaces de ionizar cualquier átomo que se formaba. Finalmente todos los electrones se abrieron paso hacia su estado fundamental y los fotones ya no podían interactuar en lo absoluto.

En un corto intervalo de tiempo, el universo cambió repentinamente de opaco a transparente por completo. Luego, los fotones pudieron viajar sin obstáculos durante el resto de la evolución del universo. Este proceso se conoce como **desacoplamiento**.

La estimación más simple de cuándo se formó la Radiación Cósmica de Fondo se obtiene al equiparar la energía media del fotón a una temperatura dada con la energía de ionización. La energía media de un fotón en una distribución de cuerpo negro a una temperatura T es $E \approx 3k_B T$. Como $k_B = 8,62 \times 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$, la temperatura en la formación de la Radiación Cósmica de Fondo sería:

$$T \approx \frac{13,6\text{eV}}{3k_B} = 50,000\text{K} , \quad (1.0.0.1)$$

si éste procedimiento fuera válido. De hecho, la estimación no es lo suficientemente precisa, por que aún se tiene que explicar que hay muchos más fotones en el universo que electrones o bariones, aproximadamente por un factor de 10^9 más. Debido a esto, incluso cuando la energía media de los fotones cayó por debajo de 13.6 eV , todavía había fotones de alta energía en la cola de distribución capaces de ionizar cualquier átomo que se formara.

Sin embargo, al menos podemos estimar el orden del efecto simplemente usando el factor de supresión de Boltzmann, asumiendo que solo necesitamos algo como un fotón ionizante por átomo para mantener el universo ionizado. Tenga en cuenta que los fotones de alta energía mantienen a los electrones alejados de los átomos, y luego todos los fotones restantes pueden interactuar con los electrones libres creados de este modo. En su forma más cruda, la supresión de Boltzmann, dice que la fracción de fotones con energía más de I (donde I es la energía de ionización mínima) se da aproximadamente por $\exp(-I/k_B T)$, lo que lleva a la expresión:

$$T = \frac{13,6\text{eV}}{k_B \ln(1,7 \times 10^9)} \approx 7,400\text{K} . \quad (1.0.0.2)$$

Podemos mejorar esta estimación integrando la función de distribución de fotones

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\exp(hf/k_B T) - 1}, \quad (1.0.0.3)$$

que indica un factor importante para la supresión de Boltzmann, reduciendo la estimación a 5,700 K. De hecho, esto es bastante cercano a la respuesta correcta, que es que el desacoplamiento ocurrió cuando el universo estaba a una temperatura de alrededor de 3,000 K. Esta temperatura se conoce como temperatura de desacoplamiento, que denotaremos por T_{dec} .

Un cálculo preciso de la temperatura de desacoplamiento T_{dec} requiere mucha más física. Las opciones vistas hasta ahora no son del todo satisfactorias.

Debemos reconocer que hay dos procesos separados en marcha, que hasta ahora hemos tomado como el mismo. La **Recombinación** se refiere a la época en que los electrones se unieron a los núcleos para crear átomos (sin embargo, la *recombinación* es un nombre inapropiado ya que los electrones y los núcleos nunca habían estado ligados). El **Desacoplamiento** se refiere a la época después de la cual los fotones no se dispersarán nuevamente, es decir, dejarán de interactuar con los bariones que tienen estados ligados. Si la recombinación fuera instantánea y completa, las dos coincidirían, pero en la práctica, cada proceso lleva algún tiempo y el desacoplamiento sigue a la recombinación. Un cálculo mejorado de la época de recombinación utiliza la ecuación de Saha, que calcula la fracción de ionización de un gas en equilibrio térmico.

La ecuación de Saha se obtiene suponiendo que solo el hidrógeno está presente, y considera las funciones de distribución de hidrógeno, protones libres y electrones, que se supone que están en equilibrio térmico y químico (se debe incluir un potencial químico para hacer cumplir conservación del número de barión).

Definiendo la fracción de ionización como $X \equiv n_p/n_b$, donde n_p y n_b son las densidades de protones libres y bariones, se puede demostrar que la abundancia de equilibrio es¹

$$\frac{1-X}{X^2} \simeq 3,8 \frac{n_b}{n_\gamma} \left(\frac{k_B T}{m_e c^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{13,6 eV}{k_B T} \right). \quad (1.0.0.4)$$

Sin embargo, en la realidad, no es del todo cierta la evolución que predice la ecuación de Saha. El proceso debe salir del equilibrio en algún momento y dejar una fracción residual de electrones necesaria para que sigan adelante procesos cosmológicos siguientes, cosa que Saha no hace.

Además, Saha considera un gas de partículas ideal y sin interacciones, por lo que hay que considerar un análisis con Teoría Cinética de Boltzmann que considere las colisiones entre especies y rompa el equilibrio en algún momento.

Las ecuaciones que resultan (llamadas cinéticas o de Boltzmann) de lo anterior son del tipo

¹En el siguiente capítulo, se verán todos los detalles y formalidades que llevan a obtener dicha ecuación.

$$\frac{dX_e}{dt} = \left[(1 - X_e)\beta - X_e^2 n_b \alpha^{(2)} \right], \quad (1.0.0.5)$$

y dan un enfoque más realista y detallado que Saha. En la ecuación anterior, X_e es la fracción de electrones libres, β es la tasa de fotoionización térmica del hidrógeno, n_b es la densidad de bariones (o de hidrógeno total) y $\alpha^{(2)}$ es la tasa de recombinación de átomos de hidrógeno.

Entonces, la recombinación fuera del equilibrio sí deja una fracción residual de electrones fundamental y necesaria para procesos posteriores de la historia del universo, tales como el Desacoplamiento que da origen al CMB y la formación de las primeras estrellas y galaxias.

La integración numérica de las ecuaciones cinéticas nos permite calcular el valor del congelamiento, además de rastrear su evolución en general y de manera más rigurosa y precisa que con Saha.

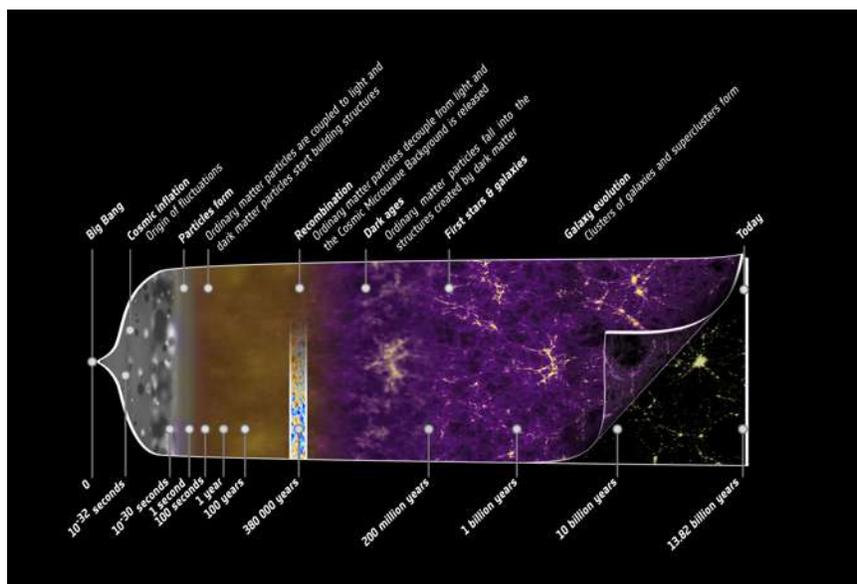


Figura 1.1: Historia del Universo: la figura muestra el momento de interés de este trabajo (el proceso de recombinación) en escala de tiempo [ESA Planck 2013].

La estructura del trabajo es la siguiente: primero, análisis mecánico-estadístico del proceso en el equilibrio para obtener la ecuación de Saha y ver su comportamiento, seguido de un análisis de la teoría cinética para estudiar la recombinación fuera del equilibrio.

Seguimos con un tratamiento desde distintos puntos de vista de la recombinación fuera del equilibrio, análisis de su comportamiento y la obtención de la cota de la fracción residual y del congelamiento o *freeze-out* de los electrones, para finalmente, ver que papel tiene dicha fracción residual en los procesos cosmológicos que siguen.

Capítulo 2

La Ecuación de Saha

2.1. La Función de Partición

En mecánica estadística, la función de partición Z es un funcional de un sistema en equilibrio. Su principal interés radica en que, una vez conocida la expresión para Z del sistema, de ella se pueden derivar las funciones de estado, como la energía libre, energía interna, presión, temperatura, entropía, etcétera. Fue introducida por primera vez por Boltzmann, quien la denominó *Zustandsumme* que se traduce como <<suma de estados>> y que se interpreta como “*suma sobre todos los estados posibles del sistema*”. Su símbolo Z viene precisamente de su nombre original en alemán.

La función de partición viene de la probabilidad de estados del sistema y de observar algunos potenciales termodinámicos.

Consideremos un sistema A con energía total y constante U_0 y temperatura T denominado por *sistema total A*. Tomemos una región de ese sistema total que llamaremos *subsistema S* que tiene energía ϵ_S . Entonces el *reservorio* o la *reserva* del sistema será la parte del sistema total menos la del subsistema, es decir, $R = A - S$, de manera análoga con la energía, que denotamos U_R tendremos $U_R = U_0 - \epsilon_S$.

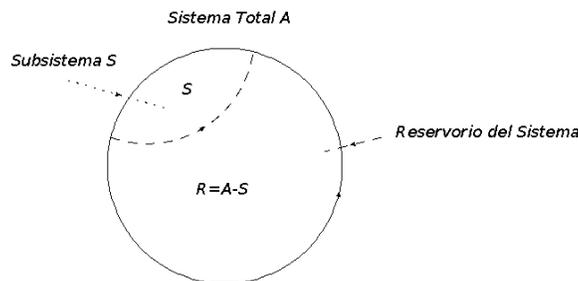


Figura 2.1: Diagrama del reservorio de energía de un sistema A con energía total y constante U_0 y temperatura T .

¿Cuál es la probabilidad de que S se encuentre en un estado de energía ε_S ?

$P(\varepsilon_S)$ es la probabilidad del subsistema S esté en un estado específico de energía ε_S .

Con el estado del subsistema S especificado, el reservorio R todavía puede estar en cualquiera de un gran número de estados microscópicos compatibles con el valor energético ε_0 . Denotamos el número de estos estados como Ω , que es el número de estados accesibles al reservorio y $\Omega \rightarrow g_R(U_0 - \varepsilon_0)$; la magnitud Ω recibe el nombre de *número de microestados*.

Consideramos un gas de N partículas, cada partícula tendrá 3 coordenadas de momento y de 3 posición \mathbb{P}_i y \mathbb{X}_i , $i = 1, \dots, N$. En total las N partículas corresponden a $6N$ coordenadas. Esto nos lleva a la idea de espacio fase.

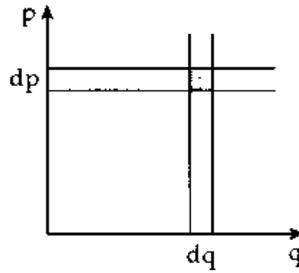


Figura 2.2: Espacio fase.

Dicho espacio será $6N$ -dimensional. Cada punto caracteriza a un estado del sistema completo de las N partículas y es un *microestado*. Ahora, cuanto mayor sea el número de estados disponibles para el reservorio, mayor será la probabilidad de que el reservorio asuma ese valor de energía particular U_R (y, por lo tanto, que el subsistema S asuma el valor de energía correspondiente ε_S). Además, dado que es probable que ocurran varios estados posibles (con un valor de energía dado), la probabilidad sería directamente proporcional al número Ω , entonces:

$$P(\varepsilon_S) \sim \Omega = g_R(U_0 - \varepsilon_S). \quad (2.1.0.1)$$

Vamos a trabajar con la reserva (es equivalente, pero tiene la ventaja de tener la energía total). Tomemos el cociente de dos subestados ε_1 y ε_2 :

$$P(\varepsilon_S) \rightarrow P(U_0 - \varepsilon_S) \Rightarrow \frac{P(\varepsilon_1)}{P(\varepsilon_2)} = \frac{P(U_0 - \varepsilon_1)}{P(U_0 - \varepsilon_2)} \sim \frac{g_R(U_0 - \varepsilon_1)}{g_R(U_0 - \varepsilon_2)} = \frac{\Omega(U_0 - \varepsilon_1)}{\Omega(U_0 - \varepsilon_2)}. \quad (2.1.0.2)$$

La entropía está dada por $s = k \ln \Omega$ donde k es la constante de Boltzmann. Entonces:

$$\begin{aligned} S_R(U_0 - \varepsilon_1) &= k \ln g_R(U_0 - \varepsilon_1) \\ S_R(U_0 - \varepsilon_2) &= k \ln g_R(U_0 - \varepsilon_2) \end{aligned} \quad (2.1.0.3)$$

$$\Rightarrow g_R = \exp\left[\frac{S_R(U_0 - \varepsilon_S)}{k}\right] \Rightarrow \frac{P(\varepsilon_1)}{P(\varepsilon_2)} = \exp\left(\frac{1}{k} [S_R(U_0 - \varepsilon_1) - S_R(U_0 - \varepsilon_2)]\right). \quad (2.1.0.4)$$

Expandiendo alrededor de $S(U_0)$:

$$\begin{aligned} S_R(U_0 - \varepsilon_1) &= S_R(U_0) - \varepsilon_1 \frac{\partial S_R}{\partial U} + \dots \\ S_R(U_0 - \varepsilon_2) &= S_R(U_0) - \varepsilon_2 \frac{\partial S_R}{\partial U} + \dots \end{aligned} \quad (2.1.0.5)$$

Si ε es pequeño, despreciamos los demás términos

$$\Rightarrow S_R(U_0 - \varepsilon_1) - S_R(U_0 - \varepsilon_2) = (-\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \frac{\partial S}{\partial U} \Big|_{U_0}. \quad (2.1.0.6)$$

De la termodinámica, sabemos que $dU = TdS - PdV$, como el sistema tiene volumen fijo, tenemos que $dU = TdS \Rightarrow \frac{dS}{dU} = \frac{1}{T}$, sustituyendo esto en lo anterior:

$$S_R(U_0 - \varepsilon_1) - S_R(U_0 - \varepsilon_2) = -(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \frac{1}{T}. \quad (2.1.0.7)$$

Sustituyendo (2.1.0.7) en (2.1.0.4), resulta que

$$\frac{P(\varepsilon_1)}{P(\varepsilon_2)} = \frac{e^{-\varepsilon_1/kT}}{e^{-\varepsilon_2/kT}}. \quad (2.1.0.8)$$

Al checar el comportamiento de (2.1.0.8), numerador y denominador van como una exponencial, por lo tanto

$$P(\varepsilon_S) \sim e^{-\varepsilon_S/kT}. \quad (2.1.0.9)$$

La suma de todas las probabilidades debe ser 1, es decir $\sum_S P(\varepsilon_S) = 1$, usando esto como factor de normalización para (2.1.0.9)

$$P(\varepsilon_S) = \frac{e^{-\varepsilon_S/kT}}{\sum_S e^{-\varepsilon_S/kT}}. \quad (2.1.0.10)$$

Obtenemos la *suma sobre todos los estados posibles* por

$$Z(T) \equiv \sum_S e^{-\varepsilon_S/kT} \quad (2.1.0.11)$$

La ecuación (2.1.0.11) es la **Función de Partición** para un gas de N partículas. Esta función nos da una idea global del sistema. La exponencial tiene un signo negativo, va decayendo y converge a cero.

2.2. Función de Partición de un Gas Ideal Clásico

Comenzamos con un sistema físico relativamente simple, a saber, un gas monoatómico clásico de N partículas idénticas. En mecánica clásica, las variables son continuas y la suma en (2.1.0.11) debe ser sustituida por una integral. Entonces, la función de partición de un gas ideal con N partículas clásicas toma la forma:

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int e^{-\frac{1}{kT}H(q,p)} dw, \quad (2.2.0.1)$$

donde:

- $dw = dq_1 dq_2 \dots dq_{3N} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N}$ es el elemento de volumen del espacio fase, lo que hace que la integral se convierta en una integral múltiple, a saber serán $6N$ integrales.
- N es el número de partículas idénticas.
- $N!$ es el factor de Gibbs y $1/N!$ corrige el sobreconteo de estados.
- h es la constante de Planck; del Principio de Incertidumbre de Heisenberg, sabemos que $dqdp \geq h$, si $h = 0$, habría precisión total y esto no es posible, por lo que lo más pequeño del producto anterior es $dqdp = h$. En el caso de microestados continuos, consideramos que el volumen de un microestado en el espacio físico de $6N$ dimensiones es h^{3N} , es decir, el elemento más pequeño de volumen del espacio fase es h^{3N}
- $H(q, p)$ es el Hamiltoniano del sistema completo (N partículas). Recordemos que el Hamiltoniano se asocia con la energía total del sistema, la parte cinética más la parte potencial

$$H(q, p) = k(q, p) + V(q, p). \quad (2.2.0.2)$$

Ignorando la interacción entre las componentes pues es un gas muy diluido, tendremos que la parte potencial será cero, $V = 0$ y la energía cinética para un gas clásico es

$$k = \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m} . \quad (2.2.0.3)$$

Introduzcamos lo anterior en Z de la ecuación (2.2.0.1) y reescribamos:

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int \int \dots \int \int e^{-\frac{1}{kT} \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}} dq_1 dq_2 \dots dq_{3N} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N} . \quad (2.2.0.4)$$

Hay $3N$ integrales sobre q y $3N$ integrales sobre p . Respecto a las coordenadas q , cada 3 q_i consecutivas darán como resultado en la integración sobre q el volumen V , y dado que hay $3N$ integrales sobre q tomando $3q_i$ consecutivas cada una, el resultado de la integración sobre q es V^N , es decir:

$$\underbrace{\underbrace{dq_1 dq_2 dq_3}_V \underbrace{dq_4 dq_5 dq_6}_V \dots \underbrace{dq_{3N-2} dq_{3N-1} dq_{3N}}_V}_{\text{Cada } 3q's, N \text{ veces}}$$

Sustituyendo esto en Z :

$$Z = \frac{V^N}{N!h^{3N}} \int \dots \int e^{-\frac{1}{kT} \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N} . \quad (2.2.0.5)$$

El integrando tiene una sumatoria, que por leyes de los exponentes podemos ver como:

$$e^{-\frac{1}{kT} \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}} = e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_1^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_2^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_3^2}{2m}} \dots e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_{3N}^2}{2m}} . \quad (2.2.0.6)$$

De igual manera, cada 3 p_i consecutivos forman la norma \mathbb{P} de cada componente de momento, como tomamos una integral triple para 3 componentes consecutivas de momento, y esto ocurre N veces, da las $3N$ componentes, es decir:

$$\underbrace{e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_1^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_2^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_3^2}{2m}} \dots e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_{3N-2}^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_{3N-1}^2}{2m}} e^{-\frac{1}{kT} \frac{p_{3N}^2}{2m}}}_{\mathbb{P}} \quad (2.2.0.7)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int \int \int e^{-\frac{1}{kT} \frac{\mathbb{P}^2}{2m}} dp_1 dp_2 dp_3}_{N \text{ veces}} \Rightarrow \left[\int \int \int e^{-\frac{1}{kT} \frac{\mathbb{P}^2}{2m}} dp_1 dp_2 dp_3 \right]^N . \quad (2.2.0.8)$$

Trabajemos con esta parte antes de sustituir en Z . Para realizar la integral triple, vayamos a coordenadas esféricas en \mathbb{P} usando el Teorema de Cambio de Variable para Integrales Triples:

$$\begin{aligned} \left[\int \int \int e^{-\frac{1}{kT} \frac{p^2}{2m}} dp_1 dp_2 dp_3 \right]^N &= \left[\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-\frac{1}{kT} \frac{p^2}{2m}} p^2 \sin \phi dp d\theta d\phi \right]^N \\ &= \left[\left(\int_0^\pi \sin \phi d\phi \right) \left(\int_0^{2\pi} d\theta \right) \left(\int_0^\infty e^{-\frac{1}{kT} \frac{p^2}{2m}} p^2 dp \right) \right]^N = \left[4\pi \int_0^\infty e^{-\frac{1}{kT} \frac{p^2}{2m}} p^2 dp \right]^N. \end{aligned} \quad (2.2.0.9)$$

Usando el siguiente resultado:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha p^2} dp = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (2.2.0.10)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \alpha} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha p^2} dp = - \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha p^2} p^2 dp \quad \text{y} \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right) = -\frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}}. \quad (2.2.0.11)$$

Dado que son límites simétricos y que la función es par, tenemos que

$$2 \int_0^\infty e^{-\alpha p^2} p^2 dp = \frac{1}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}}. \quad (2.2.0.12)$$

Con $\alpha = 1/(2mkT)$ y sustituyendo en (2.2.0.9)

$$\left[\int \int \int e^{-\frac{1}{kT} \frac{p^2}{2m}} dp_1 dp_2 dp_3 \right]^N = \left[4\pi \frac{1}{4} \sqrt{\pi} (2mkT)^{3/2} \right]^N = \left[(2\pi mkT)^{3/2} \right]^N. \quad (2.2.0.13)$$

Finalmente, sustituyendo el resultado anterior en (2.2.0.5) y reordenando, obtenemos la Z deseada:

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{h^3} (2\pi mkT)^{3/2} \right]^N \quad (2.2.0.14)$$

La expresión anterior es la **Función de Partición de un Gas Ideal Clásico**. Como se puede observar, Z depende de las variables termodinámicas, es decir, $Z = Z(N, V, T)$.

2.3. Energía Libre para un Gas Ideal Clásico y Potencial Químico

La energía libre de Helmholtz describe un sistema isotérmico e isocórico cerrado, por lo que es una función de la temperatura, el volumen y la cantidad de moléculas; se define por:

$$A(N, V, T) = U - TS . \quad (2.3.0.1)$$

Para un proceso infinitesimal reversible:

$$dA = dU - TdS - SdT , \quad (2.3.0.2)$$

y de la energía libre de Gibbs, $dU - TdS = -PdV + \mu dN$; sustituyendo en la energía libre de Helmholtz, llegamos a:

$$\boxed{dA = -SdT - PdV + \mu dN} \quad (2.3.0.3)$$

por lo que

$$\begin{aligned} S &= -\left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_{V,N} \\ P &= -\left(\frac{\partial A}{\partial V}\right)_{T,N} \\ \mu &= \left(\frac{\partial A}{\partial N}\right)_{T,V} \end{aligned} \quad (2.3.0.4)$$

La ecuación en la cajita de (2.3.0.4) corresponde al potencial químico μ , ligado al cambio en N , las partículas de una especie.

La energía libre de Helmholtz está determinada por la función de partición canónica; para nuestro caso, usando la función de partición de un gas ideal clásico, A está dada por¹

$$\boxed{A(N, V, T) = -kT \ln z = NkT \left[\ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \right] - 1 \right]} \quad (2.3.0.5)$$

Ya que obtuvimos la energía libre de Helmholtz, estamos en posición de calcular el potencial químico μ de la función de partición del gas ideal clásico²:

$$\boxed{\mu = \left(\frac{\partial A}{\partial N}\right)_{T,V} = kT \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \right]} \quad (2.3.0.6)$$

Podemos simplificar la expresión del potencial químico con valores conocidos: sea $n \equiv \frac{N}{V}$ la densidad de partículas, el número de partículas por unidad de volumen. La *longitud de onda de De Broglie o longitud de onda térmica* se define como

¹Ver deducción en apéndice A.

²Ver deducción en apéndice A.

$$\lambda_T = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi mkT}}, \quad (2.3.0.7)$$

y claramente está en la función del potencial químico, entonces sustituyendo lo mencionado en (2.3.0.6)

$$\boxed{\mu = kT \ln(n\lambda^3)} \quad (2.3.0.8)$$

La expresión (2.3.0.8) es el potencial químico para un gas de partículas.

Si la energía libre puede ser aproximada como la suma de las energías libres de cada especie individual como en un gas ideal o una solución diluida, entonces podemos derivar una relación simple entre las densidades de las especies en el equilibrio. Si añadimos dos contribuciones más a la energía del sistema (contribuciones no termodinámicas), la energía libre de Helmholtz de un gas ideal clásico consistente de moléculas con grados internos de libertad puede escribirse como:

$$A(N, V, T) = N\varepsilon + NkT \ln(n\lambda^3) - NkT \ln j(T), \quad (2.3.0.9)$$

donde ε es la energía del estado fundamental o energía propia, λ es la longitud de onda térmica y $j(T)$ es la función de partición de los grados de libertad internos de la molécula (spín, color, etc.). Como la energía propia de cualquier molécula es m_0c^2 , tenemos que

$$A(N, V, T) = Nm_0c^2 + NkT \ln(n\lambda^3) - kT \ln Z_{int}^N, \quad (2.3.0.10)$$

donde Z_{int} es la función de partición de los grados de libertad internos. Las N son para considerar todas las partículas. Siempre que tengamos una función de partición el factor de energía es kT .

Entonces, el nuevo potencial químico está dado por:

$$\boxed{\mu = \left(\frac{\partial A}{\partial N}\right)_{T,V} = m_0c^2 + kT \ln(n\lambda^3) - kT \ln Z_{idof}} \quad (2.3.0.11)$$

Z_{idof} (*idof - internal degrees of freedom*) es la función de partición de una partícula y ya no depende de N , está asociada al **total de estados + idof=spín + tipo de partícula**.

2.4. La Recombinación

La Recombinación se refiere a la época en que los electrones se unieron a los núcleos para formar átomos. La reacción de recombinación (esto es, el inverso de la reacción de fotoionización del hidrógeno) es



Condición de Equilibrio Termodinámico: En términos de los potenciales, la relación de equilibrio químico estará dada por

$$\mu_{e^-} + \mu_p = \mu_H + \mu_\gamma \overset{0}{.} \quad (2.4.0.2)$$

El potencial químico para los fotones es cero, ¿por qué?.

Un gas ideal con masa con un solo tipo de partícula está descrito únicamente por tres funciones de estado como la temperatura, el volumen y el número de partículas. Sin embargo, para un cuerpo negro, la distribución de energía está establecida por la interacción de los fotones con la materia, por lo general, las paredes del contenedor. En esta interacción, el número de fotones no se conserva.

Es claro que una vez que una región de las paredes del contenedor con varios átomos absorbe un número dado de fotones, no vuelve necesariamente a emitir el mismo número de fotones. Supongamos que absorbe una cierta cantidad de fotones en un cierto tiempo. Esto aumenta la energía de esa región. Esta energía puede ciertamente ser devuelta a la radiación o puede ser conferida a otra parte del cuerpo por vibraciones o colisiones entre los átomos. A su vez, un grupo de átomos puede recibir energía de otra parte del cuerpo y convertirla en fotones. Lo importante, primero, es que la frecuencia de los fotones absorbidos y emitidos es la misma (dentro de un intervalo), y segundo, que en promedio la energía por unidad de tiempo que se absorbe sea la misma que se emita. La conclusión es pues que en el estado de equilibrio del gas de fotones dentro de la cavidad de cuerpo negro, el número de fotones no es una constante. Por lo tanto, el estado termodinámico no puede depender de tal cantidad. El número promedio de fotones sí es fijo y, por lo tanto, este está determinado por el estado de equilibrio en cuestión. Esto explica por qué sólo la temperatura y el volumen especifican el estado termodinámico. Otra consecuencia es que como N no es una variable independiente, entonces el potencial químico del gas de fotones es cero, es decir, la energía libre de Helmholtz $A = A(T, V)$ y, por lo tanto [Gratton 2018]

$$\mu_\gamma = \left(\frac{\partial A}{\partial N} \right)_{T,V} = 0. \quad (2.4.0.3)$$

El espín proporciona una medida del momento angular intrínseco de toda partícula. Sabemos que el espín del electrón es $s_{e^-} = 1/2$ y cuenta con dos estados de espín: espín arriba y espín abajo, por lo que, por la fórmula para los estados de espín, $s = (2s + 1)$, resulta en dos estados de espín; de manera análoga ocurre con el protón p^+ .

El átomo de hidrógeno está compuesto por un protón y un electrón, el número de estados de espín del hidrógeno será la multiplicación de los de sus componentes, lo que resulta en 4.

Relacionando esto con la Z_{idof} y con el potencial químico de cada componente de la reacción de recombinación tenemos:

$$\begin{aligned}
\mu_e &= m_e c^2 + kT \ln(n_e \lambda_e^3) - kT \ln 2 \\
\mu_p &= m_p c^2 + kT \ln(n_p \lambda_p^3) - kT \ln 2 \\
\mu_H &= m_H c^2 + kT \ln(n_H \lambda_H^3) - kT \ln 4 .
\end{aligned} \tag{2.4.0.4}$$

De la ecuación del equilibrio (2.4.0.2)

$$m_e c^2 + kT \ln(n_e \lambda_e^3) - kT \ln 2 + m_p c^2 + kT \ln(n_p \lambda_p^3) - kT \ln 2 = m_H c^2 + kT \ln(n_H \lambda_H^3) - kT \ln 4 . \tag{2.4.0.5}$$

Operando algebraicamente

$$\frac{(m_e + m_p - m_H)c^2}{kT} = \ln\left(\frac{n_H \lambda_H^3}{n_e \lambda_e^3 n_p \lambda_p^3}\right) . \tag{2.4.0.6}$$

La energía de ionización es $I = (m_e + m_p - m_H)c^2$, esto implica

$$e^{I/kT} = \frac{n_H}{n_e n_p} \frac{\lambda_H^3}{\lambda_e^3 \lambda_p^3} . \tag{2.4.0.7}$$

Como $m_H \sim m_p$ tenemos que $\lambda_H^3/\lambda_p^3 \sim 1$ lo que resulta en

$$\boxed{n_H = n_e n_p \lambda_e^3 e^{I/kT}} \tag{2.4.0.8}$$

que es conocida como la ecuación de *pre-Saha*, donde n_H es la densidad de hidrógeno H , n_e la densidad de electrones libres, n_p la densidad de protones libres y $\lambda_e = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi m_e kT}}$ la longitud de onda térmica de De Broglie para el electrón. Libres quiere decir que no se han formado estados ligados.

2.5. Reescribiendo Saha

Consideremos la fracción de ionización

$$X \equiv \frac{n_p}{n_b} = \frac{\overbrace{n_p}^{\text{estados libres}}}{\underbrace{n_p + n_H}_{\text{total de protones}}} , \tag{2.5.0.1}$$

donde n_b es la densidad de bariones. Asumimos conservación de la carga, la carga neta para este sistema es cero por lo que $n_p = n_e$ y podemos reescribir la fracción de ionización como

$$X_e = \frac{n_e}{n_e + n_H}. \quad (2.5.0.2)$$

Manipulando algebraicamente:

$$1 - X_e = 1 - \frac{n_p}{n_p + n_H} = \frac{n_p + n_H - n_p}{n_p + n_H} = \frac{n_H}{n_b} \quad (2.5.0.3)$$

$$\frac{1 - X_e}{X_e^2} = \frac{n_H}{n_b} \frac{1}{\frac{n_p^2}{n_b^2}} = \frac{n_H n_b}{n_p^2}. \quad (2.5.0.4)$$

De la ecuación de pre-Saha $n_H = n_p^2 \lambda_e^3 e^{I/kT}$ pues $n_e = n_p$,

$$\Rightarrow \frac{n_H}{n_p^2} n_b = n_b \lambda_e^3 e^{I/kT} \Rightarrow \frac{1 - X_e}{X_e^2} = n_b \lambda_e^3 e^{I/kT}. \quad (2.5.0.5)$$

Recordando la razón Barión-Fotón³ $\eta = \frac{n_b}{n_\gamma}$ que es un parámetro cosmológico. $n_b = \eta n_\gamma$, n_γ es conocido⁴

$$n_b = \eta n_\gamma = \eta \frac{2\zeta(3)}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3. \quad (2.5.0.6)$$

donde $\zeta(3)$ es la *función zeta de Riemann* evaluada en 3. Entonces, sustituyendo lo que ya conocemos

$$\begin{aligned} \frac{1 - X_e}{X_e^2} &= \left(\frac{h^2}{2\pi m_e kT} \right)^{3/2} \eta \frac{2\zeta(3)}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3 e^{I/kT} = \left(\frac{kT}{m_e c^2} \right)^{3/2} \frac{(2\pi)^3}{2^{3/2} \pi^{7/2}} \eta 2\zeta(3) e^{I/kT} \\ &= \left(\frac{kT}{m_e c^2} \right)^{3/2} \frac{2^{3/2}}{\pi^{1/2}} \eta e \zeta(3) e^{I/kT}. \end{aligned}$$

Finalmente, la ecuación de Saha queda escrita como:

$$\boxed{\frac{1 - X_e}{X_e^2} = 4\zeta(3) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \eta \left(\frac{kT}{m_e c^2} \right)^{3/2} e^{I/kT}} \quad (2.5.0.7)$$

La ecuación de Saha rastrea la evolución de cada una de las especies involucradas a partir de la densidad, la temperatura y la composición química de un gas. Utiliza la suposición de equilibrio termodinámico y toma en cuenta las interacciones fotón-partícula, no toma en

³Ver generalidades y deducción de los parámetros n_b , n_γ y de la razón barión-fotón η en el apéndice B.

⁴Aquí usaremos los valores de las constantes como: $k = 8,6173324 \times 10^{-5} \text{ eVK}^{-1}$, $c = 299792458 \text{ m/s}$, $h = 4,135667731 \times 10^{-15} \text{ eVs}$, $\hbar = 6,582119624 \times 10^{-16} \text{ eVs}$, $m_e c^2 = 0,510998928 \text{ eV}$

cuenta las interacciones por choques. Por lo tanto, calcula la cantidad de electrones libres en el sistema.

2.6. Evolución

La fracción de ionización X_e va de $X_e = 1 \rightarrow X_e = 0$, en el intervalo $[1, 0]$, es decir⁵ $X_e = 0$, no hay electrones libres (ni protones). Es el estado final de nuestra dinámica, es decir, ya todos los fotones se han desacoplado, ya no pueden ionizar al hidrógeno y dejan de interactuar, quedan libres y este es el momento del *desacoplamiento*.

$X_e = 1$, todos los protones y electrones están libres, aun no hay estados ligados. Es el estado inicial de esta dinámica.

El desacoplamiento ocurre a lo largo de este intervalo, no es instantaneo.

La ecuación de Saha se puede graficar en función de T para determinar el inicio de la recombinación y su final que da lugar al desacoplamiento.

De la ecuación de Saha (2.5.0.7), sea $A = 4\zeta(3) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \eta \left(\frac{k}{m_e c^2}\right)^{3/2}$ y $B = I/K$, podemos reescribirla como

$$\frac{1 - X_e}{X_e^2} = AT^{3/2} e^{B/T} \Rightarrow 1 - X_e = AT^{3/2} e^{B/T} X_e^2 \Rightarrow AT^{3/2} e^{B/T} X_e^2 + X_e - 1 = 0. \quad (2.6.0.1)$$

Resolvemos como una cuadrática para X_e

$$X_e = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4Ae^{B/T} T^{3/2}}}{2Ae^{B/T} T^{3/2}}. \quad (2.6.0.2)$$

Como no puede haber fracción de ionización negativa, solo tomamos la parte positiva de la solución y X_e nos queda escrita en función de T como:

$$X_e = \frac{1}{2Ae^{B/T} T^{3/2}} \left[\sqrt{1 + 4Ae^{B/T} T^{3/2}} - 1 \right]. \quad (2.6.0.3)$$

La gráfica de la fracción de ionización es la figura 2.3.

Nótese que el intervalo de la temperatura va de 8000-0 K, se invirtió la escala de temperatura en concordancia con que la X_e va de 1 a 0 como se explicó anteriormente.

La gráfica cae en picada alrededor de 4000 K, y cerca de 3000 K $X_e = 0$ y la dinámica ha terminado, ya no quedan protones ni electrones libres. Para ver esto más claramente, haciendo un zoom a la grafica en el intervalo de 3750-2500 K, figura 2.4.

⁵La mayoría de los procesos cosmológicos se estudian y grafican de más a menos, es decir, en el inicio del proceso estudiado había una mayor cantidad y fluye hacia una menor. Sobra decir que estéticamente es más entendible la visualización.

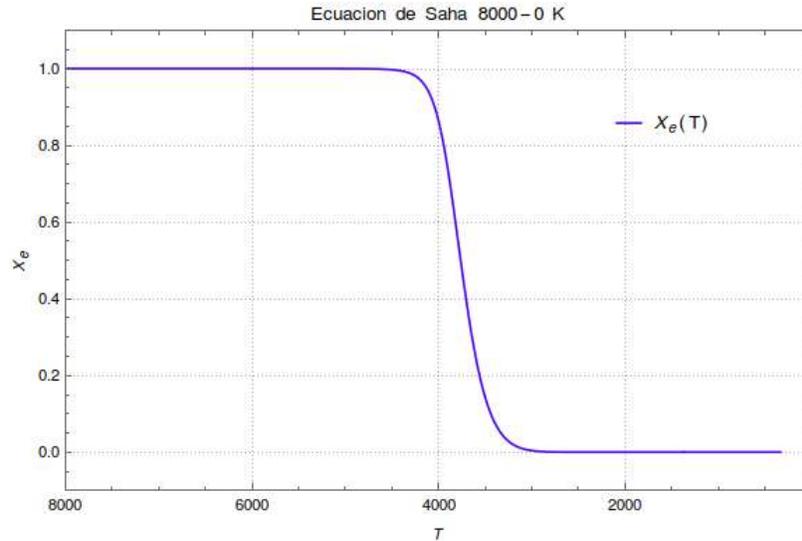


Figura 2.3: Grafica de la ecuación de Saha de 8000-0 K.

Es necesario resolver la ecuación numéricamente para ver exactamente a que temperatura ocurren los porcentajes de ionización. Una definición clásica de la Recombinación es cuando $X_e = 0,1$, cuando el 90 % del proceso se ha completado [Liddle 2003]. La solución numérica para algunos porcentajes de ionización arroja lo siguiente:

X_e	$T(K)$
0.9	4041.58
0.5	3762.88
0.1	3439.65
0.001	2844.52

Estos resultados son muy buenos y más realistas que los mencionados en la Introducción de esta tesis. *Sin embargo*, sólo hasta cierto punto son válidos. Estamos asumiendo la condición de equilibrio termodinámico durante todo el proceso y realmente no ocurre así, en algún momento el equilibrio se rompe; además la fracción de ionización X_e llega a cero, las observaciones han dejado claro que no es así, que quedó cierto residuo de electrones y protones libres terminado el proceso. Dado que es un gas de partículas, un análisis con Teoría Cinética de Boltzmann nos dará una estimación mas cercana a la realidad considerando colisiones entre las especies y también tomando en cuenta el momento en el que ya no persiste el equilibrio. Este análisis se describe en el siguiente capítulo.

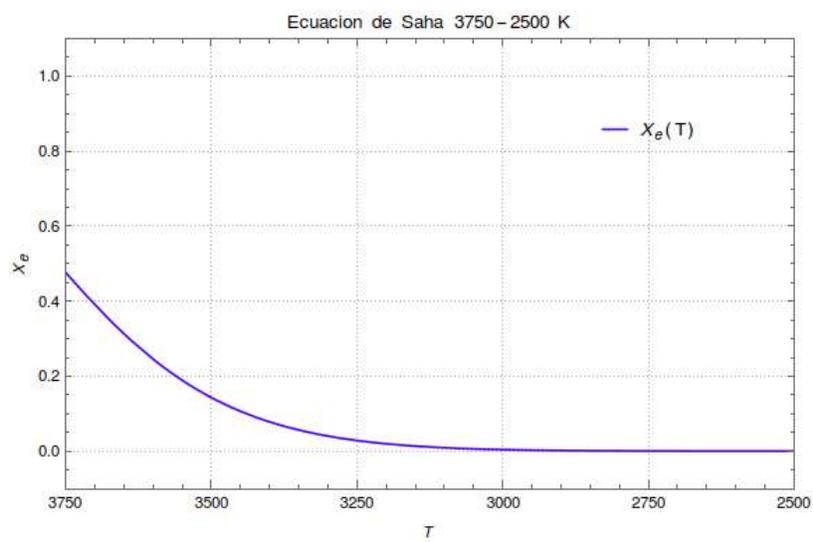


Figura 2.4: Grafica de la ecuación de Saha de 3750-2500 K.

Capítulo 3

Teoría Cinética y la Ecuación de Boltzmann

El análisis hecho hasta del proceso de la Recombinación del hidrógeno es asumiendo el equilibrio termodinámico y considerando al sistema como un gas ideal clásico, es decir, que no tiene interacciones entre sus componentes. Tomando en cuenta el momento en que el equilibrio se rompe y las interacciones entre las componentes del sistema, una descripción estadística como la *Teoría Cinética* será más adecuada para nuestro análisis.

3.1. Elementos de Teoría Cinética

El objetivo de esta sección es entender los elementos clave de la teoría cinética, como una primera introducción al estudio de esta desde un punto de vista clásico para luego introducir elementos cuánticos y finalmente derivar la ecuación de transporte de Boltzmann, base de la ecuación que usaremos para estudiar la recombinación del hidrógeno fuera del equilibrio.

El sistema en consideración en la *teoría cinética clásica* de gases es un gas diluido de N moléculas, consideradas partículas puntuales e iguales (la cantidad es del orden de $\sim 10^{23}$) en una caja de volumen V .

La temperatura es lo suficientemente alta y la densidad lo suficientemente baja como para que las moléculas sean localizadas en paquetes de onda cuyas extensiones (de longitud) sean pequeñas comparadas con la distancia intermolecular ℓ . Para que esto se realice, la longitud de onda térmica de De Broglie promedio de una molécula debe ser mucho menor que la separación promedio entre partículas ($\lambda < \ell$); esto es:

$$\lambda \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2mkT}} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \ll \ell. \quad (3.1.0.1)$$

Bajo estas condiciones, cada molécula puede ser considerada una partícula clásica con momento y posición bien definido.

Dos moléculas deberán considerarse distinguibles una de la otra, las moléculas interactúan con otras a través de colisiones, que se especifican por la *sección transversal diferencial de dispersión* o *sección eficaz diferencial de dispersión*, denotada por σ .

Por simplicidad, ignoramos la estructura atómica de los muros que contienen al gas en cuestión. Las paredes físicas del contenedor del gas son superficies reflectoras ideales (reflexión elástica).

No es de interés en el movimiento de cada partícula a detalle. Más bien, estamos interesados en la función de distribución $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ (el número de moléculas a un tiempo t que tienen posiciones entre un elemento de volumen d^3r alrededor de \vec{r} y momento entre un elemento del espacio de momentos d^3p alrededor de \vec{p} .) que define

$$f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p, \quad (3.1.0.2)$$

que es el número de moléculas en el elemento de *volumen* d^3r y d^3p .

Los elementos de volumen d^3r y d^3p no deben tomarse literalmente como cantidades matemáticamente infinitesimales. Son elementos de volumen finito que son lo suficientemente grandes como para contener una gran cantidad de moléculas y, sin embargo, lo suficientemente pequeños como para que, en comparación con las dimensiones macroscópicas, sean esencialmente puntos¹.

Para hacer la definición de $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ más precisa, vamos a considerar el espacio 6-dimensional, llamado el espacio μ con coordenadas (\vec{r}, \vec{p}) .

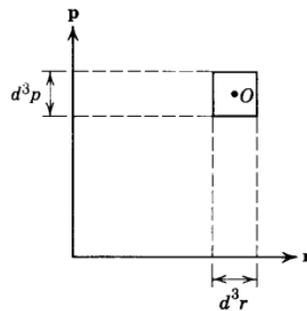


Figura 3.1: El espacio 6-dimensional μ de una molécula [Huang 1987].

Un punto en este espacio representa el estado de una molécula.

A cualquier instante de tiempo, el estado del sistema entero de N moléculas es representado por N puntos en el espacio μ .

¹Bajo estas condiciones, hay alrededor de $\sim 3 \times 10^{19}$ moléculas/cm³ en un gas. Si escogemos $d^3r \sim 10^{-10}$ cm³ (lo suficientemente pequeño para llamarlo o considerarlo “punto”), habrá el orden de 3×10^9 moléculas en d^3r .

Si encogemos los elementos de volumen lo suficiente para que en los elementos de volumen vecinos no cambie la densidad, $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ se puede considerar una función continua.

Si cubrimos el espacio entero μ de elementos $d^3r d^3p$, podemos tomar la aproximación

$$\sum f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p \approx \int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p. \quad (3.1.0.3)$$

Habiendo definido la función de distribución, podemos expresar la información de que hay N moléculas en el volumen V a través de la condición

$$\int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p = N. \quad (3.1.0.4)$$

Si las moléculas están uniformemente distribuidas en espacio, para que f sea independiente de \vec{r} , entonces la integral $\int d^3r = V$ y así:

$$\int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3p = \frac{N}{V}. \quad (3.1.0.5)$$

El objetivo de la Teoría Cinética es encontrar la *función de distribución* $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ para una forma dada de interacción molecular. La forma límite de $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ cuando $t \rightarrow \infty$ implica que el sistema está en equilibrio.

El objetivo de la Teoría Cinética incluye, por lo tanto, la derivación de la termodinámica de un gas diluido.

Para cumplir este objetivo, el primer paso es encontrar la ecuación del movimiento para la función de distribución.

La función de distribución *cambia con el tiempo*, por lo que las moléculas constantemente entran y salen de un elemento de volumen dado en el espacio μ .

Supongamos que no hay colisiones entre moléculas (es decir, $\sigma = 0$). Entonces una molécula con coordenadas (\vec{r}, \vec{p}) en el instante t , tendrá las coordenadas $(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t)$ en el instante $t + \delta t$, donde \vec{F} es una fuerza externa actuando en una molécula y $\vec{v} = \vec{p}/m$ es la velocidad. Podemos tomar δt como una cantidad verdaderamente infinitesimal.

Entonces, todas las moléculas contenidas en un elemento $d^3r d^3p$ del espacio μ en (\vec{r}, \vec{p}) al instante t , se encontrarán (todas) en un elemento $d^3r' d^3p'$, en $(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t)$ en el instante $t + \delta t$. Por lo tanto, en ausencia de colisiones tenemos la igualdad

$$f(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t, t + \delta t) d^3r' d^3p' = f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3r d^3p,$$

que se reduce a

$$f(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t, t + \delta t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t), \quad (3.1.0.6)$$

porque $d^3r' d^3p' = d^3r d^3p$. El último hecho es fácilmente establecido si asumimos que la fuerza externa \vec{F} depende sólo de la posición. A cualquier instante t , podemos elegir $d^3r d^3p$ como un cubo seis dimensional y con esto probar que el área de cualquier pro-

yección de este cubo, digamos $dx dp_x$, no cambia. Dicha proyección, originalmente un cuadrado, se vuelve un paralelogramo de la misma área en el tiempo δt , como se aprecia en la figura 3.2.

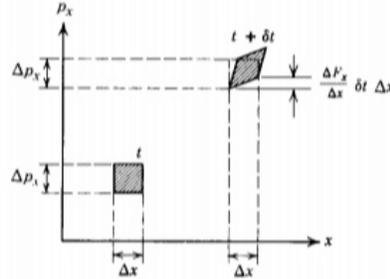


Figura 3.2: La invariancia del elemento de volumen en el espacio μ bajo una evolución dinámica en el tiempo [Huang 1987].

Cuando hay colisiones, es decir, $\sigma > 0$, la ec. (3.1.0.6) debe ser modificada. Escribimos:

$$f(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t, t + \delta t) = f(\vec{r}, \vec{p}, t) + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \delta t, \quad (3.1.0.7)$$

que define $(\partial f / \partial t)_{coll}$. Expandiendo el lado izquierdo de (3.1.0.7) a primer orden en δt , obtenemos la ecuación del movimiento para la función de distribución como dejamos $\delta t \rightarrow 0$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{p}}\right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}. \quad (3.1.0.8)$$

donde $\nabla_{\vec{r}}$ y $\nabla_{\vec{p}}$ son los operadores gradiente con respecto a \vec{r} y a \vec{p} . Esta ecuación no es significativa hasta que expresamos explícitamente $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$.

Es al especificar este término que la suposición de que el sistema es un gas diluido se vuelve relevante.

Una forma explícita para $(\partial f / \partial t)_{coll}$ puede ser obtenida regresando a la ec. (3.1.0.7). Considere la figura 3.3, donde el cuadro A representa el elemento de volumen μ -espacial a (\vec{r}, \vec{p}, t) y el cuadro B representa lo mismo al tiempo $(\vec{r} + \vec{v}\delta t, \vec{p} + \vec{F}\delta t, t + \delta t)$, donde δt eventualmente tiende a cero.

Consideramos que A es tan pequeño que cualquier colisión que sufra una molécula en A la sacará de A. Tal molécula no alcanza B. Por otro lado, hay moléculas fuera de A que, a través de colisiones, entrará en A durante el intervalo de tiempo δt . Estas estarán en B antes de entrar a A.

Por lo tanto, el número de moléculas en B a $t + \delta t$, cuando $\delta t \rightarrow 0$, es igual al número original de moléculas en A al tiempo t más la ganancia neta de moléculas en A debido a las colisiones durante el intervalo de tiempo δt .

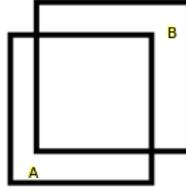


Figura 3.3: Un elemento de volumen en el espacio μ en el intervalo entre t y $t + \delta t$.

Lo anterior es el contenido de la ec. (3.1.0.7) y puede expresarse en la forma

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \delta t = (\bar{R} - R) \delta t, \quad (3.1.0.9)$$

donde²:

$$R \delta t d^3 r d^3 p = \text{número de colisiones ocurridas durante el tiempo entre } t \text{ y } t + \delta t, \text{ en el que una de las moléculas } \textit{iniciales} \text{ está en } d^3 r d^3 p \text{ cerca de } (\vec{r}, \vec{p}). \quad (3.1.0.10)$$

$$\bar{R} \delta t d^3 r d^3 p = \text{número de colisiones ocurridas durante el tiempo entre } t \text{ y } t + \delta t, \text{ en el que una de las moléculas } \textit{finales} \text{ está en } d^3 r d^3 p \text{ cerca de } (\vec{r}, \vec{p}). \quad (3.1.0.11)$$

Asumimos que el gas está extremadamente diluido, tal que sólo podemos considerar colisiones binarias e ignoramos la posibilidad de que 3 o más moléculas puedan colisionar simultáneamente. Esto simplifica en gran medida la evaluación de R y \bar{R} . Es preciso entonces estudiar las colisiones binarias.

3.1.1. Colisiones Binarias

Consideramos colisiones elásticas en el espacio libre entre 2 moléculas sin spín, con masas m_1 y m_2 . El momento de las moléculas en el estado inicial es dado por \vec{p}_1 y \vec{p}_2 , respectivamente; y las energías ϵ_1 y ϵ_2 , con $\epsilon_i = p_i^2/2m_i$.

²Para nuestros fines, más adelante veremos que la diferencia $(\bar{R} - R)$ corresponde a la diferencia entre las tasas de creación y aniquilación de una especie de partículas.

Por conservación del momento (y de la energía):

$$\begin{aligned}\vec{p}_1 + \vec{p}_2 &= \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 \\ E = \epsilon_1 + \epsilon_2 &= \epsilon'_1 + \epsilon'_2,\end{aligned}\quad (3.1.1.1)$$

donde E es la energía total. Definimos la masa total M y la masa reducida μ por

$$M \equiv m_1 + m_2 \quad , \quad \mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} . \quad (3.1.1.2)$$

Momento total \vec{P} y relativo \vec{p} definidos por:

$$\begin{aligned}\vec{P} &\equiv \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \\ \vec{p} &\equiv \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} = \mu(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) ,\end{aligned}\quad (3.1.1.3)$$

donde $\vec{v}_i = \vec{p}_i/m_i$ es la velocidad. Resolviendo para \vec{p}_1 y \vec{p}_2 , se obtiene

$$\vec{p}_1 = \frac{m_1}{M} \vec{P} + \vec{p} \quad , \quad \vec{p}_2 = \frac{m_2}{M} \vec{P} - \vec{p} . \quad (3.1.1.4)$$

Así, se puede verificar que la energía total está dada por :

$$E = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} . \quad (3.1.1.5)$$

Las condiciones para la conservación del momento-energía se vuelven

$$\vec{P} = \vec{P}' \quad , \quad |\vec{p}| = |\vec{p}'| . \quad (3.1.1.6)$$

Es decir, la colisión simplemente rota los momentos relativos sin cambiar su magnitud. Sea θ en ángulo entre \vec{p} y \vec{p}' , y sea ϕ el ángulo azimutal de \vec{p}' sobre \vec{p} . Estos ángulos especifican completamente la cinemática de la colisión. Son denotados colectivamente por Ω y son llamados los *ángulos de dispersión*. Si el potencial responsable de la dispersión es un potencial central (*i.e.*, dependiente sólo de la magnitud de la distancia entre las moléculas), entonces la dispersión es independiente de ϕ .

Los aspectos dinámicos de la dispersión están contenidos en la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$, que se define experimentalmente de la siguiente manera: consideremos un haz de la partícula 2 incidiendo en la partícula 1, considerada como el objetivo. El flujo incidente I es definido como el número de partículas incidentes que cruzan una unidad de área por segundo desde el punto de vista del objetivo:

$$I = n|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| , \quad (3.1.1.7)$$

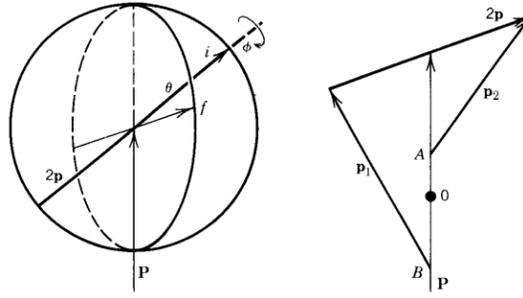


Figura 3.4: Representación geométrica de la cinemática de una colisión binaria. El momento total \vec{P} no cambia (se conserva). El momento relativo \vec{p} es rotado de la dirección inicial i a la dirección final f , sin cambio en su magnitud (se conserva la energía). Los ángulos de dispersión son θ y ϕ [Huang 1987].

con n la densidad de moléculas en el haz incidente y v_1, v_2 las velocidades de las partículas 1 y 2, respectivamente. La sección eficaz diferencial está definida por

$$I \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \equiv \text{número de moléculas dispersadas por segundo en el} \quad (3.1.1.8)$$

elemento de ángulo sólido sobre la dirección Ω .

donde $(d\sigma/d\Omega)$ tiene unidades de área.

El número de moléculas dispersadas en $d\Omega$ por segundo es igual al número de moléculas en el haz incidente cruzando un área $(d\sigma/d\Omega)$ por segundo. La *sección eficaz total* es el número de moléculas dispersadas por segundo, independientes del ángulo de dispersión:

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} . \quad (3.1.1.9)$$

En mecánica clásica, la sección eficaz diferencial puede ser calculada desde el potencial intermolecular como sigue:

Transformamos el sistema coordinado al sistema del centro de masa, en el cual el momento total es cero. Entonces, consideramos sólo el dominio no-relativista. Esto involucra una traslación trivial de todas las velocidades en una cantidad constante. sólo necesitamos seguir la trayectoria de una de las partículas, la cuál se moverá a lo largo de una órbita, como si fuese dispersada por un centro de fuerza fijo O .

Esta partícula se acerca a O con momento \vec{p} , el momento relativo, retrocederá desde O con momento \vec{p}' , el momento relativo rotado. La distancia entre la línea de acercamiento y O es llamada *parámetro de impacto* b . Por conservación del momento angular, esta es también la distancia entre la línea de retroceso y O (ver figura 3.5).

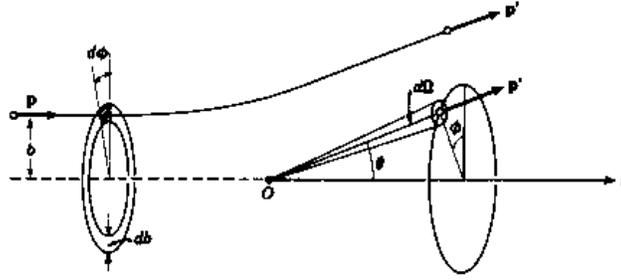


Figura 3.5: Dispersión clásica de una molécula con un centro de fuerza fijo O [Huang 1987].

De la geometría de la figura, es claro que³:

$$I \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega = I b db d\phi. \quad (3.1.1.10)$$

Sin embargo, para ser más correctos, debemos usar la mecánica cuántica (en lugar de la clásica) a pesar del hecho de que entre colisiones consideramos las moléculas como partículas clásicas. La razón es porque cuando las moléculas chocan, sus funciones de onda necesariamente se superponen, y se ven unas a otras como ondas planas de momentos definidos en lugar de paquetes de onda de posiciones bien definidas. Además, formulando el problema de la dispersión de manera mecánico-cuántica se hacen la cinemática y la simetría del problema más obvios.

En la mecánica cuántica, la cantidad básica en un problema de dispersión es la *Matriz de Transición* (matriz \mathcal{M}), que tiene elementos de un operador $\mathcal{M}(E)$ entre los estados inicial i y final f (\vec{p} y \vec{p}' , respectivamente) [Huang 1987], [Jeong 2019a]:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{if} &= \langle 1', 2' | \mathcal{M}(E) | 1, 2 \rangle \\ \mathcal{M}(E) &= H' + H'(E - H_0 + i\epsilon)^{-1} H' + \dots \end{aligned} \quad (3.1.1.11)$$

donde H_0 es el hamiltoniano sin perturbar, H' es el potencial, $\epsilon \rightarrow 0^+$ (tiende a cero por la derecha) y $1', 2', 1, 2$ son los estados finales e iniciales, respectivamente.

Una colisión es una transición desde el estado inicial a un conjunto de estados finales. Para estados finales en el elemento infinitesimal del espacio de momentos $d^3 p'_1 d^3 p'_2$ la tasa o razón es⁴

³Se obtiene la relación entre b y los ángulos de dispersión de la ecuación clásica de la órbita, de este modo obteniendo $d\sigma/d\Omega$ como una función de los ángulos de dispersión [Huang 1987].

⁴Sobre la normalización, con las definiciones dadas por las ecs. (3.1.1.11) y (3.1.1.12) y con estados de partículas individuales normalizados a una partícula por unidad de volumen, debería haber un factor $(2\pi\hbar)^3$ multiplicando la función δ^3 para la conservación del momento, un factor $2\pi/\hbar$ multiplicando la función δ para

$$dP_{12 \rightarrow 1'2'} = Id\sigma = d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 \quad (3.1.1.12)$$

$$\delta^4(P_f - P_i) \equiv \delta^3(\vec{P} - \vec{P}') \delta(E - E'),$$

donde \vec{P} y E siguen siendo el momento y la energía totales, respectivamente.

La tasa de transición dentro de cualquier región del espacio de momentos puede ser obtenida integrando sobre la región apropiada⁵. Para obtener la sección eficaz diferencial, integramos sobre el momento de retroceso \vec{p}'_1 (que es constante y fijo por la conservación del momento) y la magnitud p'_2 (que es determinada por la conservación de la energía) para obtener

$$I \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int dp'_2 p_2'^2 \int d^3 p'_1 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2. \quad (3.1.1.13)$$

Las integraciones son triviales, y producen un factor que representa la densidad de los estados finales debido a las funciones δ que hacen cumplir la conservación de momento-energía (sin embargo, para manipulaciones formales, es mejor dejar las integraciones expresadas sin resolver).

La matriz \mathcal{M} es invariante bajo rotaciones espaciales, bajo reflexiones y bajo la inversión del tiempo. Para dispersiones elásticas, la densidad de estados es la misma en los estados inicial y final. Entonces, las invariancias de \mathcal{M} implican invariancias correspondientes de la sección transversal (o eficaz) diferencial.

Explícitamente, tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}'_2, \vec{p}'_1 | \mathcal{M} | \vec{p}_1, \vec{p}_2 \rangle &= \langle R\vec{p}'_2, R\vec{p}'_1 | \mathcal{M} | R\vec{p}_1, R\vec{p}_2 \rangle \\ &= \langle -\vec{p}'_2, -\vec{p}'_1 | \mathcal{M} | -\vec{p}_1, -\vec{p}_2 \rangle, \end{aligned} \quad (3.1.1.14)$$

donde $R\vec{p}$ es el vector obtenido de \vec{p} después de realizar una rotación espacial sobre un eje, y/o una reflexión con respecto a un plano.

Si las moléculas tienen espín, (3.1.1.14) sigue siendo válida siempre que, interpretamos que \vec{p} incluye la coordenada de espín. *Una rotación rota tanto el momento como el espín, pero una reflexión no afecta el espín.*

De la ec. (3.1.1.14) podemos deducir que la colisión inversa, definida como la colisión de estados inicial y final intercambiados, tiene la misma matriz \mathcal{M} (y por lo tanto, la misma sección eficaz):

la conservación de la energía y un factor $(2\pi\hbar)^{-3}$ que multiplica cada elemento de volumen $d^3 p$ del espacio de momentos. Para ahorrar notación y molestia al escribir dichos factores, estamos definiendo la matriz \mathcal{M} de modo que los “absorba temporalmente”.

⁵La expresión $dP_{12 \rightarrow 1'2'}$ es la tasa de transición al estado final dentro de $d^3 p'_1 d^3 p'_2$.

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}_2', \vec{p}_1' | \mathcal{M} | \vec{p}_1, \vec{p}_2 \rangle &= \langle \vec{p}_2, \vec{p}_1 | \mathcal{M} | \vec{p}_1', \vec{p}_2' \rangle \\ \Rightarrow \quad \boxed{\mathcal{M}_{fi} = \mathcal{M}_{if}} \end{aligned} \quad (3.1.1.15)$$

Si las colisiones son tratadas clásicamente, la colisión inversa podría ser muy diferente a la colisión original. Como ejemplo, tomamos el caso de la colisión clásica entre una esfera y una cuña. Pero esto es irrelevante para dispersiones moleculares, por que las moléculas no se pueden describir como cuñas o similares. Una molécula simétrica no esférica es una con spín distinto de cero, y existe un eigenestado del spín. La orientación angular conjugada con el momento angular, es completamente incierta. La simetría entre la colisión original y la colisión inversa permanece válida cuando el spín es tomado en cuenta, como ya se mencionó.

3.1.2. La Ecuación de Transporte de Boltzmann

Para derivar una fórmula explícita de $(\partial f / \partial t)_{coll}$, asumimos que el gas está tan suficientemente diluido que sólo colisiones binarias necesitan ser tomadas en cuenta. El efecto de fuerzas externas es ignorado asumiendo que estas fuerzas, si están presentes, variarán poco en el rango del potencial intermolecular.

El número de transiciones $12 \rightarrow 1'2'$ en un elemento de volumen $d^3 r$ en \vec{r} que tienen colisiones durante el intervalo de tiempo δt es

$$dN_{12} dP_{12 \rightarrow 1'2'} \delta t .$$

donde dN_{12} es el número inicial de pares (\vec{p}_1, \vec{p}_2) que colisionan.

Introducimos la *función de correlación de 2 partículas*, F , definida por

$$dN_{12} = F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) d^3 r d^3 p_1 d^3 p_2 . \quad (3.1.2.1)$$

Entonces, en la notación de (3.1.0.10) tenemos:

$$\begin{aligned} R \delta t d^3 r d^3 p_1 &= \delta t d^3 r d^3 p_1 \int d^3 p_2 dP_{12 \rightarrow 1'2'} F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) \\ \Rightarrow R &= \int d^3 p_2 dP_{12 \rightarrow 1'2'} F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) . \end{aligned} \quad (3.1.2.2)$$

Sustituyendo la ec. (3.1.1.12) en la expresión anterior, obtenemos:

$$R = \int d^3 p_2 d^3 p_1' d^3 p_2' \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) . \quad (3.1.2.3)$$

De igual manera, encontramos:

$$\bar{R} = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_i - P_f) |\mathcal{M}_{if}|^2 F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t). \quad (3.1.2.4)$$

Las funciones δ en (3.1.2.3) y (3.1.2.4) son idénticas, y $\mathcal{M}_{fi} = \mathcal{M}_{if}$ por (3.1.1.14). Entonces

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} &= \bar{R} - R = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 (F_{1'2'} - F_{12}) \\ \Rightarrow \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} &= \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 (F_{1'2'} - F_{12}), \end{aligned} \quad (3.1.2.5)$$

donde $F_{12} = F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t)$ y $F_{1'2'} = F(\vec{r}, \vec{p}'_1, \vec{p}'_2, t)$.

Nótese que podemos integrar sobre el vector \vec{p}'_1 y la magnitud p_2 , así que la sección transversal eficaz diferencial aparece en el integrando de (3.1.2.4):

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d\Omega |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (d\sigma/d\Omega) (F_{1'2'} - F_{12}). \quad (3.1.2.6)$$

Para nuestros intereses, es mejor usar la forma (3.1.2.5).

La expresión obtenida es exacta para un gas lo suficientemente diluido. Pero dicha expresión contiene la función de correlación F .

Ahora, introduzcamos la suposición crucial

$$F(\vec{r}, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) \approx f(\vec{r}, \vec{p}_1, t) f(\vec{r}, \vec{p}_2, t). \quad (3.1.2.7)$$

Esta suposición dice que el momento de dos partículas en el elemento de volumen $d^3 r$ está “no correlacionado”, así que la probabilidad de encontrarlas simultáneamente es el producto de la probabilidad de encontrar sola a cada una. Esto es conocido como la “**suposición del caos molecular**”. Esto es necesario para obtener una ecuación cerrada de la función de distribución.

Con la suposición del caos molecular, tenemos

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d\Omega |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| (d\sigma/d\Omega) (f'_1 f'_2 - f_1 f_2),$$

o bien

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 (f'_1 f'_2 - f_1 f_2), \quad (3.1.2.8)$$

donde las siguientes abreviaciones han sido usadas:

$$\begin{aligned}
f_1 &= f(\vec{r}, \vec{p}_1, t) \\
f_2 &= f(\vec{r}, \vec{p}_2, t) \\
f'_1 &= f(\vec{r}, \vec{p}'_1, t) \\
f'_2 &= f(\vec{r}, \vec{p}'_2, t) .
\end{aligned} \tag{3.1.2.9}$$

Sustituyendo (3.1.2.8) en la ec. (3.1.0.8), obtenemos la ecuación del transporte de Boltzmann o simplemente *ecuación de Boltzmann*:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{p}_1} \right) f_1 = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \delta^4(P_f - P_i) |\mathcal{M}_{fi}|^2 (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \tag{3.1.2.10}$$

la cual es una ecuación integro-diferencial no lineal para la función de distribución. Hemos considerado sólo el caso de una especie de moléculas sin espín. Si consideramos diferentes tipos de moléculas, entonces tenemos que introducir una función de distribución separada para cada tipo, y el término de colisión las acoplará si diferentes tipos de moléculas pueden dispersarse entre sí. Si las moléculas tienen espín, o si consideramos la excitación de las moléculas a través de la dispersión, entonces los diferentes estados de espín o estados excitados deben considerarse como diferentes especies de moléculas.

3.2. Formalismo de la Teoría Cinética

Ahora veremos un análisis más formal de la teoría cinética por medio de la descripción hamiltoniana de un sistema de muchas partículas ($N \sim 10^{23}$, orden de 1 mol de sustancia) que nos permite dar un enfoque mecánico-estadístico al sistema y a través del formalismo matemático conocido como la jerarquía BBGKY para obtener una mejor derivación de la ecuación de Boltzmann.

Se hará un acercamiento a la ecuación de Boltzmann en el equilibrio y se desarrollará la ecuación de Boltzmann cuántica, que es primordial para los fines de este trabajo.

3.2.1. De Liouville a BBGKY

Partamos de un enfoque Hamiltoniano para la dinámica de N partículas puntuales idénticas. Consideremos el Hamiltoniano $H(\vec{r}, \vec{p}, t)$ de la forma

$$H = \underbrace{\frac{1}{2m} \sum_i^N \vec{p}_i^2}_{\text{Energía cinética}} + \underbrace{\sum_i^N V(\vec{r}_i)}_{\text{Fuerza externa } \vec{F} = -\nabla V} + \underbrace{\sum_{i < j}^N U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}_{\text{interacción entre componentes}} . \tag{3.2.1.1}$$

El Hamiltoniano contiene una fuerza externa $\vec{F} = -\nabla V$ que actúa por igual en todas las partículas. También hay interacciones de dos cuerpos entre partículas, capturadas por la energía potencial $U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$.

Las ecuaciones de Hamilton vectoriales son

$$\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \quad , \quad \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} . \quad (3.2.1.2)$$

De igual manera, seguimos considerando el *espacio fase*, que es $6N$ dimensional. Un elemento fundamental en la descripción es la evolución de la función de probabilidad $f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t)$ sobre el espacio fase, que nos dá la probabilidad de que el sistema se encuentre en la vecindad del punto (\vec{r}_i, \vec{p}_i) .

La probabilidad de encontrar una partícula en el espacio fase debe ser 1. Como cualquier probabilidad, la función se normaliza como

$$\int d^3 \vec{r}_i d^3 \vec{p}_i f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t) = 1 .$$

Además, debido a que la probabilidad se conserva localmente, debe obedecer una ecuación de continuidad. Una ecuación de continuidad expresa la conservación de alguna cantidad física, por ejemplo, en el electromagnetismo tenemos la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 ,$$

donde ρ es la densidad de carga y $\vec{J} = \rho \vec{v}$ es la densidad de corriente, expresa la conservación de la carga.

En nuestro caso, cualquier cambio de probabilidad en una parte del espacio fase debe ser compensado por un flujo hacia regiones vecinas. En términos del espacio fase, el término ∇ en la ecuación de continuidad incluye tanto $\partial/\partial \vec{r}_i$ como $\partial/\partial \vec{p}_i$ y, correspondientemente, el vector de velocidad en el espacio fase es $(\dot{\vec{r}}_i, \dot{\vec{p}}_i)$. La ecuación de continuidad de la función de probabilidad queda como

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot (f \dot{\vec{r}}_i) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \cdot (f \dot{\vec{p}}_i) = 0 .$$

Pero, usando las ecuaciones de Hamilton $\dot{\vec{r}}_i = \partial H / \partial \vec{p}_i$ y $\dot{\vec{p}}_i = -\partial H / \partial \vec{r}_i$ esto se convierte en

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \cdot \left(f \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \cdot \left(f \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} + f \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{r}_i \partial \vec{p}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} - f \frac{\partial^2 H}{\partial \vec{p}_i \partial \vec{r}_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = 0.$$

La expresión anterior es la ecuación de Liouville. Es la afirmación de que la probabilidad no cambia a medida que se sigue a lo largo de cualquier trayectoria en el espacio fase, como se ve al escribir la ecuación de Liouville como una derivada total

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \dot{\vec{r}}_i + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \dot{\vec{p}}_i \Rightarrow \frac{df}{dt} = 0.$$

Por tanto, esto implica la conservación de f , es decir, si sigue alguna región del espacio fase en la evolución hamiltoniana, su forma puede cambiar pero su volumen seguirá siendo el mismo. Lo anterior deriva del teorema de Liouville.

Podemos reescribir la ecuación de Liouville usando el paréntesis de Poisson

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial B}{\partial \vec{r}_i}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left[\frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right] = 0 \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} = 0.$$

El paréntesis de Poisson es antisimétrico $\{A, B\} = -\{B, A\}$ por lo que la ecuación de Liouville queda como

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}.$$

Una distribución de equilibrio es aquella que no tiene una dependencia explícita del tiempo:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0,$$

que ocurre si $\{H, f\}$ (o $\{f, H\}$ si usamos la primera forma) es cero, es decir, que f conmuta con H . Una forma de satisfacer esto es que f sea función de H y un buen ejemplo es la distribución de Boltzmann $f \sim e^{-\beta H}$ con $\beta = 1/kT$. Cualquier función de distribución que conmute con H en el paréntesis de Poisson es una distribución de equilibrio.

Suponga que tenemos alguna función, $A(\vec{r}_i, \vec{p}_i)$, en el espacio fase. El valor esperado de esta función viene dado por

$$\langle A \rangle = \int dVA(\vec{r}_i, \vec{p}_i)f(\vec{r}_i, \vec{p}_i, t). \quad (3.2.1.3)$$

Este valor esperado cambia con el tiempo solo si existe una dependencia temporal explícita en la distribución (esto significa que en equilibrio $\langle A \rangle$ es constante). Tenemos pues, reescribiendo la ecuación de Liouville y sustituyendo:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \int dVA \frac{\partial f}{\partial t} \\
&= \int dVA \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) \\
&= \int dV \left(-\frac{\partial A}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} + \frac{\partial A}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) f.
\end{aligned} \tag{3.2.1.4}$$

Se integró por partes para llegar a la última expresión, descartando los términos de frontera que se justifica en este contexto porque f está normalizada lo que asegura que debemos tener $f \rightarrow 0$ en partes asintóticas del espacio fase. Finalmente

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \int dV \{A, H\} f = \langle \{A, H\} \rangle. \tag{3.2.1.5}$$

3.2.2. La Jerarquía BBGKY

Aún al considerar una distribución de probabilidad sobre el espacio fase de N -partículas, seguimos teniendo un problema: todavía tenemos una función de $\sim 10^{23}$ variables. Para continuar, no nos centraremos en la distribución de probabilidad de las N partículas, sino en la *función de distribución de una partícula*. Esta captura el número esperado de moléculas en algún punto (\vec{r}_1, \vec{p}_1) . Está definida por

$$f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N, t).$$

Es como integrar sobre todos los grados de libertad del sistema excepto los de la partícula 1. Aunque parece que hemos seleccionado la partícula 1 para un tratamiento especial en la expresión anterior, no es el caso ya que todas las N partículas son idénticas.

Esto también se refleja en el factor N de la expresión, lo que garantiza que f_1 se normaliza como

$$\int d^3 r d^3 p f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = N. \tag{3.2.2.1}$$

En general, la función f_1 es todo lo que realmente necesitamos saber sobre un sistema: captura muchas de las propiedades de este. Por ejemplo, la densidad promedio de partículas en el espacio real es simplemente

$$n(\vec{r}, t) = \int d^3 p f_1(\vec{r}, \vec{p}, t). \tag{3.2.2.2}$$

La velocidad promedio de las partículas es

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \int d^3 p \frac{\vec{p}}{m} f_1(\vec{r}, \vec{p}, t), \quad (3.2.2.3)$$

y el flujo de energía es

$$\vec{\epsilon}(\vec{r}, t) = \int d^3 p \frac{\vec{p}}{m} E(\vec{p}) f_1(\vec{r}, \vec{p}, t), \quad (3.2.2.4)$$

donde usualmente se considera $E(\vec{p}) = p^2/2m$.

El objetivo es obtener una ecuación que gobierne f_1 . Para ver cómo cambia con el tiempo, derivamos f_1 respecto al tiempo:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i \frac{\partial f}{\partial t} = N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i \{H, f\}.$$

Usando el Hamiltoniano dado en la ec. (3.2.1.1), la expresión anterior se convierte en

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i \left[- \sum_{j=1}^N \frac{\vec{p}_j}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_j} + \sum_{j=1}^N \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_j} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_j} + \sum_{j=1}^N \sum_{k < l} \frac{\partial U(\vec{r}_k - \vec{r}_l)}{\partial \vec{r}_j} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_j} \right].$$

Ahora, siempre que $j = 2, \dots, N$, podemos integrar por partes para mover las derivadas de f hacia los otros términos. Y, en cada caso, el resultado es simplemente cero porque cuando la derivada es con respecto a \vec{r}_j , los otros términos dependen solo de \vec{p}_i y viceversa.

Nos quedamos solo con los términos que involucran derivadas con respecto a \vec{r}_1 y \vec{p}_1 porque no podemos integrarlos por partes, haciendo así que las sumatorias sobre j en la ecuación anterior desaparezcan. Cambiemos un poco la notación definiendo $\vec{r}_1 \equiv \vec{r}$ y $\vec{p}_1 \equiv \vec{p}$. Así, tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} &= N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i \left[- \frac{\vec{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} + \sum_{k=2}^N \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_k)}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \right] \\ &= \{H_1, f_1\} + N \int \prod_{i=2}^N d^3 r_i d^3 p_i \sum_{k=2}^N \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_k)}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}}, \end{aligned} \quad (3.2.2.5)$$

donde se definió el Hamiltoniano de una partícula

$$H_1 = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (3.2.2.6)$$

Notese que H_1 incluye la fuerza externa V que actúa sobre la partícula, pero no hay información de la interacción con las otras partículas. Toda esa información se incluye en

el último término con $U(\vec{r} - \vec{r}_k)$. La evolución de la función de distribución de una partícula se describe mediante una ecuación similar a la de Liouville, junto con un término adicional:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \{H_1, f_1\} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (3.2.2.7)$$

El primer término a veces se denomina *término de transmisión*. Dice cómo se mueven las partículas en ausencia de colisiones. El segundo término, conocido como *integral o término de colisión* y viene dado por el segundo término en la ec. (3.2.2.5). De hecho, debido a que todas las partículas son iguales, cada uno de los $(N - 1)$ términos en $\sum_{k=2}^N$ en la ec. (3.2.2.5) son idénticos, podemos eliminar la sumatoria sobre k y escribir

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll} = N(N - 1) \int d^3 r_2 d^3 p_2 \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_2)}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \int \prod_{i=3}^N d^3 r_i d^3 p_i f(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{p}, \vec{p}_2, \dots, t).$$

Pero aquí surge un problema. La integral de colisión no se puede expresar en términos de la función de distribución de una partícula. La integral de colisión captura las interacciones, o colisiones, de una partícula con otra. Sin embargo, f_1 no contiene información sobre dónde se encuentran las otras partículas en relación con la primera. Sin embargo, parte de esa información está contenida en la *función de distribución de dos partículas*,

$$f_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_1, \vec{p}_2, t) \equiv N(N - 1) \int \prod_{i=3}^N d^3 r_i d^3 p_i f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, t).$$

Con esta definición, la integral de colisión se escribe simplemente como

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll} = \int d^3 r_2 d^3 p_2 \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_2)}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}}. \quad (3.2.2.8)$$

El término de colisión no cambia la distribución de partículas en el espacio. Este es captado por la densidad de partículas (3.2.2.2) que se obtiene integrando $n = \int d^3 p f_1$.

El resultado de todo esto es que si queremos saber cómo evoluciona la función de distribución de una partícula, también necesitamos saber algo sobre la función de distribución de dos partículas. Pero siempre podemos averiguar cómo evoluciona f_2 repitiendo el mismo cálculo que hicimos anteriormente para f_1 . Se puede demostrar que f_2 evoluciona mediante una ecuación similar a la de Liouville, pero con un término corregido que depende de la función de distribución de tres partículas f_3 . Y f_3 evoluciona a la manera de Liouville, pero con un término de corrección que depende de f_4 , y así sucesivamente. En general, la función de distribución de n partículas

$$f_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n, t) = \frac{N!}{(N-n)!} \int \prod_{i=n+1}^N d^3 r_i d^3 p_i f(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_n, t),$$

obedece a la ecuación

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \{H_n, f_n\} + \sum_{i=1}^n \int d^3 r_{n+1} d^3 p_{n+1} \frac{\partial U(\vec{r}_i - r_{n+1})}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \vec{p}_i}, \quad (3.2.2.9)$$

donde el Hamiltoniano de n cuerpos incluye la fuerza externa y cualquier interacción entre las n partículas, pero ignora las interacciones con cualquier partícula fuera de este conjunto⁶

$$H_n = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right) + \sum_{i < j \leq n} U(\vec{r}_i - \vec{r}_j).$$

Las ecuaciones resultantes del desarrollo de (3.2.2.9) se conocen como *La jerarquía BBGKY*⁷. Estas dicen que cualquier grupo de n partículas evoluciona de manera hamiltoniana, corregida por interacciones con una de las partículas fuera de ese grupo. Para comprender todo en detalle, tendremos que calcularlo todo. Comenzamos con la ecuación de Liouville que gobierna una función complicada f de $N \sim 10^{23}$ variables y reemplazarla con $\sim 10^{23}$ ecuaciones acopladas.

Sin embargo, hay una ventaja en trabajar con la jerarquía BBGKY porque aíslan las variables interesantes y simples, a saber, f_1 y otras f_n inferiores.

Esto significa que las ecuaciones están en una forma que está madura para comenzar a implementar varias aproximaciones. Dado un problema particular, se puede decidir qué términos son importantes e, idealmente, qué términos son tan pequeños que pueden ignorarse, truncando la jerarquía a algo manejable. La forma exacta de hacerlo depende del problema en cuestión. El más simple, útil y de mayor interés para nosotros es la ecuación de Boltzmann.

3.2.3. La Ecuación de Boltzmann

Veamos la manera de cómo escribir una ecuación cerrada para f_1 en solitario. Esta será la famosa ecuación de Boltzmann. La idea principal es que hay dos escalas de tiempo en el problema. Uno es el tiempo entre colisiones, τ , conocido como *tiempo de dispersión o tiempo de relajación*. El segundo es el tiempo de colisión, τ_{coll} , que es aproximadamente el tiempo que tarda en ocurrir el proceso de colisión entre partículas. En situaciones donde

⁶Comparar H_n con la ecuación(3.2.1.1).

⁷Las iniciales representan Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood e Yvon.

$$\tau \gg \tau_{coll} . \quad (3.2.3.1)$$

Es de esperar que, durante gran parte del tiempo, f_1 simplemente siga su evolución hamiltoniana con perturbaciones ocasionales por las colisiones. Esto es lo que sucede con el gas diluido. Y este es el régimen en el que trabajaremos a partir de ahora.

En esta etapa, hay una forma correcta y una forma menos correcta de proceder. La forma correcta es derivar la ecuación de Boltzmann a partir de la jerarquía BBGKY. Sin embargo, es un poco complicado⁸. Entonces, en su lugar, comenzaremos por tomar la opción menos correcta que tiene la ventaja de obtener la misma respuesta pero de una manera mucho más fácil. Esta opción es simplemente adivinar qué forma debe tomar la ecuación de Boltzmann.

Recordando la ecuación de Boltzmann (3.2.2.7)

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \{H_1, f_1\} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll} . \quad (3.2.3.2)$$

Pero aún no tenemos una expresión para la integral de colisión en términos de f_1 . De la definición dada por la ec. (3.2.2.8) se desprende claramente que el segundo término representa el cambio en los momentos debido a la dispersión de dos partículas. Cuando $\tau \gg \tau_{coll}$, las colisiones ocurren ocasionalmente, pero de manera abrupta. La integral de colisión debe reflejar la velocidad a la que estas colisiones ocurren.

Suponemos que la partícula se encuentra en (\vec{r}, \vec{p}) en el espacio fase y choca con otra partícula en (\vec{r}, \vec{p}_2) . Asumimos que las colisiones son locales en el espacio, de modo que las dos partículas se sitúan en el mismo punto. Estas partículas pueden colisionar y emerger con momentos \vec{p}'_1 y \vec{p}'_2 . Definiremos la tasa o razón de dispersión para que ocurra este proceso para que sea

$$\text{Tasa} = d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}, \vec{p}_2, t) |\mathcal{M}_{if}|^2 , \quad (3.2.3.3)$$

donde \mathcal{M}_{if} es la matriz de transición (3.1.1.11), explicada en la sección 3.1.1. La tasa de dispersión contiene la información sobre la dinámica del proceso y está relacionada con la sección transversal diferencial. La tasa es proporcional a la función de distribución de dos cuerpos f_2 ya que esto nos dice la probabilidad de que dos partículas se sitúen originalmente en (\vec{r}, \vec{p}) y (\vec{r}, \vec{p}_2) .

Centrémonos en la distribución de partículas con un impulso específico \vec{p} . Dos partículas con momentos \vec{p} y \vec{p}_2 se pueden transformar en dos partículas con momentos \vec{p}'_1 y \vec{p}'_2 . Dado que tanto los momentos como la energía se conservan en la colisión, tenemos

⁸Más detalles de la derivación de la ecuación de Boltzmann a partir de la jerarquía BBGKY se pueden consultar en [Huang 1987] y [Tong 2018b].

$$\begin{aligned}\vec{p} + \vec{p}_2 &= \vec{p}_1' + \vec{p}_2' \\ p^2 + p_2^2 &= p_1'^2 + p_2'^2.\end{aligned}\quad (3.2.3.4)$$

En general, estamos considerando partículas en un potencial externo V . Esto proporciona una fuerza sobre las partículas que, en principio, podría significar que el momento y la energía cinética de las partículas no son los mismos antes y después de la colisión. Para eliminar esta posibilidad, asumiremos que el potencial solo varía apreciablemente en escalas de distancia macroscópicas, de modo que puede despreciarse en la escala de colisiones atómicas. Esto es completamente razonable para la mayoría de los potenciales externos como la gravedad o los campos eléctricos. Entonces (3.2.3.4) siguen siendo válidas.

Si bien las colisiones pueden desviar partículas de un estado con momento \vec{p} a un momento diferente, también pueden desviar partículas con momento diferente de a un estado con momento \vec{p} .

Esto sugiere que la integral de colisión debe contener dos términos:

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d^3 p_1' d^3 p_2' \left[f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}_1', \vec{p}_2', t) |\mathcal{M}_{fi}|^2 - f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}, \vec{p}_2, t) |\mathcal{M}_{if}|^2 \right].$$

El primer término captura la dispersión en el estado \vec{p} , el segundo la dispersión fuera del estado \vec{p} .

Recordando las propiedades de simetría e invariancia de la función de dispersión \mathcal{M} , tenemos que $\mathcal{M}_{if} = \mathcal{M}_{fi}$, con lo que podemos simplificar la integral de colisión como

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d^3 p_1' d^3 p_2' \left[f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}_1', \vec{p}_2', t) - f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}, \vec{p}_2, t) \right] |\mathcal{M}_{fi}|^2. \quad (3.2.3.5)$$

Para finalizar, debemos expresar la integral de colisión en términos de f_1 en lugar de f_2 . Suponemos que las velocidades de dos partículas no están correlacionadas, de modo que podemos escribir

$$f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}, \vec{p}_2, t) = f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) f_1(\vec{r}, \vec{p}_2, t). \quad (3.2.3.6)$$

Veamos más de cerca lo que realmente asumimos. Si observamos (3.2.3.5), podemos ver que hemos tomado la tasa de colisiones como proporcional a $f_2(\vec{r}, \vec{r}, \vec{p}, \vec{p}_2, t)$, donde p y p_2 son los momentos de las partículas antes de la colisión. Eso significa que si sustituimos (3.2.3.6) en (3.2.3.5), realmente estamos asumiendo que las velocidades no están correlacionadas antes de la colisión. Y eso suena bastante razonable: podría imaginarse que durante el proceso de colisión, las velocidades entre dos partículas se correlacionan. Pero entonces pasa mucho tiempo, τ , antes de que una de estas partículas sufra otra colisión.

Además, esta próxima colisión es típicamente con una partícula completamente diferente y parece completamente plausible que la velocidad de esta nueva partícula no tenga nada que ver con la velocidad de la primera. No obstante, el hecho de que hayamos asumido que las velocidades no están correlacionadas antes de la colisión en lugar de después, ha introducido, con bastante astucia, una flecha del tiempo en el juego.

Finalmente, podemos escribir una expresión cerrada para la evolución de la función de distribución de una partícula dada por

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = \{H_1, f_1\} + \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll}, \quad (3.2.3.7)$$

con la integral o término de colisión:

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll} = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 \left[f_1(\vec{r}, \vec{p}'_1, t) f_1(\vec{r}, \vec{p}'_2, t) - f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) f_1(\vec{r}, \vec{p}_2, t) \right] |\mathcal{M}_{fi}|^2 \quad (3.2.3.8)$$

Esta es la *ecuación de Boltzmann* y no es una ecuación fácil de resolver. Es una ecuación integro-diferencial no lineal. Las soluciones exactas son difíciles de encontrar, pero las soluciones numéricas tienen muchas aplicaciones en diversos campos.

3.2.4. Equilibrio y Equilibrio Detallado

Comencemos la exploración de la ecuación de Boltzmann revisando la cuestión de la distribución de equilibrio que obedece a $\partial f^{eq}/\partial t = 0$. Ya sabemos que $\{f, H_1\} = 0$ si f está dada por cualquier función de la energía o, de hecho, cualquier función que Poisson conmute con H . Para mayor claridad, limitémonos al caso en el que la fuerza externa desaparece, por lo que $V(r) = 0$.

Entonces, si miramos la ecuación de Liouville solamente, cualquier función del momento es una distribución de equilibrio. Pero, ¿qué pasa con la contribución de la integral de colisión?

Una forma de hacer desaparecer la integral de colisión es encontrar una distribución que obedezca a la condición de *equilibrio detallado*,

$$f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}'_1) f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}'_2) = f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}) f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}_2). \quad (3.2.4.1)$$

Es más usual aplicar logaritmos y escribir la expresión anterior como:

$$\log(f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}'_1)) + \log(f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}'_2)) = \log(f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p})) + \log(f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}_2)). \quad (3.2.4.2)$$

¿Cómo podemos asegurarnos de que esto sea cierto para todos los momentos? Los

momentos de la derecha son los anteriores a la colisión; a la izquierda son los posteriores a la colisión. De la forma de (3.2.4.2), es claro que la suma de $\log f_1^{eq}$ debe ser la misma antes y después de la colisión: en otras palabras, esta suma debe conservarse durante la colisión. Pero sabemos qué cosas se conservan durante las colisiones: momento y energía, como se muestra en (3.2.3.4) respectivamente. Esto significa que debemos tomar

$$\log(f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p})) = \beta(\mu - E(\vec{p}) + \vec{u} \cdot \vec{p}), \quad (3.2.4.3)$$

donde $E(\vec{p}) = p^2/2m$ para partículas no relativistas y μ , β y \vec{u} son todas constantes. Ajustaremos la constante μ para asegurarnos de que la normalización general de f_1 obedezca (3.2.2.1). Entonces, escribiendo $\vec{p} = m\vec{v}$, tenemos

$$f_1^{eq}(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{N}{V} \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} e^{-\beta m(\vec{v} - \vec{u})^2/2}, \quad (3.2.4.4)$$

que reproduce la distribución de Maxwell-Boltzmann si identificamos β el inverso de la temperatura, $1/T$ (en realidad $1/kT$). Aquí, \vec{u} permite la posibilidad de una velocidad de deriva general. La adición del término de colisión a la ecuación de Liouville nos obliga a sentarnos en la distribución de Boltzmann en equilibrio.

Si nos olvidamos del término de transmisión $\{H_1, f_1\}$, entonces existe una clase mucho mayor de soluciones para el requisito de equilibrio detallado (3.2.4.1). Estas soluciones son de nuevo de la forma (3.2.4.3), pero ahora con las constantes μ , β y \vec{u} promovidas a funciones de espacio y tiempo. En otras palabras, podemos tener

$$f_1^{local}(\vec{r}, \vec{p}, t) = n(\vec{r}, t) \left(\frac{\beta(\vec{r}, t)}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp\left(-\beta(\vec{r}, t) \frac{m}{2} [\vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t)]^2\right). \quad (3.2.4.5)$$

Tal distribución no es una distribución de equilibrio, porque mientras la integral de colisión en (3.2.3.7) desaparece, el término de flujo no lo hace. Se dice que están en equilibrio local, con la densidad de partículas, la temperatura y la velocidad de deriva que varían en el espacio.

3.2.5. La Ecuación de Boltzmann Cuántica

Nuestra discusión anterior fue completamente para partículas clásicas. Veamos cómo cambian las cosas para las partículas cuánticas. Mantendremos la suposición del caos molecular, por lo que $f_2 \sim f_1 f_1$ como en (3.2.3.6). La principal diferencia se produce en la tasa de dispersión (3.2.3.3) para la dispersión $\vec{p} + \vec{p}_2 \rightarrow \vec{p}_1' + \vec{p}_2'$ que ahora se convierte en

$$\text{tasa} = d^3 p_2 d^3 p_1' d^3 p_2' f_1(\vec{p}) f_1(\vec{p}_2) \{1 \pm f_1(\vec{p}_1')\} \{1 \pm f_1(\vec{p}_2')\} |\mathcal{M}_{fi}|^2. \quad (3.2.5.1)$$

Los términos adicionales son los que están entre corchetes. Elegimos el signo + para bosones y el signo - para fermiones. La interpretación es particularmente clara para los

fermiones, donde el número de partículas en un estado dado no puede exceder uno. Ahora bien, no es suficiente conocer la probabilidad de que se complete el estado inicial. También necesitamos saber esa probabilidad de que el estado final sea libre para que la partícula se disperse, y eso es lo que nos dicen los factores $\{1 - f_1\}$.

Los argumentos restantes siguen siendo los mismos de antes, lo que resulta en la *ecuación cuántica de Boltzmann*

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 d^3 p'_1 d^3 p'_2 [f_1(\vec{p}'_1) f_1(\vec{p}'_2) \{1 \pm f_1(\vec{p})\} \{1 \pm f_1(\vec{p}_2)\} - f_1(\vec{p}) f_1(\vec{p}_2) \{1 \pm f_1(\vec{p}'_1)\} \{1 \pm f_1(\vec{p}'_2)\}] |\mathcal{M}_{fi}|^2 \quad (3.2.5.2)$$

Volviendo a examinar el requisito de equilibrio, aplicando logaritmos la condición de equilibrio detallado ahora se convierte en

$$\log\left(\frac{f_1^{eq}(\vec{p}'_1)}{1 \pm f_1^{eq}(\vec{p}'_1)}\right) + \log\left(\frac{f_1^{eq}(\vec{p}'_2)}{1 \pm f_1^{eq}(\vec{p}'_2)}\right) = \log\left(\frac{f_1^{eq}(\vec{p})}{1 \pm f_1^{eq}(\vec{p})}\right) + \log\left(\frac{f_1^{eq}(\vec{p}_2)}{1 \pm f_1^{eq}(\vec{p}_2)}\right), \quad (3.2.5.3)$$

lo cual nuevamente se resuelve relacionando cada logaritmo con una combinación lineal de energía y momento. Encontramos

$$f_1^{eq}(\vec{p}) = \frac{1}{e^{-\beta(\mu - E(\vec{p}) + i\vec{v} \cdot \vec{p})} \pm 1}, \quad (3.2.5.4)$$

que reproduce las distribuciones de Bose-Einstein y Fermi-Dirac.

3.3. La Ecuación de Boltzmann en un Universo en Expansión

Con todos los elementos vistos de la teoría cinética en las dos secciones anteriores, se construirá la ecuación de Boltzmann dinámica que nos permita estudiar los procesos cosmológicos de nuestro universo fuera del equilibrio y a partir de esta, construir la ecuación dinámica para la recombinación del hidrógeno, que es el corazón de este trabajo.

Recordemos que para nuestros modelos cosmológicos a estudiar estamos asumiendo *El Principio Cosmológico*, el cual afirma que el Universo, cuando se observa a escalas del orden de cientos de megapársecs, es isotrópico y homogéneo. La isotropía significa que sin importar en qué dirección se esté observando, veremos las mismas propiedades en el Universo. La homogeneidad quiere decir que cualquier punto del Universo luce igual y tiene las mismas propiedades que cualquier otro punto dado. Además, estamos conside-

rando el modelo del Universo conocido como *Universo de FRW* que usa la métrica de Friedmann-Robertson-Walker (de ahí la abreviación FWR) y que es una solución exacta de las ecuaciones de campo de Einstein de la relatividad general. Describe un universo en expansión (o contracción), homogéneo e isotrópico⁹.

3.3.1. Teoría Cinética en el Universo de FWR

La evolución de la función de distribución del espacio de fase se describe mediante la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{df}{d\lambda} = C[f]. \quad (3.3.1.1)$$

El lado izquierdo de la ecuación de Boltzmann es la derivada total de la función de distribución del espacio de fase siguiendo la trayectoria. Eso debe ser equilibrado por el cambio de partículas (fuente o sumidero) a lo largo de la ruta debido a la interacción, que está codificada por el término de colisión en el lado derecho de la ec. (3.3.1.1). Si no hay fuente o sumidero, el lado derecho desaparece y la ecuación de Boltzmann simplemente establece el teorema de Liouville que mencionamos anteriormente. Una diferencia que puede notar con respecto a la forma que veníamos manejando la ecuación de Boltzmann es que ahora usamos el parámetro afín λ en lugar del tiempo para hacer que la ecuación de Boltzmann sea covariante; de lo contrario, la ecuación de Boltzmann dependería de la elección del sistema de coordenadas. Se puede relacionar las dos derivadas usando [Jeong 2019b]

$$\varepsilon = \frac{dt}{d\lambda}. \quad (3.3.1.2)$$

3.3.2. La Ecuación de Boltzmann en el Universo de FWR

En el Universo isotrópico y homogéneo de FWR, la función de distribución de partículas solo depende del momento y el tiempo, esto es, $f = f(p, t)$. La forma usual de proceder con la ecuación de Boltzmann (3.3.1.1) es reescribir la derivada total en el lado izquierdo actuando sobre $f(p, t)$ como

$$\frac{df}{d\lambda} = \frac{dt}{d\lambda} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{dp}{d\lambda} \frac{\partial f}{\partial p}, \quad (3.3.2.1)$$

y usando la ecuación geodésica [Jeong 2019a]:

$$p \left[\frac{dp}{dt} + Hp \right] = 0,$$

⁹La profundización de los detalles de dicho modelo supera los alcances de este trabajo, pero se puede ahondar en el tema de manera muy recomendada por la claridad y sencillez de su explicación en [Jeong 2019a].

donde H es el parámetro de Hubble, definido como $H = \dot{a}/a$ y junto a $\varepsilon = dt/d\lambda \Rightarrow dt = \varepsilon d\lambda$ y unos sencillos cálculos, tenemos:

$$\frac{dp}{d\lambda} = -H\varepsilon p, \quad (3.3.2.2)$$

con la que nos auxiliamos para reescribir (3.3.2.1) como:

$$\frac{df}{d\lambda} = \varepsilon \frac{df}{dt} = \varepsilon \left[\frac{\partial f}{\partial t} - Hp \frac{\partial f}{\partial p} \right]. \quad (3.3.2.3)$$

El lado derecho de la ecuación de Boltzmann depende de la naturaleza de la interacción. A partir de ahora, veremos la interacción de dos cuerpos (colisión binaria) con la reacción $1 + 2 \leftrightarrow 3 + 4$ en la que la partícula 1 y la partícula 2 aniquilan produciendo las partículas 3 y 4, o viceversa¹⁰. Centrémonos en la partícula 1. El cambio de $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ del parámetro afín $t \sim t + \delta t$ se puede escribir como (ver ecuación (3.1.0.9))

$$f(t + \delta t) - f(t) = \frac{df}{dt} \delta t \equiv (\bar{R} - R) \delta t, \quad (3.3.2.4)$$

donde \bar{R} y R son la notación abreviada de la tasa de interacción que crea (\bar{R}) o destruye (R) la partícula 1 en la posición \vec{r} y el momento \vec{p} . ¿Cómo escribimos $C[f] = \bar{R} - R$ para estas colisiones binarias?

Consideremos una colisión binaria que ocurre dentro de un volumen espacial d^3r en la ubicación \vec{r} . El número de colisión que destruye las partículas 1 y 2 y crea 3 y 4 dentro de un intervalo δt se puede escribir como

$$R\delta t = dN_{12} dP_{12 \rightarrow 34} \delta t, \quad (3.3.2.5)$$

donde dN_{12} es el número inicial de pares en colisión (\vec{p}_1, \vec{p}_2):

$$dN_{12} = f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) \frac{d^4 p_1}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_1^2 - m_1^2) \frac{d^4 p_2}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_2^2 - m_2^2) d^3 r. \quad (3.3.2.6)$$

Aquí, utilizamos la suposición del caos molecular, que dice que la densidad del espacio de fase de las especies de partículas 1, 2 no están correlacionadas por completo, de modo que la densidad esperada de emparejamientos se obtiene simplemente multiplicando las dos densidades. $dP_{12 \rightarrow 34}$ es la tasa de transición al estado final dentro de $d^3 p_3 d^3 p_4$ que está relacionada con la matriz de transición $|\mathcal{M}_{fi}|^2$ como

¹⁰Se está haciendo un cambio de la notación 1, 2, 1', 2' que se manejó anteriormente.

$$\begin{aligned}
 dP_{12 \rightarrow 34} &= I d\sigma \\
 &= \frac{d^4 p_3}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_3^2 - m_3^2) \frac{d^4 p_4}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_4 - m_4) |\mathcal{M}_{fi}|^2 (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) \\
 &\quad \times (1 \pm f_3(\vec{p}_3))(1 \pm f_4(\vec{p}_4)), \tag{3.3.2.7}
 \end{aligned}$$

donde $I = n_2(p_2)|v_{12}^{\vec{}}|$ es el flujo incidente de la partícula 2 en el marco de reposo de la partícula 1 y el signo \pm en la última línea codifica la influencia de la partícula 3 y 4 en la tasa debida a la mejora de Bose (+) y el principio de exclusión de Pauli (-). Tenga en cuenta que la expresión anterior es manifiestamente covariante, ya que f es un escalar y que $|\mathcal{M}_{fi}|^2 = |\mathcal{M}_{if}|^2$, como ya se explicó anteriormente.

Combinando las ecuaciones (3.3.2.6) y (3.3.2.7), tenemos la expresión para R como

$$\begin{aligned}
 R &= g_2 g_3 g_4 \int \frac{d^4 p_2}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_2^2 - m_2^2) \int \frac{d^4 p_3}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_3^2 - m_3^2) \int \frac{d^4 p_4}{(2\pi)^4} (2\pi) \delta(p_4^2 - m_4^2) \\
 &\quad \times |\mathcal{M}_{fi}|^2 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3))(1 \pm f_4(\vec{p}_4)), \tag{3.3.2.8}
 \end{aligned}$$

donde g_i es el número efectivo de grados de libertad o degeneración de cada especie.

Los factores de $(2\pi)^3$ (en realidad $(2\pi\hbar)^3$ pues estamos manejando el sistema de unidades naturales $c = \hbar = k = 1$) representan el volumen de una unidad del espacio fase. Queremos sumar sobre todas esas unidades. Relativísticamente, las integrales del espacio de fase deberían ser realmente de cuatro dimensiones, sobre los tres componentes del momento y uno de la energía. Sin embargo, están restringidos a estar sobre la esfera fijada por $\varepsilon^2 = p^2 + m^2$. En ecuaciones,

$$\int d^3 p \int_0^\infty d\varepsilon \delta(\varepsilon^2 - p^2 + m^2) = \int d^3 p \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\delta(\varepsilon - \sqrt{p^2 + m^2})}{2\varepsilon} = \int \frac{d^3 p}{2\varepsilon}, \tag{3.3.2.9}$$

y de esta manera podemos reescribir R como

$$\begin{aligned}
 R &= g_2 g_3 g_4 \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3 2\varepsilon_2} \int \frac{d^3 p_3}{(2\pi)^3 2\varepsilon_3} \int \frac{d^3 p_4}{(2\pi)^3 2\varepsilon_4} \\
 &\quad \times |\mathcal{M}_{fi}|^2 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3))(1 \pm f_4(\vec{p}_4)). \tag{3.3.2.10}
 \end{aligned}$$

Como ya es sabido que $|\mathcal{M}_{if}|^2 = |\mathcal{M}_{fi}|^2$, podemos calcular \bar{R} de manera similar, y encontrar el término de colisión como:

$$\begin{aligned}
 C[f] = & \frac{g_2 g_3 g_4}{2} \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3 2\varepsilon_2} \int \frac{d^3 p_3}{(2\pi)^3 2\varepsilon_3} \int \frac{d^3 p_4}{(2\pi)^3 2\varepsilon_4} (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) |\mathcal{M}_{fi}|^2 \\
 & \times [f_3(\vec{p}_3) f_4(\vec{p}_4) (1 \pm f_1(\vec{p}_1)) (1 \pm f_2(\vec{p}_2)) - f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3)) (1 \pm f_4(\vec{p}_4))] .
 \end{aligned} \tag{3.3.2.11}$$

Combinando las ecuaciones (3.3.2.3) y la anteriores, obtenemos la forma final (pero aún preliminar) de la ecuación de Boltzmann:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_1}{\partial t} - H p_1 \frac{\partial f_1}{\partial p_1} = & \frac{g_2 g_3 g_4}{2\varepsilon_1} \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3 2\varepsilon_2} \int \frac{d^3 p_3}{(2\pi)^3 2\varepsilon_3} \int \frac{d^3 p_4}{(2\pi)^3 2\varepsilon_4} (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) |\mathcal{M}_{fi}|^2 \\
 & \times [f_3(\vec{p}_3) f_4(\vec{p}_4) (1 \pm f_1(\vec{p}_1)) (1 \pm f_2(\vec{p}_2)) - f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3)) (1 \pm f_4(\vec{p}_4))] .
 \end{aligned} \tag{3.3.2.12}$$

3.3.3. La Ecuación para la Densidad de Partículas

Para obtener la ecuación para el número de densidad [Jeong 2019b], integramos sobre todos los momentos:

$$n_1 = g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} f_1(\vec{p}_1, t) , \tag{3.3.3.1}$$

donde n_i representa la densidad de la especie i . Así pues, integrando sobre todos los momentos, pasando a coordenadas esféricas, se obtiene:

$$n_1 = g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} f_1(\vec{p}_1, t) = \frac{g_1}{2\pi^2} \int_0^\infty dp_1 p^2 f_1(\vec{p}_1, t) .$$

Entonces, la ec. (3.3.2.12) se multiplica en ambos lados por el factor $g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3}$ para completar la n_1 . En el lado izquierdo, multiplicando por dicho factor y ordenando términos, tenemos

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left(\underbrace{g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} f_1(\vec{p}_1, t)}_{=n_1} \right) - H \underbrace{g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} p_1}_{=\frac{g_1}{2\pi^2} \int_0^\infty dp_1 p^2} \frac{\partial f_1(\vec{p}_1, t)}{\partial p_1} \\
 \frac{dn_1}{dt} - H \underbrace{\frac{g_1}{2\pi^2} \int_0^\infty dp_1 p^3 \frac{\partial f_1(\vec{p}_1, t)}{\partial p_1}}_{\text{Integrando por partes}} = \frac{dn_1}{dt} + 3Hn_1 = \frac{1}{a^3} \frac{d(a^3 n_1)}{dt} .
 \end{aligned} \tag{3.3.3.2}$$

donde a es el factor de escala cosmológico.

De igual manera, el lado derecho de (3.3.2.12) se vuelve más geométrico y se obtiene

$$\begin{aligned}
 g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} C[f] = & g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3 2\varepsilon_1} g_2 \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3 2\varepsilon_2} g_3 \int \frac{d^3 p_3}{(2\pi)^3 2\varepsilon_3} g_4 \int \frac{d^3 p_4}{(2\pi)^3 2\varepsilon_4} \\
 & \times (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) |\mathcal{M}_{fi}|^2 \\
 & \times [f_3(\vec{p}_3) f_4(\vec{p}_4) (1 \pm f_1(\vec{p}_1)) (1 \pm f_2(\vec{p}_2)) - f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3)) (1 \pm f_4(\vec{p}_4))] .
 \end{aligned}
 \tag{3.3.3.3}$$

Por lo tanto, la ecuación para la densidad numérica se convierte en:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{a^3} \frac{d(a^3 n_1)}{dt} = & g_1 \int \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3 2\varepsilon_1} g_2 \int \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3 2\varepsilon_2} g_3 \int \frac{d^3 p_3}{(2\pi)^3 2\varepsilon_3} g_4 \int \frac{d^3 p_4}{(2\pi)^3 2\varepsilon_4} \\
 & \times (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) |\mathcal{M}_{fi}|^2 \\
 & \times [f_3(\vec{p}_3) f_4(\vec{p}_4) (1 \pm f_1(\vec{p}_1)) (1 \pm f_2(\vec{p}_2)) - f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3)) (1 \pm f_4(\vec{p}_4))]
 \end{aligned}
 \tag{3.3.3.4}$$

que es la ecuación de Boltzmann para un Universo en expansión y es una ecuación integro-diferencial. En ausencia de interacciones, el lado izquierdo de la ecuación (3.3.3.4) dice que la densidad multiplicada por el factor de escala al cubo se conserva. Esto refleja la naturaleza del universo en expansión: a medida que se expanden las coordenadas comóviles, el volumen de una región que contiene un número fijo de partículas crece como a^3 . Por lo tanto, la densidad numérica física de estas partículas se reduce como a^{-3} . Las interacciones se incluyen en el lado derecho de la ecuación de Boltzmann.

3.3.4. La Ecuación de Boltzmann Simplificada

Ahora, volvamos a la ecuación de Boltzmann completa, ec. (3.3.3.4). Para ser exactos, estas ecuaciones integro-diferenciales deben resolverse para todas las especies de partículas 1, 2, 3 y 4 que están involucradas en la interacción. Afortunadamente, sin embargo, para los casos que nos interesan, la ec. (3.3.3.4) se puede reducir a una forma bastante simple; veamos:

- No necesitamos resolver para las cuatro partículas involucradas en el proceso de colisión en absoluto, porque solo consideraremos que una partícula/proceso no está en equilibrio a la vez. Es decir, otras tres especies de partículas se encuentran de forma segura en el estado de equilibrio térmico. Además, para muchos casos, la partícula/proceso que nos interesa es mantener el equilibrio cinético, pero se desequilibra al alejarse del equilibrio químico (es decir, la reacción inversa de la ecuación química

deja de ocurrir, pero aún así puede haber dispersión frecuente para mantenerlos a la misma temperatura).

- Normalmente estamos interesados en el caso donde $(\varepsilon - \mu) \gtrsim T$ donde las estadísticas de espín (Fermi-Dirac y Bose-Einstein) no son importantes, y la función de distribución sigue las estadísticas de Maxwell-Boltzmann. Por lo tanto, podemos descuidar la mejora de Bose y término de bloqueo de Pauli por completo, y la función de distribución de espacio de fase se vuelve

$$f_i(\varepsilon) \simeq e^{\mu_i/T} e^{-\varepsilon_i/T} \equiv e^{\mu_i/T} f^{(0)}(\vec{p}). \quad (3.3.4.1)$$

- Usando esta aproximación, la densidad numérica de las especies de partículas i se puede escribir como

$$n_i = g_i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} f_i = e^{\mu_i/T} g_i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-\varepsilon_i/T} \equiv e^{\mu_i/T} n_i^{(0)}, \quad (3.3.4.2)$$

donde $n_i^{(0)}$ es la densidad numérica de equilibrio de la especie i sin potencial químico y se define como:

$$n_i^{(0)} \equiv g_i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-\varepsilon_i/T} = \begin{cases} g_i \left(\frac{m_i T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-m_i/T} & m_i \gg T \\ g_i \frac{T^3}{\pi^2} & m_i \ll T \end{cases} \quad (3.3.4.3)$$

Con la definición anterior y la de la ec. (3.3.4.2), $e^{\mu_i/T}$ se puede reescribir como

$$\frac{n_i}{n_i^{(0)}} = e^{\mu_i/T}. \quad (3.3.4.4)$$

Con estas tres simplificaciones, la única incógnita que queda por averiguar es el potencial químico μ_i , o de manera equivalente, la densidad numérica n_i (están relacionados por la densidad numérica conocida $n_i^{(0)}$ en una determinada temperatura). Usando la función de distribución de Maxwell-Boltzmann,

$$\begin{aligned} & [f_3(\vec{p}_3) f_4(\vec{p}_4) (1 \pm f_1(\vec{p}_1)) (1 \pm f_2(\vec{p}_2)) - f_1(\vec{p}_1) f_2(\vec{p}_2) (1 \pm f_3(\vec{p}_3)) (1 \pm f_4(\vec{p}_4))] \\ & \simeq e^{-(\varepsilon_3 + \varepsilon_4)/T} e^{(\mu_3 + \mu_4)/T} - e^{-(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)/T} e^{(\mu_1 + \mu_2)/T} = f_1^{(0)}(\vec{p}_1) f_2^{(0)}(\vec{p}_2) \left[\frac{n_3 n_4}{n_3^{(0)} n_4^{(0)}} - \frac{n_1 n_2}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \right]. \end{aligned} \quad (3.3.4.5)$$

Con todo esto, la ecuación de Boltzmann se simplifica enormemente. Definimos la sección transversal térmicamente promediada como

$$\langle \sigma v \rangle = \frac{1}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \prod_{i=1}^4 \left[g_i \int \frac{d^3 p_i}{(2\pi)^3 2\varepsilon_i} \right] (2\pi)^4 \delta^4(p_4 + p_3 - p_1 - p_2) |\mathcal{M}_{fi}|^2 f_1^{(0)}(\vec{p}_1) f_2^{(0)}(\vec{p}_2). \quad (3.3.4.6)$$

Entonces, la ecuación de Boltzmann queda como:

$$\frac{1}{a^3} \frac{d}{dt} (n_1 a^3) = \langle \sigma v \rangle n_1^{(0)} n_2^{(0)} \left[\frac{n_3 n_4}{n_3^{(0)} n_4^{(0)}} - \frac{n_1 n_2}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \right] \quad (3.3.4.7)$$

Así, tenemos una ecuación diferencial simple para la densidad numérica de las especies; podemos rastrear las abundancias a partir de esta ecuación.

Una observación cualitativa sobre la ecuación (3.3.4.7) el lado izquierdo es del orden de n_1/t , o, ya que el tiempo cosmológico típico es H^{-1} , $n_1/t = n_1 H$. El lado derecho es del orden de $n_1 n_2 < \sigma v >$. Por lo tanto, si la velocidad de reacción $n_2 < \sigma v >$ es mucho mayor que la velocidad de expansión, entonces los términos en el lado derecho serán mucho mayores que los de el lado izquierdo.

Entonces, la única forma de mantener la igualdad es para los términos individuales sobre el lado derecho a cancelar. Por lo tanto, cuando las velocidades de reacción son grandes, estamos en el equilibrio y por lo tanto

$$\frac{d}{dt} (n_1 a^3) = 0, \quad (3.3.4.8)$$

lo cual implica que la ecuación (3.3.4.7) queda como

$$\frac{n_3 n_4}{n_3^{(0)} n_4^{(0)}} = \frac{n_1 n_2}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \implies \frac{n_3 n_4}{n_1 n_2} = \frac{n_3^{(0)} n_4^{(0)}}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \quad (3.3.4.9)$$

Esta ecuación, obtenida de un análisis virtual de la ecuación de Boltzmann, resulta ser la ecuación de Saha; la ecuación de Boltzmann analizada en el equilibrio nos conduce de nuevo a la ecuación de Saha, pues

$$\frac{n_3 n_4}{n_3^{(0)} n_4^{(0)}} = \frac{n_1 n_2}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \implies e^{(\mu_3 + \mu_4)/T} = e^{(\mu_1 + \mu_2)/T} \implies \mu_3 + \mu_4 = \mu_1 + \mu_2, \quad (3.3.4.10)$$

que es la relación de equilibrio químico en términos de los potenciales.

3.3.5. La Ecuación de Boltzmann para la Recombinación

Ahora, construyamos la ecuación de Boltzmann para la recombinación. De la ec. (3.3.4.7), sustituyendo $n_1 = n_e$, $n_2 = n_p = n_e$, $n_3 = n_H$ y $n_4 = n_\gamma = n_\gamma^{(0)}$. El hecho de que $n_\gamma = n_\gamma^{(0)}$

proviene de que, como se explicó en el capítulo 2, el potencial químico de los fotones es cero, es decir, $\mu_\gamma = 0$, entonces, de la ecuación (3.3.4.4) tenemos:

$$\frac{n_\gamma}{n_\gamma^{(0)}} = e^{\mu_\gamma/T} \Rightarrow \frac{n_\gamma}{n_\gamma^{(0)}} = e^{0/T} = 1 \Rightarrow n_\gamma = n_\gamma^{(0)}.$$

Entonces la ecuación de Boltzmann queda como:

$$\frac{1}{a^3} \frac{d}{dt}(n_e a^3) = n_e^{(0)} n_p^{(0)} \langle \sigma v \rangle \left[\frac{n_H}{n_H^{(0)}} - \frac{n_e^2}{n_e^{(0)} n_p^{(0)}} \right]. \quad (3.3.5.1)$$

Se definió la fracción de ionización X_e como $X_e = n_e/n_b \rightarrow n_e = n_b X_e$; entonces, sustituyendo en la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{1}{a^3} \frac{d}{dt}(n_b a^3 X_e) = \langle \sigma v \rangle \left[n_H \frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}} - n_b^2 X_e^2 \right] = n_b \langle \sigma v \rangle \left[\frac{n_H}{n_b} \frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}} - n_b X_e^2 \right]. \quad (3.3.5.2)$$

Pero $n_b a^3$ es constante y además $1 - X_e = (n_b - n_e)/n_b = n_H/n_b$, tenemos que

$$\frac{1}{a^3} n_b a^3 \frac{dX_e}{dt} = n_b \langle \sigma v \rangle \left[(1 - X_e) \frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}} - n_b X_e^2 \right], \quad (3.3.5.3)$$

y del hecho ya conocido de las ecuaciones de Saha en el equilibrio, $\frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}} = \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-1/T} = \frac{n_e n_p}{n_H}$, así que:

$$\frac{dX_e}{dt} = \langle \sigma v \rangle \left[(1 - X_e) \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-1/T} - n_b X_e^2 \right]. \quad (3.3.5.4)$$

La tasa de ionización es típicamente definida como [Dodelson 2003]

$$\beta \equiv \langle \sigma v \rangle \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-1/T}, \quad (3.3.5.5)$$

y la tasa de recombinación [Dodelson 2003]

$$\alpha^{(2)} \equiv \langle \sigma v \rangle. \quad (3.3.5.6)$$

La tasa de recombinación tiene superíndice (2) porque la recombinación al estado base ($n = 1$) no es relevante y para diferenciarla de la constante de estructura fina α . Las recombinaciones de estado base conducen a la producción de un fotón ionizante, y este fotón ioniza inmediatamente un átomo neutro. El efecto neto de tal recombinación es cero: no se forman nuevos átomos neutros de esta manera.

La única forma de proceder con la recombinación es mediante la captura a uno de los exci-

tados estados de hidrógeno; para una buena aproximación, esta tasa es [Dodelson 2003]

$$\alpha^{(2)} = 9,78 \frac{\alpha^2}{m_e^2} \left(\frac{I}{T}\right)^{1/2} \ln\left(\frac{I}{T}\right). \quad (3.3.5.7)$$

Entonces, finalmente, la ecuación de Boltzmann para la Recombinación fuera del equilibrio (en su forma más general) queda como¹¹:

$$\boxed{\frac{dX_e}{dt} = [(1 - X_e)\beta - X_e^2 n_b \alpha^{(2)}]} \quad (3.3.5.8)$$

La ecuación anterior es la que vamos a resolver numéricamente para analizar el proceso de la *Recombinación del Hidrógeno* fuera del equilibrio y desde un punto de vista dinámico, que se trata en el siguiente capítulo

¹¹Según la literatura que se use, la notación de $\alpha^{(2)}$ y β puede cambiar, además del ordenamiento del lado derecho de la ecuación, pero la esencia es la misma.

Capítulo 4

La Recombinación del Hidrógeno fuera del equilibrio y el *freeze-out* de los electrones: un enfoque cinético

Después de haber hecho un análisis detallado de la Teoría Cinética y de la ecuación de Boltzmann, estamos en posición de discutir la Recombinación del Hidrógeno desde un punto de vista dinámico y más realista que el usado en el capítulo 2, esto es, dejando de lado la suposición del equilibrio termodinámico y haciendo el análisis de la dinámica de la recombinación fuera de éste.

Pero antes de estudiar la ecuación dinámica obtenida en el capítulo anterior, demos una revisión al equilibrio y la ecuación de Saha obtenida de la ecuación de Boltzmann.

4.1. Revisión a la Recombinación en el Equilibrio

Nuestro interés principal en esta sección es la *Recombinación del Hidrógeno*, el proceso en que los electrones libres y protones se combinan para formar átomos de hidrógeno en el estado base ($1s$):



En el Universo temprano, cuando la temperatura del fotón es alta, la reacción debe estar en equilibrio debido a la interacción frecuente entre protones y electrones. En este caso, podemos usar la condición de equilibrio químico

$$\mu_1 + \mu_2 = \mu_3 + \mu_4 , \quad (4.1.0.2)$$

con $1 = e^-$, $2 = p$, $3 = H$ y $4 = \gamma$ y recordando que el potencial químico de los fotones es cero (ver la sección 2.4), tenemos:

$$\mu_e + \mu_p = \mu_H, \quad (4.1.0.3)$$

y así, la ecuación de Saha (3.3.4.9) queda como:

$$\frac{n_e n_p}{n_H} = \frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}}. \quad (4.1.0.4)$$

Usando la definición de $n_i^{(0)}$ para $m_i \gg T$ y con $g_e = g_p = 2$, $g_H = 4$ y como $m_p \sim m_H$, además $m_h - m_p - m_e \equiv I$ siendo $I = 13,6eV$ la energía de ionización del estado base, el lado derecho queda como

$$\frac{n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_H^{(0)}} = \frac{g_e \left(\frac{m_e T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-m_e/T} g_p \left(\frac{m_p T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-m_p/T}}{g_H \left(\frac{m_H T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-m_H/T}} = \left(\frac{m_e T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-I/T}. \quad (4.1.0.5)$$

Podemos reescribir (4.1.0.4) de la siguiente manera:

$$\frac{n_e n_p}{n_H} = \left(\frac{m_e T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-I/T}. \quad (4.1.0.6)$$

Se definió la fracción de ionización como

$$X_e \equiv \frac{n_e}{n_b} = \frac{n_e}{n_e + n_H} = \frac{n_p}{n_p + n_H}, \quad (4.1.0.7)$$

y con el mismo proceso algebraico visto en el capítulo 2, sección 2.5, la ecuación de Saha queda finalmente como:

$$\frac{X_e^2}{1 - X_e} = \frac{1}{n_p + n_H} \left(\frac{m_e T}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-I/T} \quad (4.1.0.8)$$

Nótese que no aparecen las constantes \hbar , c y la k de Boltzmann, pues estamos en el sistema de unidades naturales (o Planckianas) donde $\hbar = k = c = 1$. Es la misma ecuación de Saha en el equilibrio obtenida en el capítulo 2, la ecuación (2.5.0.7), sólo que expresada en dicho sistema de unidades.

El denominador de la parte derecha de la ecuación es conocido [Jeong 2019b]

$$n_p + n_H \simeq 0,76 \times 10^{-10} \eta_{10} n_\gamma \simeq 3,124 \times 10^{-8} \eta (T/2,726K)^3 cm^{-3}. \quad (4.1.0.9)$$

Más concretamente, todo el lado derecho de la ecuación se convierte en ¹

¹La razón barión-fotón (ver secciones B.1, B.2 y B.3) es constante sobre el tiempo, y toma el valor de

$$\eta_{10} = 10^{10} \eta = 10^{10} \frac{n_b}{n_\gamma} = 10^{10} \frac{\rho_{crit} \Omega_b}{m_p n_\gamma} \simeq 10^{10} \frac{1,1232 \times 10^{-5} \Omega_b h^2}{411} = 6,286 \left(\frac{\Omega_b h^2}{0,023}\right) \quad (4.1.0.10)$$

$$\frac{1}{n_p + n_H} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/T} = 2,498 \times 10^{16} \eta_{10}^{-1} \left(\frac{I}{T} \right)^{3/2} e^{-I/T}. \quad (4.1.0.11)$$

Así, haciendo un poco de álgebra y algunas cuentas, la ecuación de Saha se convierte a

$$\frac{X_e^2}{1 - X_e} = \exp \left[37,76 - \frac{I}{T} + \frac{3}{2} \ln \frac{I}{T} - \ln \eta_{10} \right]. \quad (4.1.0.12)$$

La ecuación anterior, al resolverla y graficarla, resulta en una imagen igual a la de la ecuación (2.6.0.3) (ver figura 2.3, en la página 24)

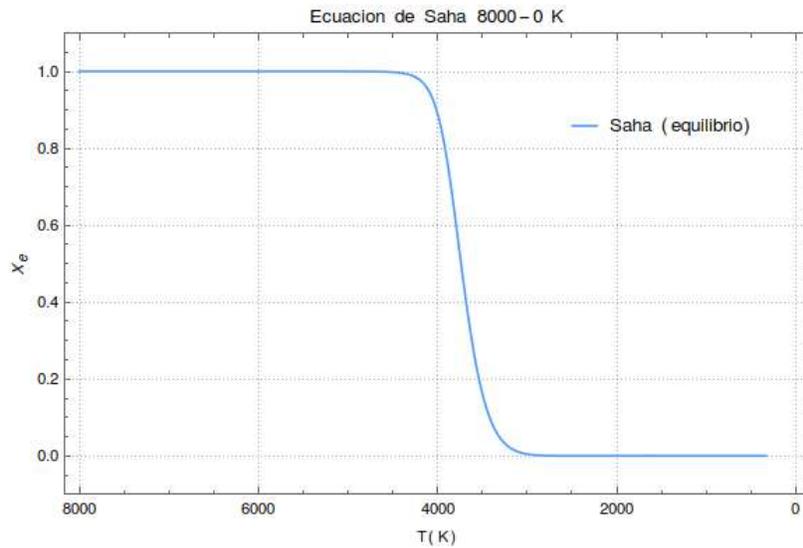


Figura 4.1: Grafica de la Ecuación de Saha, ec. (4.1.0.12), de 8000-0 K. Se puede observar la total similitud con la figura 2.3.

Cuando $T = I = 13,6 \text{ eV} = 157821,2422 \text{ K}$ (es decir, cuando la temperatura alcanza la temperatura de ionización)², el lado derecho de la ecuación (4.1.0.12) es $e^{34,92} \approx 1,47 \times 10^{15}$ (un número muy grande) y esto implica que $X_e = 1$ en su solución positiva. La fracción de ionización X_e decae y la fracción neutra es del orden de la unidad cuando el lado derecho de la ecuación de Saha es del orden también de la unidad, que ocurre cuando el argumento de la exponencial tiende a cero

²Dado que estamos trabajando con unidades naturales, podemos convertir energía a temperatura a través de $1 \text{ K} = 8.6173324 \times 10^{-5} \text{ eV} \rightarrow 1 \text{ eV} = 11604.51928 \text{ K}$. Fuera del contexto de las unidades naturales, recordemos que la constante de Boltzman k_B es la encargada de relacionar temperatura absoluta y energía; al fijar $k_B = 1$, los *kelvin* tienen la misma naturaleza que los *eV*, hay un factor numérico de conversión entre ellos. Ver apéndice C para más detalles.

$$37,76 - \frac{I}{T} + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{I}{T}\right) - \ln \eta_{10} \approx 0 \rightarrow \frac{I}{T} - \frac{3}{2} \ln\left(\frac{I}{T}\right) \approx 35,922, \quad (4.1.0.13)$$

y la temperatura puede ser calculada resolviendo numéricamente la expresión anterior, que arroja un valor de $T = 3802,26K$, valor en el cuál la exponencial va como

$$\exp\left[37,76 - \frac{I}{T} + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{I}{T}\right) - \ln \eta_{10}\right] = 1,00320552, \quad (4.1.0.14)$$

y se puede obtener el valor de X_e a esta temperatura a través de

$$\frac{X_e^2}{1 - X_e} = 1,00320552 \rightarrow X_e^2 + 1,00320552X_e - 1,00320552 = 0, \quad (4.1.0.15)$$

cuya solución positiva es $X_e^{(eq)} = 0,618581 \approx 0,618$. La razón por la que tenemos que esperar mucho después de que la temperatura alcanza la temperatura de ionización hasta la formación de hidrógeno neutro es porque la razón barión-fotón es pequeña. Aunque la temperatura media de los fotones es pequeña, tenemos grandes cantidad de fotones en la cola de la distribución de Planck que pueden ionizar todos los átomos de hidrógeno. Por debajo de esta temperatura, la densidad del número de equilibrio cae rápidamente. Si definimos *el momento de Recombinación* como el instante en que la fracción de ionización en el equilibrio se hace la mitad [Ryden 2003], ($X_e^{(eq)} = 0,5$) entonces

$$T_{rec} = 3737,52K, \quad (4.1.0.16)$$

pero la fracción de ionización en, digamos, $T = 3000K$, aquí ya $X_e \ll 1$

$$X_e^{(eq)}(T = 3000K) \approx 2,157 \times 10^{-5}. \quad (4.1.0.17)$$

Al igual que como hicimos en el capítulo 2, podemos resolver numéricamente la ecuación (4.1.0.12) y construir una tabla de valores para algunos porcentajes de ionización

X_e	$T(K)$
0.9	4012.26
0.5	3737.52
0.1	3418.51
0.001	2830.13

Comparando con la tabla del capítulo 2, los valores para los mismos porcentajes son muy parecidos y dado que la ecuación de Saha derivada de la de Boltzmann ahora involucra un poco más de física, podemos decir con certeza que, aún en el equilibrio, estos valores son más precisos que los del capítulo 2. Sin embargo, sigue siendo fundamental hacer el análisis fuera del equilibrio.

La ecuación en el equilibrio de Saha nos dice que la fracción de ionización debe continuar disminuyendo exponencialmente a medida que baja la temperatura. Sin embargo, esto no ocurre en un universo en expansión; la fracción de ionización se congela en su lugar. Más importante aún, la descripción del equilibrio falla casi inmediatamente después del comienzo de la recombinación. La razón principal del fracaso de la fórmula de Saha es la gran cantidad de fotones energéticos emitidos cuando los núcleos y los electrones se combinan. Estos fotones no térmicos distorsionan significativamente la cola de alta energía del espectro de radiación térmica exactamente a energías cruciales para la recombinación. Un vistazo en escala logarítmica de la figura 4.1 nos indica lo rápido que dicha fracción decae exponencialmente.

Como resultado, es esencial tener en cuenta la desviación del equilibrio y debemos usar la teoría cinética.

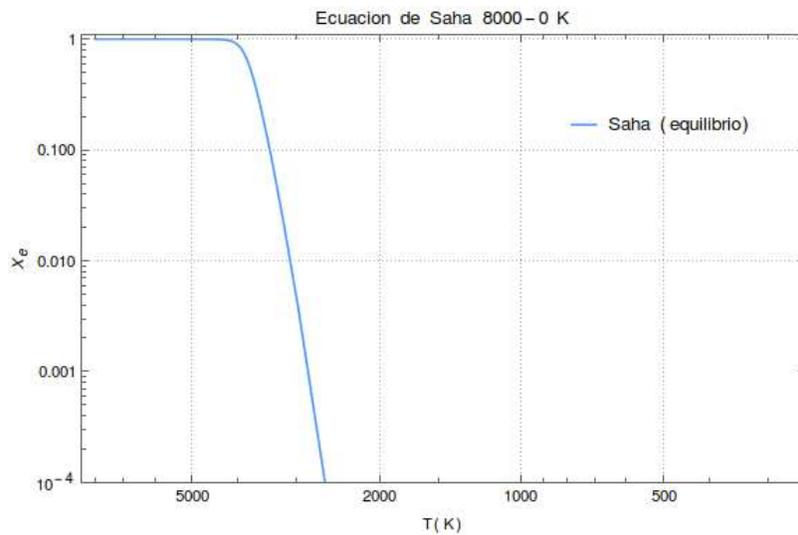


Figura 4.2: Gráfica de la Ecuación de Saha, ec. (4.1.0.12), de 8000-0 K en escala logarítmica. Es muy marcado el rápido descenso a cero de la fracción de electrones libres X_e .

El redshift en la recombinación es $z_{rec} = T_{rec}/T_{cmb} - 1 \simeq 1370$, y el tiempo cósmico es $t_{rec} \simeq 252000$ años desde el Big-Bang [Jeong 2019b].

4.2. La Recombinación Fuera del Equilibrio

El cálculo anterior hecho en el equilibrio no es lo que sucede en nuestro universo, en particular después de que la fracción de ionización decae significativamente. En cambio, la fuerte caída de la densidad numérica de electrones y protones congela el proceso de recombinación, y tenemos que usar la ecuación cinética completa. Ahora, resolveremos el proceso de congelación (*freeze-out*) utilizando la ecuación de Boltzmann para la densidad

del número de electrones X_e obtenida en el capítulo anterior a partir del análisis de la Teoría Cinética, ecuación (3.3.5.8),

$$\frac{dX_e}{dt} = \left[(1 - X_e)\beta - X_e^2 n_b \alpha^{(2)} \right] \quad (4.2.0.1)$$

Podemos intentar resolver la ecuación anterior, pero esta **NO** es la manera correcta. Necesitamos incluir más física aún.

Primero que nada, es conocido que la recombinación al estado base no dará un cambio neto de la fracción de ionización. Esto se debe a que un fotón de recombinación con $E > 13,6eV$ se emitirá en este proceso. Este fotón tiene una sección transversal de fotoionización (a $E = 13,6eV$) de

$$a_{\nu_0} = \frac{2^9 \pi \alpha}{3e^2} \pi a_0^2 \approx 6,30 \times 10^{-18} \text{ cm}^2, \quad (4.2.0.2)$$

donde $\alpha = 1/137$ es la constante de estructura fina mencionada arriba y $a_0 = 0,5292\text{\AA}$ es el radio de Bohr. La densidad numérica total de hidrógenos y protones a la temperatura de recombinación $T \approx 3500K$ ($\Omega_b h^2 = 0,023 \pm 0,003$) es $n_b = n_{H,total} \approx 416 \text{ cm}^{-3}$, lo que da el tiempo libre medio de

$$\tau_\gamma = \frac{1}{n_H a_{\nu_0} c} = 12720(1 - X_e)^{-1} \text{ s}. \quad (4.2.0.3)$$

Por lo tanto, el tiempo libre medio para el fotón ionizante es mucho menor que el tiempo de Hubble ($\sim 10^5$ años) siempre que la fracción de electrones $1 - X_e > 10^{-9}$ (que es casi siempre cierto para nuestro caso de interés).

Esto significa que el fotón de recombinación emitido por la recombinación en el estado base siempre ioniza otro hidrógeno neutro para no producir un cambio neto. Por lo tanto, **la recombinación se debe hacer primero al estado n superior y luego de cascada hasta el estado base** [Jeong 2019b]. Este proceso se llama aproximación de caso-B. El coeficiente de tasa de recombinación de *case-B* es [Péguignot 1991]

$$\alpha_B \equiv \langle \sigma v \rangle_B = \frac{4,309 \times 10^{-13} T_4^{-0,6166}}{1 + 0,6703 T_4^{0,5300}} \text{ cm}^3/\text{s}, \quad (4.2.0.4)$$

donde $T_4 \equiv T/(10^4 K)$.

Pero, incluso después de excluir la recombinación al estado fundamental, la recombinación al nivel n más alto y luego en cascada producirá fotones de la serie Lyman que tienen una gran sección transversal para ser capturados por un átomo de hidrógeno. Estos fotones excitan los átomos de hidrógeno adyacentes a los estados de alta energía para que puedan ser fácilmente fotoionizados nuevamente. Por lo tanto, ambos no son el canal principal a través del cual se ha producido la recombinación cósmica.

Las dos rutas principales para las recombinaciones son *a*) decaimiento de dos fotones y *b*) fotones de Lyman-alpha (desde el estado excitado $n = 2$ a $n = 1$) desplazados al rojo (*redshifted photons*).

Ahora que se tiene un panorama general de la recombinación fuera del equilibrio, se hará un análisis con distintas maneras de resolver la ecuación (4.2.0.1) y los resultados que arrojan, para compararlos tanto con el equilibrio como entre ellas.

Para entender términos como estado base, niveles de energía n o superiores, es necesario tratar al átomo de hidrógeno neutro con la notación de los número cuánticos n y ℓ , donde n es número cuántico principal, que indica el nivel de energía donde se encuentra el electrón, $n = 1, 2, 3, \dots$, y ℓ es el número cuántico secundario, que indica el momento angular orbital del electrón, puede ser *s*, *p*, *d* y *f* (0, 1, 2 y 3, respectivamente).

La dupla $n\ell$ será la manera de expresar el estado del átomo de hidrógeno y será recurrente en el texto a partir de aquí.

Los enfoques a considerar de la recombinación fuera del equilibrio son 5: Mukhanov, Peebles tres niveles y multinivel, Weinberg y una perspectiva numérica a través del código HyRec. Todos nos dan la solución a la recombinación fuera del equilibrio, cada autor a su manera, pero llegando a lo mismo, es decir, misma esencia física y matemática. Se seleccionaron estos enfoques por las siguientes razones:

- *Mukhanov*: por la claridad y sencillez de la explicación del proceso fuera del equilibrio, nos da la primera pauta de la recombinación directa al estado base y en cascada hacia este. Es una forma muy intuitiva de explicar el proceso.
- *Peebles 3 niveles*: James Peebles, quién es considerado el padre de la recombinación fuera del equilibrio con su clásico artículo [Peebles 1968] no podía faltar en este trabajo. Dado que la recombinación directa al estado base $1s$ no contribuye a crear átomos de hidrógeno neutro, explica el proceso a través de la desexcitación de estados superiores de energía $n > 2$ al nivel $n = 2$ y de ahí al estado base.
- *Peebles multinivel*: este enfoque es una mejora al anterior, considerando distintas transiciones en cascada hasta el estado $n = 2$ y de éste al estado base $1s$, afinando así el proceso e introduciendo un factor de ajuste conocido como *fudge factor* (más adelante se discutirá al respecto).
- *Weinberg*: utiliza una notación y explicación clara de la recombinación fuera del equilibrio, partiendo de un *review* de éste. Es, en otras palabras, otra forma de llegar a la explicación de los procesos de Peebles.
- *HyRec Code*: es un código de dominio público para la recombinación fuera del equilibrio (de ahí su nombre, Hydrogen Recombination) que aprovecha el poder computacional moderno para afinar detalles físicos del proceso.

4.2.1. La Recombinación a la Mukhanov: un primer vistazo al proceso fuera del equilibrio.

El proceso usado por Mukhanov en [Mukhanov 2005] es muy similar a los que veremos posteriormente, pero usa algunas simplificaciones y aproximaciones que hacen muy entendible el proceso de recombinación fuera del equilibrio a modo de introducción.

La recombinación directa al estado fundamental acompañada de la emisión de un fotón no aumenta sustancialmente el número de átomos neutros porque el fotón emitido tiene suficiente energía para ionizar inmediatamente el primer átomo de hidrógeno neutro que encuentra. Estos dos procesos competitivos (ionización-des-ionización) ocurren a tasas muy altas y no producen cambios netos en n_H . Más eficiente es la recombinación en cascada, en la que el hidrógeno neutro se produce primero en un estado excitado y luego se desintegra al estado fundamental en una secuencia de pasos. Sin embargo, incluso en la recombinación en cascada, se emite al menos un fotón muy energético correspondiente a la diferencia de energía entre los estados $2p$ y $1s$ del átomo de hidrógeno. Este fotón llamado *Lyman - α* , $L\alpha$, tiene una energía $3B_H/4 = 117000K$ (donde $B_H = 13,6eV$, la energía de ionización del hidrógeno) y una sección transversal de absorción de resonancia bastante grande, $\sigma_\alpha \simeq 10^{-17} - 10^{-16} cm^2$, a la temperatura de recombinación. Por lo tanto, los fotones $L\alpha$ se reabsorben en poco tiempo, $\tau_\alpha \simeq (\sigma_\alpha n_H)^{-1} \sim 10^3 - 10^4 s$, después de la emisión. Tenemos que comparar este tiempo con el tiempo cosmológico en la recombinación. Durante la época dominada por la materia, el tiempo cosmológico puede expresarse fácilmente en términos de la temperatura de radiación

$$t_{sec} \simeq 2,75 \times 10^{17} (\Omega_m h_{75}^2)^{-1/2} \left(\frac{T_{\gamma 0}}{T} \right)^{3/2}. \quad (4.2.1.1)$$

En el momento de la recombinación, $\tau_\alpha \ll t \sim 10^{13} s$ y en consecuencia, los fotones $L\alpha$ no se desplazan significativamente hacia el rojo antes de la reabsorción. Para simplificar nuestras consideraciones, descuidaremos el efecto de desplazamiento al rojo.

La presencia de una gran cantidad de fotones $L\alpha$ y otros fotones energéticos resulta en una mayor abundancia de electrones, protones y átomos de hidrógeno en estados excitados $2s$ y $2p$ de lo esperado de acuerdo con la fórmula de equilibrio de Saha. Esto retrasa la recombinación de modo que, para una temperatura dada, la fracción de ionización real excede su valor de equilibrio. El sistema completo de ecuaciones cinéticas que describe la recombinación fuera del equilibrio es bastante complicado y lo resolveremos numéricamente.

Descuidamos todos los estados de hidrógeno altamente excitados para simplificar y retenemos solo los estados $1s$, $2s$ y $2p$ del hidrógeno neutro. Los ingredientes restantes son electrones, protones y fotones térmicos, así como $L\alpha$ y otros fotones no térmicos emitidos durante la recombinación. Las principales reacciones en las que participan estos compo-

nentes se representan simbólicamente en la figura 4.3. La recombinación directa al estado fundamental puede ignorarse porque no produce un cambio neto de hidrógeno neutro, como se explicó anteriormente. La radiación térmica domina en la ionización de los estados $2s$ y $2p$. De hecho, para ionizar un átomo excitado, la energía de un fotón solo debe ser mayor que $B_H/4$. El número de tales fotones térmicos es mucho mayor que el número de fotones no térmicos energéticos y, por lo tanto, al considerar la ionización de átomos excitados, podemos ignorar la distorsión del espectro de radiación térmica.

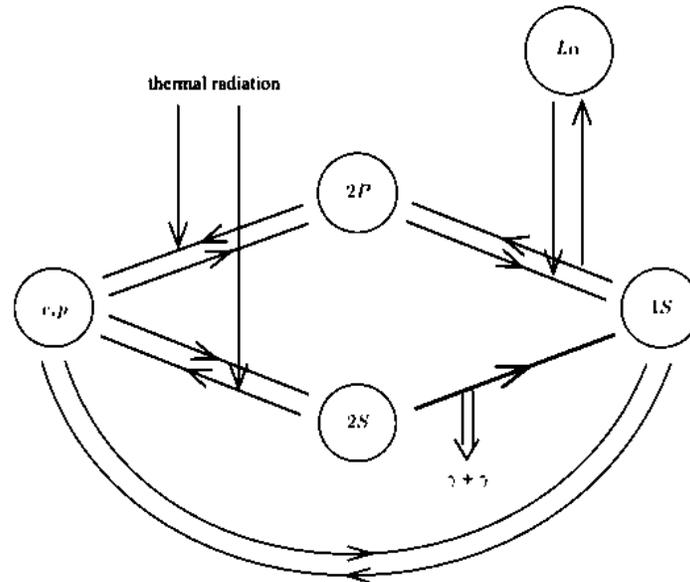


Figura 4.3: Diagrama de la representación simbólica de las reacciones principales de la recombinación [Mukhanov 2005]. La recombinación directa al estado fundamental (del depósito e, p al $1s$) se ignora pues no produce un cambio neto del hidrógeno neutro.

En la recombinación a los estados $2s$ y $2p$ (representados por los depósitos con su nombre), la radiación térmica domina y si un fotón térmico choca con un átomo de hidrógeno en estos estados, serán ionizados de inmediato (del depósito $2p$ o $2s$ al e, p).

El estado $2p$ hace la transición al estado $1s$ mediante la emisión de un fotón $L\alpha$. El estado $1s$ se excita al estado $2p$ absorbiendo un fotón $L\alpha$

El estado $2s$ se desexcita al $1s$ con la desintegración (llamada de dos fotones) $2s \rightarrow 2\gamma + 1s$. estos fotones no son de alta energía y conforme el proceso avanza, ya no son capaces de reionizar átomos de H excitados o en el estado base. Lo anterior es la fuente principal de recombinación al estado $1s$.

En contraste, los fotones térmicos no juegan un papel significativo en las transiciones entre los estados $1s$ y $2s$ después del comienzo de la recombinación. Estas transiciones se deben principalmente a los fotones $L\alpha$ no térmicos. Cuando la desviación del equilibrio se hace grande y el nivel de $2s$ está sobrepoblado, podemos ignorar la transición $1s + \gamma +$

$\gamma \rightarrow 2s$ en comparación con la desintegración de dos fotones $2s \rightarrow 1s + \gamma + \gamma$. (Una transición con un solo fotón está prohibida por la conservación del momento angular). La tasa de desintegración de dos fotones, $W_{2s \rightarrow 1s} \simeq 8,23s^{-1}$, es muy pequeña (compárese, por ejemplo, con $W_{2p \rightarrow 1s} \simeq 4 \times 10^8 s^{-1}$); sin embargo, esta descomposición desempeña el papel dominante en la recombinación sin equilibrio. En términos de la imagen de tubería y depósito, la transición de dos fotones es la fuente principal de fuga irreversible desde el depósito e, p hacia el depósito $1s$. Como todos los demás procesos dan como resultado fotones de alta energía que reionizan el hidrógeno neutro y devuelven electrones al depósito e, p , la tasa de cambio neto en la fracción de ionización es

$$\frac{dX_e}{dt} = -\frac{dX_{1s}}{dt} = -W_{2s}X_{2s}, \quad (4.2.1.2)$$

donde $X_e \equiv n_e/n_T$, $X_{2s} \equiv n_{2s}/n_T$, y n_T es la densidad numérica total de átomos neutros más electrones, dada por

$$n_T \equiv n_e + n_H \equiv 0,75 \times 10^{-10} \eta_{10} n_\gamma \equiv 3,1 \times 10^{-8} \eta_{10} (T/T_{\gamma 0})^3 \text{ cm}^{-3}. \quad (4.2.1.3)$$

Una vez que se ha formado una fracción sustancial ($\sim 50\%$) de hidrógeno neutro, (4.2.1.2) es una buena aproximación para usar hasta casi el final de la recombinación.

Para expresar X_{2s} en términos de X_e , utilizamos la condición de cuasi-equilibrio para el depósito intermedio $2s$; esto se justifica por la alta velocidad de las reacciones, que se muestra en la figura 4.3. Para el depósito $2s$, esta condición toma la siguiente forma:

$$\langle \sigma v \rangle_{ep \rightarrow \gamma 2s} n_e n_p - \langle \sigma \rangle_{\gamma 2s \rightarrow ep} n_\gamma^{eq} n_{2s} - W_{2s \rightarrow 1s} n_{2s} = 0, \quad (4.2.1.4)$$

donde n_γ^{eq} es la densidad numérica de fotones térmicos. La relación entre las secciones transversales para las reacciones directas e inversas, $ep \rightleftharpoons \gamma 2s$, se puede encontrar porque que en un estado de equilibrio estas reacciones se compensan entre sí. Entonces tenemos

$$\frac{\langle \sigma \rangle_{\gamma 2s \rightarrow ep} n_\gamma^{eq}}{\langle \sigma v \rangle_{ep \rightarrow \gamma 2s}} = \frac{n_e^{eq} n_p^{eq}}{n_{2s}^{eq}} = \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{B_H}{4T}\right), \quad (4.2.1.5)$$

donde la fórmula Saha se ha utilizado para obtener la última igualdad (la energía de unión del estado $2s$ es $B_H/4$). Con la ayuda de esta relación, podemos expresar X_{2s} , por medio de la ec. (4.2.1.4), como

$$X_{2s} = \left[\frac{W_{2s}}{\langle \sigma v \rangle_{ep \rightarrow 2s}} + \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{B_H}{4T}\right) \right]^{-1} n_T X_e^2, \quad (4.2.1.6)$$

y la ec. (4.2.1.2) se vuelve

$$\frac{dX_e}{dt} = -W_{2s} \left[\frac{W_{2s}}{\langle \sigma v \rangle_{ep \rightarrow 2s}} + \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{B_H}{4T}\right) \right]^{-1} n_T X_e^2. \quad (4.2.1.7)$$

Cuando el primer término dentro de los corchetes es pequeño en comparación con el segundo, los electrones y los átomos de hidrógeno excitados están en equilibrio entre sí y con la radiación térmica. Por lo tanto, la razón de las densidades numéricas e , p y $2s$ satisface una relación de tipo Saha. Sin embargo, la fracción de ionización no obedece la ecuación de Saha porque, como se mencionó anteriormente, el estado fundamental no está en equilibrio con los otros niveles después del comienzo de la recombinación. Los estados excitados son más abundantes de lo que se espera en equilibrio completo y la fracción de ionización supera significativamente la dada por Saha.

La sección transversal para la recombinación al nivel $2s$ está bien aproximada por la fórmula

$$\langle\sigma v\rangle_{ep\rightarrow 2s} \simeq 6,3 \times 10^{-14} \left(\frac{B_H}{4T}\right)^{1/2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (4.2.1.8)$$

Por lo tanto, solo a $T > 2450K$ es eficiente la reacción $\gamma 2s \rightleftharpoons ep$ para mantener el equilibrio químico entre los estados de electrones, protones e hidrógeno $2s$. Después de que la temperatura cae por debajo de $T \simeq 2450K$, la radiación térmica ya no juega un papel esencial, y la concentración de cuasi equilibrio de los estados $2s$ se determina igualando las tasas de recombinación al nivel $2s$ y la desintegración de dos fotones (ver (4.2.1.4), donde se puede descuidar el segundo término). En $T < 2450K$, el segundo término entre corchetes en (4.2.1.7) puede descuidarse y se simplifica a

$$\frac{dX_e}{dt} \simeq -\langle\sigma v\rangle_{ep\rightarrow 2s} n_T X_e^2. \quad (4.2.1.9)$$

Por lo tanto, en este régimen, la tasa de recombinación está completamente determinada por la tasa de recombinación al nivel $2s$ y no depende de W_{2s} . En este momento, la densidad numérica de los fotones $L\alpha$ se agota casi por completo debido a las desintegraciones de dos fotones y los estados $2p$ también pierden el equilibrio con electrones, protones y radiación térmica. En consecuencia, casi todos los eventos de recombinación al estado $2p$ o cualquier otro estado excitado logran producir un átomo de hidrógeno neutro. Este efecto se vuelve relevante solo en etapas tardías y se puede incorporar en (4.2.1.7) y (4.2.1.9) reemplazando $\langle\sigma v\rangle_{ep\rightarrow 2s}$ con la sección transversal para la recombinación a todos los estados excitados. Este último está bien aproximado por la fórmula de ajuste

$$\langle\sigma v\rangle_{rec} \simeq 8,7 \times 10^{-14} \left(\frac{B_H}{4T}\right)^{0,8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (4.2.1.10)$$

Es conveniente reescribir la ec. (4.2.1.7) en términos del parámetro del corrimiento al rojo *redshift* $z = T/T_{\gamma 0} - 1$ en lugar del tiempo como variable independiente. Manipulando algebraicamente un poco, vemos que

$$\frac{dX_e}{dz} \approx 0,1 \frac{\eta_{10}}{\sqrt{\Omega_m h_{75}^2}} \left[0,72 \left(\frac{z}{14400} \right)^{0,3} + 10^4 z \exp \left(-\frac{14400}{z} \right) \right]^{-1} X_e^2 \quad (4.2.1.11)$$

Haciendo el cambio de variable $y = z/14400$ para facilitar la integración de la dependencia más complicada que tiene con z (donde la integración corre de $z = 1700$ a $z = 100$), esta ecuación se integra fácilmente:

$$X_e(z) \approx 6,9 \times 10^{-4} \frac{\sqrt{\Omega_m h_{75}^2}}{\eta_{10}} \left[\int_{\frac{z}{14400}}^{\infty} \frac{dy}{0,72y^{0,3} + 1,44 \times 10^8 y \exp(-1/y)} \right]^{-1}. \quad (4.2.1.12)$$

Los resultados de dicha integración se muestran en la figura 4.4. La condición inicial la tomamos de la ecuación de Saha en el equilibrio con $X(z = 1550) = 0,9827053787878146$.

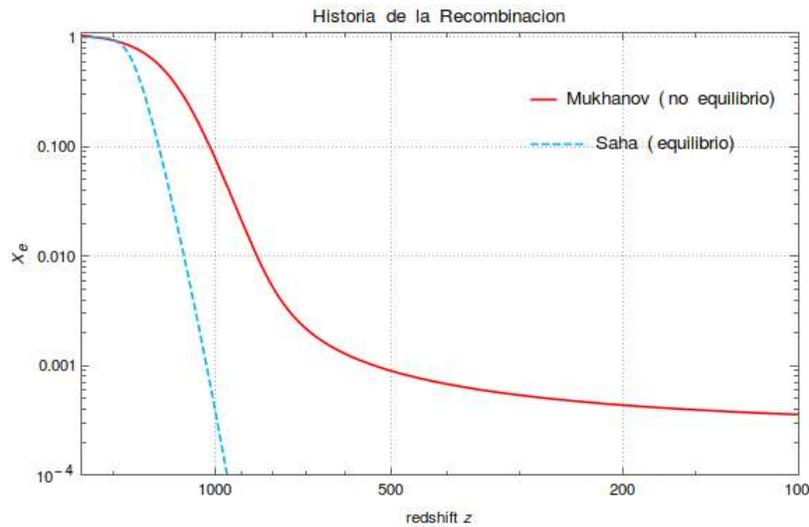


Figura 4.4: La Recombinación de Mukhanov. La línea punteada en azul muestra los resultados del proceso con la ecuación de Saha, que rápidamente cae a cero y hace evidente la importancia de estudiar el proceso fuera del equilibrio.

La concentración de hidrógeno neutral ha alcanzado aproximadamente el 50% (para valores cosmológicos realistas $\Omega_m h_{75}^2 = 0,27648$, $\eta_{10} = 5,4703$ y $T_{\gamma 0} = 2,728$)³ aproximadamente en $z \approx 1220 \rightarrow T \approx 3400$. Durante este tiempo, sin embargo, la temperatura

³Mukhanov [Mukhanov 2005] usa la aproximación a los valores $\Omega_m h_{75}^2 \approx 0,5$ y $\eta_{10} \approx 5$, además de $T_{\gamma 0} \approx 2,73$.

desciende solo de $3400K$ a $2450K$, pero la fracción de ionización disminuye muy sustancialmente, a $X_e(T = 2450K) = X_e(z = 900) = 0,0205551 \sim 2 \times 10^{-2}$. Comparando este resultado con la predicción en el equilibrio de Saha, tenemos que $X_e^{(eq)}(T = 2450K) = X_e^{(eq)}(z = 900) = 0,0000147518 \sim 1 \times 10^{-5}$.

Por lo tanto, en $z \simeq 900$, la fracción de ionización real es ¡mil veces mayor que la de equilibrio!. También es digno de mención que la fracción de ionización de equilibrio está completamente determinada por la densidad bariónica y la temperatura, pero fuera del equilibrio $X_e(z)$, dada por la ec. (4.2.1.12), también depende de la densidad total de la materia no relativista. La materia no relativista determina la tasa de expansión cosmológica [Mukhanov 2005], que es un factor importante en la descripción cinética de la recombinación fuera del equilibrio.

Freeze-out a la Mukhanov.

La fracción de ionización continúa disminuyendo al principio y luego se congela; a dicha fracción residual se le conoce como el *freeze-out* de los electrones. Por ejemplo, la ec. (4.2.1.12) predice $X_e(z = 800) = 0,00539064 \sim 5 \times 10^{-3}$, $X_e(400) = 0,000679673 \sim 7 \times 10^{-4}$ y $X_e(100) = 0,00035845 \sim 4 \times 10^{-4}$.

El *freeze-out* de la concentración de electrones ocurre aproximadamente cuando la velocidad de la reacción $e + p \rightarrow H + \gamma$ se vuelve comparable a la velocidad de expansión cosmológica H .

El valor de X_e a $T_{rec}^{(eq)} = 3737,52K \rightarrow z_{rec}^{(eq)} \simeq 1370,66$ es

$$X_e(T = 3737,52K) = 0,798702 . \quad (4.2.1.13)$$

Un valor cercano a $X_e = 0,5$ ocurre en $z = 1224 \rightarrow T \simeq 3342K$, con el valor de la fracción de electrones libres

$$X_e(z = 1224) = 0,500659 , \quad (4.2.1.14)$$

con lo que $z_{rec} \simeq 1224 \rightarrow T_{rec} \simeq 3342K$.

Se encuentra numéricamente que el Universo es 90% ($X_e = 0,1$) neutral en $z \simeq 1021 \rightarrow T \simeq 2788K$.

Para calcular la concentración de electrones en el *freeze-out*, notamos que la integral de la ec. (4.2.1.12) converge a 0.27 cuando z tiende a cero [Mukhanov 2005]; por lo tanto,

$$X_e^{freeze-out} \simeq 2,5 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{\Omega_m h_{75}^2}}{\eta_{10}} = 2,5 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{0,3}}{5} = 2,7386 \times 10^{-4} . \quad (4.2.1.15)$$

Dato curioso: el código numérico alcanza dicho valor en $z = 0$, ¿por qué pasa esto?. La respuesta es que el método de Mukhanov es una *aproximación de aproximaciones*; sin

embargo, esto no quita valor al análisis de la recombinación, pues el valor calculado de la concentración en el *freeze-out* y los valores para $X_e = 0,9$, $X_e = 0,5$, $X_e = 0,1$ y $X_e = 0,001$ concuerda muy bien con los análisis que veremos más adelante tanto en la concentración como en los intervalos de T y z .

En la siguiente figura hay un comparativo gráfico que refuerza la necesidad de salir del equilibrio: a $z = 100$ en el proceso de Saha, prácticamente no hay electrones libres, la fracción residual va del orden de $\sim 10^{-110}$, una cantidad absurda y ridículamente pequeña. De ser esta la realidad de nuestro universo, no habrían quedado electrones libres para procesos posteriores.

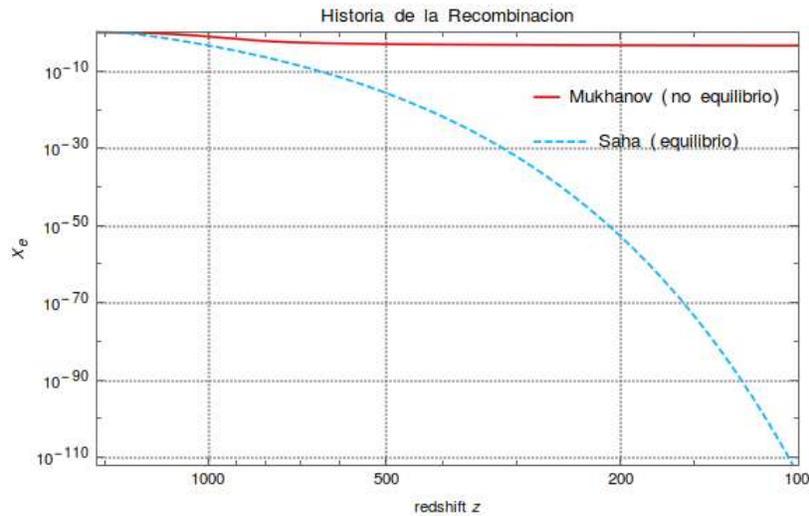


Figura 4.5: Comparativo gráfico entre el equilibrio y fuera de este en el proceso de Mukhanov. La parte de Saha decae exponencialmente a cero al momento del *freeze-out* en $z = 100$.

4.2.2. Recombinación a la Peebles: Aproximación de Tres Niveles.

Un clásico de la Recombinación es el modelo desarrollado por Peebles⁴ descrito en su paper de 1968 [Peebles 1968] y más tarde mejorado por otras contribuciones.

Aquí, modelamos el historial de la Recombinación utilizando la aproximación de 3 niveles: el estado base $n = 1$ con fracción x_1 , el estado $n = 2$ con fracción x_2 y el estado de ionización con $x_p = x_e$. Asumimos que el nivel de energía $n \geq 2$ es llenado acorde a la razón de equilibrio:

$$\frac{x_{n\ell}}{x_2} = \frac{g_{n\ell}}{g_2} e^{-(E_{n\ell} - E_2)/T} . \quad (4.2.2.1)$$

⁴Para referencias de esta sección, consultar [Jeong 2019b], [Weinberg 2008], [Peebles 1993] y [Peebles 1968].

Debido a que la desintegración neta en el estado $1s$ es muy lenta, podemos escribir la tasa de cambio del nivel $n = 2$ de la competencia entre la recombinación de caso-B y la fotoionización:

$$\frac{1}{a^3} \frac{d(n_2 a^3)}{dt} = [\alpha_B n_e n_p - \beta n_2] , \quad (4.2.2.2)$$

donde podemos calcular β con

$$\beta = \frac{\alpha_B n_e^{(0)} n_p^{(0)}}{n_2^{(0)}} = \alpha_B \frac{g_e g_p}{g_2} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/4T} = \frac{\alpha_B}{4} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/4T} , \quad (4.2.2.3)$$

donde usamos $g_2 = 8[\text{electrón: } 2(1s^2) + 6(2p^6)] \times 2(\text{spín del protón}) = 16$, entonces la ecuación (4.2.2.2) se vuelve

$$\left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{n>2} = \alpha_B \left[n_{H,tot} x_e^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/4T} x_2 \right] . \quad (4.2.2.4)$$

Además de la recombinación y la fotoionización a $n = 2$, tenemos que incluir el decaimiento de dos fotones y las líneas de Lyman-alpha desplazadas al rojo que dan la transición neta del estado $n = 2$ al $n = 1$.

El decaimiento de dos fotones es una transición dipolar prohibida ($2s \rightarrow 1s$) con la velocidad de transición

$$\Lambda_{2\gamma} = 8,2206 s^{-1} . \quad (4.2.2.5)$$

Ninguno de los dos fotones tiene suficiente energía para excitar el hidrógeno del estado base; por lo tanto, este proceso dará la producción neta del átomo de hidrógeno del estado base. La tasa de cambio de la fracción x_2 debido a la desintegración de dos fotones es, por lo tanto

$$\left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{2\gamma} = -\Lambda_{2\gamma} \left[\frac{x_2}{4} - \beta_{2\gamma} x_1 \right] , \quad (4.2.2.6)$$

donde $\beta_{2\gamma}$ es la corrección de equilibrio detallado que asegura que la tasa total no cambie en el estado de equilibrio. Esto es, de la ecuación de Saha para

$$H(n = 1) + \gamma(3/4I) \rightleftharpoons H(n = 2) ,$$

encontramos

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-3I/4T} = 4e^{-3I/4T} , \quad (4.2.2.7)$$

entonces

$$\beta_{2\gamma} = e^{-3I/4T}, \quad (4.2.2.8)$$

y

$$\left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{2\gamma} = -\Lambda_{2\gamma} \left[\frac{x_2}{4} - x_1 e^{-3I/4T} \right]. \quad (4.2.2.9)$$

Finalmente, consideremos el *redshift* de la línea Lyman-alpha. La tasa de decaimiento para la transición Lyman-alpha ($2p \rightarrow 1s$) es $A_{Ly\alpha} \simeq 6,25 \times 10^8 s^{-1}$. Primero hay que calcular la profundidad óptica de la línea Lyman-alpha.

Debido a que el ancho de la línea es estrecho, estimamos la sección transversal como

$$\sigma(\nu) = \sigma_0 \delta(\nu - \nu_{Ly\alpha}), \quad (4.2.2.10)$$

donde $\sigma_0 = 3\pi^2 A_{Ly\alpha} \lambda_{Ly\alpha}^{-2}$ es la constante de integración [Jeong 2019b].

Entonces, la profundidad óptica de los fotones de $Ly\alpha$ es

$$\tau = \int n_1 \sigma dt = n_{H,tot} x_1 \int \frac{\sigma(\nu)}{|\dot{\nu}|} d\nu, \quad (4.2.2.11)$$

y usando el redshift cosmológico $\dot{\nu} = -H\nu$ para calcular la profundidad óptica como

$$\tau = \frac{n_{H,tot} x_1}{H\nu_{Ly\alpha}} \sigma_0 = \frac{3\pi^2 A_{Ly\alpha} n_{H,tot} x_1}{H\nu_{Ly\alpha}^3}. \quad (4.2.2.12)$$

Esto es llamado la *profundidad óptica de Sobolev* que juega un papel clave en la formación de líneas en medios en expansión.

Durante la recombinación, la profundidad óptica es típicamente del orden $\sim 10^8$, y los fotones Lyman-alpha se reabsorben inmediatamente. La probabilidad de escape [Jeong 2019b] de los fotones Lyman-alpha es entonces

$$P = \frac{1 - e^{-\tau}}{\tau} \simeq \frac{1}{\tau} \simeq 10^{-8}, \quad (4.2.2.13)$$

lo que hace que la tasa final sea $A_{Ly\alpha} P \simeq 1$. entonces, el cambio en x_2 debido a la emisión Lyman-alpha es

$$\left. \frac{dx_2}{dt} \right|_{Ly\alpha} = -\frac{3}{4} \frac{A_{Ly\alpha}}{\tau} \left[x_2 - 4x_1 e^{-3I/4T} \right] = -\frac{H\nu_{Ly\alpha}^3}{4\pi^2 n_{H,tot} x_1} \left[x_2 - 4x_1 e^{-3I/4T} \right]. \quad (4.2.2.14)$$

Combinando las tres contribuciones (4.2.2.4), (4.2.2.9) y (4.2.2.14), encontramos

$$\frac{dx_2}{dt} = \alpha_B n_{H,tot} x_e^2 - \beta x_2 - (\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha) \left(\frac{x_2}{4} - x_1 e^{-3I/4T} \right). \quad (4.2.2.15)$$

Aquí, definimos

$$\Lambda_\alpha \equiv \frac{H\nu_{Ly\alpha}^3}{\pi^2 n_{H,tot} x_1}. \quad (4.2.2.16)$$

Suponemos que los átomos de Hidrógeno excitados están en equilibrio (tiene sentido ya que son de corta duración), luego hacemos $\dot{x}_2 = 0$ para encontrar

$$x_2 = 4 \frac{\alpha_B n_{H,tot} x_e^2 + (\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha) x_1 e^{-3I/4T}}{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha + 4\beta}. \quad (4.2.2.17)$$

Metiendo esto en la tasa neta de fracción de ionización de electrones (la desintegración de dos fotones y la reabsorción de Lyman-alpha no involucra electrones), y usando que $x_2 \ll 1$:

$$\begin{aligned} \frac{dX_e}{dt} &= -\alpha_B n_{H,tot} X_e^2 + \beta x_2 \\ &= -\alpha_B n_{H,tot} X_e^2 + 4\beta \left[\frac{\alpha_B n_{H,tot} X_e^2 + (\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha) x_1 e^{-3I/4T}}{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha + 4\beta} \right] \\ &= - \left(\frac{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha}{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha + 4\beta} \right) (\alpha_B n_{H,tot} X_e^2 - 4\beta x_1 e^{-3I/4T}). \end{aligned} \quad (4.2.2.18)$$

Ya conocemos x_1 , así, finalmente:

$$\boxed{\frac{dX_e}{dt} = - \left(\frac{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha}{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha + 4\beta} \right) \alpha_B \left[n_{H,tot} X_e^2 - \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/T} (1 - X_e) \right]} \quad (4.2.2.19)$$

Esta ecuación es llamada **la ecuación de Peebles**. Los términos entre corchetes satisfacen el equilibrio detallado debido a la ecuación de Saha (4.1.0.6). Si hubiéramos ignorado el retraso de la recombinación debido a la ineficiencia de la desintegración de dos fotones y canales de Lyman-alpha desplazados al rojo, podríamos haber terminado con la ecuación sin el prefactor entre paréntesis redondos, simplemente a partir del balance detallado y la aproximación de caso-B.

El prefactor puede interpretarse como la razón de ramificación entre la desintegración de dos fotones y el escape de Lyman-alpha y el total de la desintegración de dos fotones, el escape de Lyman-alpha y la fotoionización desde $n = 2$.

Reemplazando el tiempo con la temperatura como la variable independiente en la ecuación (4.2.2.19), usando [Weinberg 2008]

$$\frac{dt}{dT} = -\frac{1}{HT}, \quad (4.2.2.20)$$

queda en función de la temperatura⁵ como:

$$\boxed{\frac{dX_e}{dT} = \left(\frac{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha}{\Lambda_{2\gamma} + \Lambda_\alpha + 4\beta} \right) \frac{\alpha_B n_{H,tot}}{HT} \left[X_e^2 - \frac{1}{n_{H,tot}} \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/T} (1 - X_e) \right]} \quad (4.2.2.21)$$

con los valores de los parámetros (en unidades naturales):

$$n_{H,tot} = 1,964 \times 10^{-7} \left(\frac{\Omega_b h^2}{0,023} \right) \left(\frac{T}{2,726K} \right)^3 \text{ cm}^{-3} = 9,69536 \times 10^{-9} T^3 \text{ cm}^{-3}, \quad (4.2.2.22)$$

$$\alpha_B = \frac{4,309 \times 10^{-13} T_4^{-0,6166}}{1 + 0,6703 T_4^{0,5300}} \text{ cm}^3 / \text{s}, \quad (4.2.2.23)$$

$$\Lambda_{2\gamma} = 8,2206 \text{ s}^{-1}, \quad (4.2.2.24)$$

$$\Lambda_\alpha = \frac{H \nu_{Ly\alpha}^3}{\pi^2 n_{H,tot} (1 - X_e)}, \quad (4.2.2.25)$$

$$H = 7,204 \times 10^{-19} T^{3/2} \sqrt{\Omega_M h^2 + 1,523 \times 10^{-5} T} \text{ s}^{-1}, \quad (4.2.2.26)$$

$$\left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} = 2,4147 \times 10^{15} T^{3/2} \text{ cm}^{-3}, \quad (4.2.2.27)$$

$$4\beta = \alpha_B \left(\frac{m_e T}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-I/4T} = 2,4147 \times 10^{15} T^{3/2} e^{-39474/T} \alpha_B, \quad (4.2.2.28)$$

donde en todas las expresiones numéricas T es la temperatura en grados Kelvin, y la ecuación queda adimensional. Además, $I = 157894K$, $\Omega_b h^2 = 0,023$ y $\Omega_M h^2 = 0,143$ [Jeong 2019b]. Como se usó $\hbar = 1$ por ser unidades naturales, es necesario multiplicar $\nu_{Ly\alpha}$ por $(2\pi)^3$:

$$\Lambda_\alpha = \frac{8\pi H \nu_{Ly\alpha}^3}{\pi^2 n_{H,tot} (1 - X_e)} = \frac{8\pi H}{n_{H,tot} \lambda_{Ly\alpha}^3 (1 - X_e)}, \quad (4.2.2.29)$$

⁵Un factor importante para la manipulación de la variable independiente es para eliminar las complicadas dependencias del tiempo que tienen los parámetros cosmológicos que se usan en las ecuaciones de Boltzmann a resolver.

donde $\lambda_{Ly\alpha} = 1216\text{\AA}$. En otras palabras, para $\nu_{Ly\alpha}$ implica $\omega_{Ly\alpha} = 2\pi\nu_{Ly\alpha}$.

Se muestran los resultados de la integración numérica de la ecuación (4.2.2.21) en unidades de *redshift* z (a través de la relación $T = T_0(1 + z)$, con $T_0 = 2,726K$) en la figura 4.6.

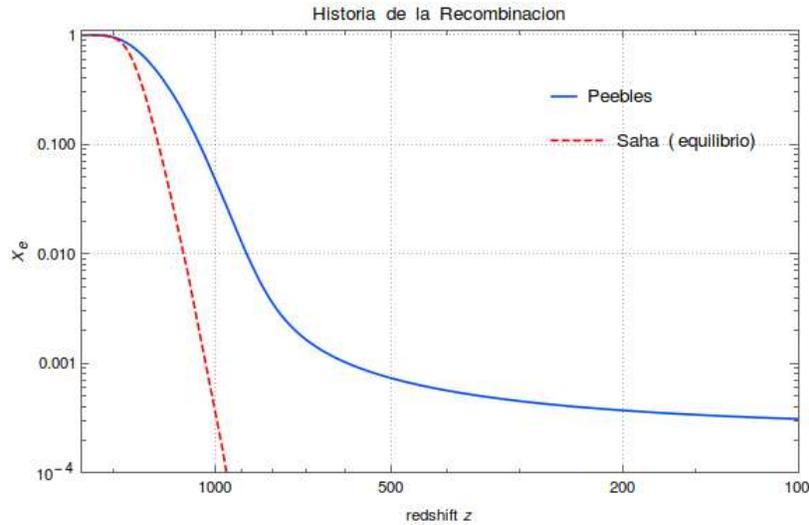


Figura 4.6: Historia de la Recombinación: la línea punteada es la ecuación de Saha, ec. (4.1.0.12); la línea continua es el resultado de la integración numérica de la ecuación de Peebles, ec. (4.2.2.21), puesta en unidades de redshift z .

Aquí se considera que la condición inicial es que $X_e[T]$ está dada por la solución de la ecuación de Saha para el equilibrio térmico considerando una temperatura alta, que consideramos que es $T \simeq 4665K$, lo suficientemente alta como para que el equilibrio térmico sea una buena aproximación (porque el valor de equilibrio de X_e es muy cercano a uno, mientras que el valor verdadero debe estar entre uno y el valor de equilibrio).

Como se puede ver en la figura anterior, la recombinación ocurre más lentamente fuera del equilibrio. La solución fuera del equilibrio siguen a la solución de equilibrio bastante bien antes del congelamiento o *freeze-out*, entonces el freeze-out produce la desviación. Pero, en el caso de la recombinación cósmica, la solución fuera del equilibrio se divide de la solución en el equilibrio muy al principio del proceso y la fracción de ionización disminuye gradualmente hacia el valor residual. Por supuesto, la razón es porque el proceso de recombinación se retrasa debido a la lentitud de los procesos relevantes, es decir, decaimiento de dos fotones y fotones de Lyman-alpha desplazados al rojo (con una tasa de un par que ocurre en un segundo), en comparación con los procesos radiactivos normales ($A_{2p \rightarrow 1s} \simeq 0,6$ billones en un segundo) produciría el equilibrio térmico.

Pero, ¿por qué la recombinación no se retrasa por el mismo factor? Esto se debe a que la escala de tiempo que establece que la densidad de equilibrio disminuya es la velocidad a la que disminuye la densidad numérica de fotones ionizantes (con $E_\gamma > 13,6eV$) debido

al desplazamiento al rojo cosmológico, esto es, la expansión del Universo que los *enfria* y que es mucho más lento que la escala de tiempo de desintegración radiativa.

La definición clásica de recombinación es cuando $X_e = 0,5$; el cálculo del equilibrio, $X_e^{(eq)} = 0,5$ en $T_{rec}^{(eq)} = 3737,52K \rightarrow z_{rec}^{(eq)} = 1370,06$ y al resolver (4.2.2.21) la fracción de ionización a dicha temperatura es

$$X_e(T = 3737,52K) = 0,737862 . \quad (4.2.2.30)$$

Un valor cercano a $X_e = 0,5$ resulta de la integración numérica en $T = 3479K \rightarrow z \simeq 1275,23$

$$X_e(T = 3479K) = 0,500924 , \quad (4.2.2.31)$$

con lo que $T_{rec} \simeq 3478K \rightarrow z_{rec} \simeq 1275$.

Encontramos que 90 % de Universo es neutro (es decir, $X_e = 0,1$) en $T \simeq 2905K \rightarrow z \simeq 1065$.

Freeze-out a la Peebles: 3 niveles.

Ahora, calculemos el desplazamiento al rojo de la congelación o *freeze-out* y la fracción residual del número de electrones a partir del método habitual, que nos dice que el *freeze-out* de los electrones ocurre aproximadamente cuando la tasa de interacción de la reacción de recombinación se vuelve igual a la tasa de expansión de Hubble. La tasa de interacción para la recombinación de caso-B es

$$\Gamma_{ep} = n_e \alpha_B = n_{H,tot} X_e \alpha_B . \quad (4.2.2.32)$$

Como el desacoplamiento ocurre cuando $X_e \ll 1$, es decir, en la era *post-recombinación*, aproximamos esto (en el equilibrio) como [Jeong 2019b], [Kolb & Turner 1989]

$$X_e^{EQ}(T_4) \simeq \exp \left[17,96 - \frac{7,891}{T_4} + \frac{3}{4} \ln \frac{15,782}{T_4} \right] , \quad (4.2.2.33)$$

y

$$n_{H,tot} \simeq 9695,36 T_4^3 \text{ cm}^{-3} , \quad (4.2.2.34)$$

para estimar la temperatura a la cual la tasa de recombinación es igual a la tasa de Hubble como

$$\Gamma_{ep} = \frac{3,1133 T_4^{1,6334}}{1,49187 + T_4^{0,53}} e^{-7,891/T_4} = H = 2,8131 \times 10^{-13} \sqrt{(0,9368 + T_4) T_4^3} , \quad (4.2.2.35)$$

para encontrar al resolver numéricamente que

$$T_{freeze-out}^{EQ} = 2713,8342K \approx 2714K, \quad (4.2.2.36)$$

y a esta temperatura, la fracción de ionización en la ecuación (4.2.2.33) tiene el valor de

$$X_{e,EQ}^{freeze-out} = 3,12904 \times 10^{-4}, \quad (4.2.2.37)$$

que es la fracción residual de electrones libres.

Pero, directamente de la integración numérica, la fracción de ionización a $T = 275,326K \rightarrow z = 100$ es

$$X_e^{freeze-out} = 3,10868 \times 10^{-4}. \quad (4.2.2.38)$$

¡Un valor no muy diferente al de la estimación con el método habitual!

La fracción residual de electrones libres juega un papel muy importante en la química primordial, ya que es el principal catalizador del ion H^- que se necesita para formar un hidrógeno molecular, que es un refrigerante importante para formar la primera generación de estrellas y galaxias [Jeong 2019b].

4.2.3. Recombinación a la Peebles: Aproximación Multinivel.

El proceso de recombinación no fue instantáneo, porque los electrones, capturados en diferentes niveles de energía atómica, no podían caer en cascada instantáneamente al estado fundamental. Los electrones se vieron impedidos debido a las rápidas reionizaciones fuera de los estados excitados debido a la enorme cantidad de fotones de baja energía, y debido a la alta profundidad óptica de las líneas de Lyman y las transiciones continuas al estado fundamental. Cualquier línea de Lyman o transición continua al estado fundamental emitió un fotón con energía donde había pocos fotones de cuerpo negro, que inmediatamente fotoexcitaron o fotoionizaron un átomo vecino en el estado fundamental. Los átomos alcanzaron el estado fundamental a través del desplazamiento al rojo cosmológico de los fotones de la línea Lyman-alpha, o mediante el decaimiento de dos fotones $2s - 1s$. Debido a que estas tasas de $n = 2$ al estado base fueron mucho más lentas que la tasa de recombinación neta a $n = 2$ se produjo un "cuello de botella" que ralentizó todo el proceso de recombinación.

El universo se expandió y enfrió más rápido de lo que se pudo completar la recombinación, y quedó una pequeña fracción de electrones y protones libres. Esta fracción, durante y después de la recombinación, afecta a las anisotropías de la Radiación Cósmica de Fondo a través de la forma precisa del grosor de la última superficie de dispersión de fotones (es decir, la función de visibilidad).

En la sección anterior se describió la metodología estándar [Peebles 1968] que considera un átomo efectivo de 3 niveles con un estado fundamental o base, primer estado

excitado ($n = 2$) y continuo, con los estados $n > 2$ representados por un coeficiente o tasa de recombinación α_B . Para muchas transiciones (por ejemplo, $70 - 10$, $50 - 4$, etc.), la desexcitación espontánea domina, causando una cascada descendente más rápida al estado $n = 2$. En otras palabras, una vez que se captura un electrón para, por ejemplo, $n = 70$, puede caer en cascada hasta el estado $n = 2$ más rápido que en el caso de equilibrio, porque hay pocos fotones alrededor para fotoexcitarlo. Además, la velocidad de cascada descendente más rápida es más rápida que la velocidad de fotoionización desde el estado superior, y uno podría ver esto como una desintegración radiativa que roba parte del “flujo” de depoblación de la fotoionización. Tanto la cascada descendente más rápida como la tasa de fotoionización más baja contribuyen a la tasa de recombinación neta más rápida.

Se desarrolla un desequilibrio a medida que la radiación de fondo continúa enfriándose mientras toda la serie de Lyman permanece ópticamente espesa (el cuello de botella empeora). Una distribución de Boltzmann en relación con $n = 2$ ya no es sostenible: los estados excitados se sobrepoblan progresivamente. El campo de radiación es frío, pero fuerte y capaz de mantener bien acoplados a los estados vecinos, así como a mantener los estados de Rydberg más altos en equilibrio entre sí. Sin embargo, en comparación con el cálculo estándar de equilibrio de captura en cascada para α_B , esta situación inusual nos lleva a una mayor tasas de recombinación efectiva a la mayoría de los estados excitados, sin aumentar la fotoionización proporcionalmente.

Esto da como resultado una mayor tasa neta de producción de átomos de hidrógeno neutros.

Debido a que el efecto neto de las consideraciones anteriores es una recombinación más rápida (una fracción de ionización de *freeze-out* más baja), nuestros resultados de la integración numérica de la ec. (4.2.2.21) pueden reproducirse acelerando artificialmente la recombinación en el cálculo estándar, simplemente multiplicando la tasa de recombinación α_B y la de ionización β por un *fudge factor* de 1.14 [Seager & Saselov 1999].

Las generalidades de dicho factor se pueden consultar a fondo en [Wong et. al. 2008] y [Kholupenko et. al 2011].

Los resultados de esto se muestran en la figura 4.7, donde efectivamente se observa un aumento en la velocidad de la recombinación que con el cálculo estándar sin *fudge factor*⁶.

Para este proceso, el valor de X_e a $T_{rec}^{(eq)} = 3737,52K \rightarrow z_{rec}^{(eq)} = 1370,06$ es

$$X_e(T = 3737,52K) = 0,737842 . \quad (4.2.3.1)$$

De igual manera que en la aproximación de tres niveles, un valor cercano a $X_e = 0,5$ vuelve a ser en $T = 3479K \rightarrow z = 1275,23$, con el valor de la fracción de electrones libres

$$X_e(T = 3479K) = 0,50087 , \quad (4.2.3.2)$$

⁶El *fudge factor* es una cifra incluida en un cálculo para dar cuenta de errores o circunstancias imprevistas, o para asegurar un resultado deseado.

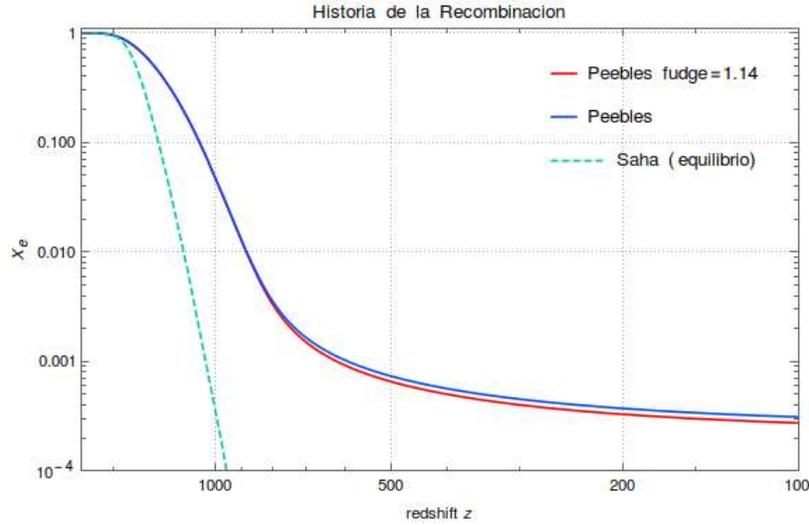


Figura 4.7: Historia de la Recombinación: en el equilibrio, aproximación de 3 niveles y aproximación multinivel.

con lo que $T_{rec} \simeq 3479K \rightarrow z_{rec} \simeq 1275,23$.

Se encuentra que el Universo es 90 % neutral ($X_e = 0,1$) en $T = 2906K \rightarrow z = 1065,03$.

Freeze-out a la Peebles: multinivel.

De igual manera que en la aproximación de 3 niveles, calculemos el *freeze-out* primero de la manera habitual y luego aproximando el valor directamente de la integración numérica. La manera habitual ocurre cuando la tasa de la recombinación es igual a la de expansión, esto es

$$\Gamma_{ep} = H. \quad (4.2.3.3)$$

En la aproximación multinivel, multiplicamos los factores α_B y β por el *fudge factor* cuyo valor es 1.14, entonces la ecuación anterior queda como

$$\Gamma_{ep} = 1,14 n_{H,tot} X_e^{EQ} \alpha_B. \quad (4.2.3.4)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{ep} &= H \\ \Rightarrow \frac{1,14 * 3,1133 T_4^{1,6334}}{1,49187 + T_4^{0,53}} e^{-7,891/T_4} &= 2,8131 \times 10^{-13} \sqrt{(0,9368 + T_4) T_4^3} \\ \Rightarrow \frac{3,549162 T_4^{1,6334}}{1,49187 + T_4^{0,53}} e^{-7,891/T_4} &= 2,8131 \times 10^{-13} \sqrt{(0,9368 + T_4) T_4^3}, \end{aligned} \quad (4.2.3.5)$$

que resolviendo numéricamente, encontramos que

$$T_{freeze-out}^{EQ} = 2701,62K, \quad (4.2.3.6)$$

y a esta temperatura, la fracción de ionización en la ecuación (4.2.2.33) tiene el valor de

$$X_{e,EQ}^{freeze-out} = 2,75286 \times 10^{-4}. \quad (4.2.3.7)$$

Directamente de la integración numérica, a $T = 275,326K \rightarrow z = 100$, la fracción de ionización es

$$X_e^{freeze-out} = 2,74562 \times 10^{-4}, \quad (4.2.3.8)$$

valor muy cercano al obtenido por el método habitual.

En otras palabras, después del *freeze-out* de la recombinación, queda un electrón libre por cada aproximadamente ~ 2750 átomos de hidrógeno. Esto parece una cantidad pequeña, sin embargo, esta pequeña cantidad de electrones residuales es necesaria para formar moléculas de hidrógeno a través de la reacción $H + e^- \rightarrow H^- + \gamma$ seguida de $H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$, donde H_2 denota hidrógeno molecular o diatómico [Komatsu 2011].

Se espera que las moléculas de hidrógeno formadas de esta manera jueguen un papel importante en el enfriamiento del gas y en la formación de la primera generación de estrellas.

4.2.4. Recombinación a la Weinberg.

Weinberg⁷ hace un análisis de la recombinación en el equilibrio y fuera de este, con un esquema muy parecido al de Saha y al de Peebles vistos anteriormente.

Los fotones dejaron de intercambiar energía de manera efectiva con electrones cuando la temperatura del universo en expansión cayó a aproximadamente $10^5 K$. Después de eso, los fotones continuaron siendo dispersados por los electrones libres, pero sin una ganancia o pérdida apreciable de energía. Esto terminó cuando los electrones libres se unieron en átomos de hidrógeno y helio, terminando la dispersión de fotones. Esto se llama la recombinación. Consideremos cuándo sucedió esto.

Weinberg en el Equilibrio.

Comencemos nuestro cálculo a tiempos cósmicos muy tempranos como para que los protones, electrones, y los átomos de hidrógeno y helio esten en equilibrio térmico a la temperatura de la radiación. En un gas en equilibrio a temperatura T , la densidad numérica

⁷Para esta sección, ver [Weinberg 2008].

de cualquier tipo de partícula no relativista y no degenerada de tipo i está dada por la fórmula de Maxwell-Boltzmann:

$$n_i = g_i (2\pi\hbar)^{-3} e^{\mu_i/k_B T} \int d^3 q \exp \left[- \left(m_i + \frac{q^2}{2m_i} \right) / k_B T \right], \quad (4.2.4.1)$$

donde m_i es la masa de la partícula, g_i es el número de sus estados de spín, y μ_i es una característica del gas conocida como el potencial químico de las partículas de tipo i . La propiedad de los potenciales químicos que hacen de (4.2.4.1) una fórmula útil es que se conservan en cualquier reacción que ocurra rápidamente en el gas. En nuestro caso, las partículas son protones, electrones y átomos de hidrógeno en cualquier estado unido, para lo cual tomamos i como p , e , $1s$, $2s$, $2p$, etc.

Aproximadamente el 24 % de la masa del universo primitivo estaba en forma de núcleos de helio, pero los átomos de helio están más unidos que los átomos de hidrógeno, de modo que en el momento que nos concierne ahora, digamos para $T < 4400K$, casi todo el helio estaba encerrado en la forma de átomos neutros, y por lo tanto no jugó ningún papel aquí [Weinberg 2008]. El electrón y el protón tienen un spín de $1/2$, entonces $g_p = g_e = 2$, mientras que el estado fundamental del átomo de hidrógeno tiene dos estados hiperfinos con spines 0 y 1, entonces $g_{1s} = 1 + 3 = 4$. Al principio la recombinación y las reacciones de ionización $p + e \rightleftharpoons H_{1s}$ ocurrieron rápidamente por cascadas de transiciones radiativas a través de estados excitados, por lo que los potenciales químicos satisfacen

$$\mu_p + \mu_e = \mu_{1s}. \quad (4.2.4.2)$$

Recordemos que el potencial químico de los fotones es cero, pues estos pueden ser creados y destruidos en reacciones como $e + p \rightleftharpoons e + p + \gamma$. Las integrales son

$$(2\pi\hbar)^{-3} \int d^3 p \exp \left(- \frac{p^2}{2mk_B T} \right) = \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2},$$

entonces la ley de conservación ec. (4.2.4.2) da

$$\frac{n_{1s}}{n_p n_e} = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{-3/2} \exp(B_1/k_B T), \quad (4.2.4.3)$$

donde $B_1 \equiv m_p + m_e - m_H = 13,6eV$ es la energía de enlace del primer estado fundamental del hidrógeno $1s$. Además, la neutralidad de la carga de la materia cósmica requiere que

$$n_e = n_p. \quad (4.2.4.4)$$

En el equilibrio, la densidad numérica de los átomos de hidrógeno en cualquier estado excitado es menor que la densidad numérica en los estados fundamentales por un factor de orden $\exp(-\Delta E/k_B T)$, donde ΔE es la energía de excitación, que es necesariamente no

menos que la diferencia $10,6eV$ en las energías de unión de los estados $n = 1$ y $n = 2$ del hidrógeno. (Los estados excitados tenían el mismo potencial químico que el estado fundamental, ya que en equilibrio el átomo podía pasar rápidamente de uno a otro emitiendo o absorbiendo fotones). Para temperaturas inferiores a $4200K$, este factor exponencial es menor que 6×10^{-13} , para que, a una buena aproximación, podamos descuidar la presencia de átomos de hidrógeno excitados mientras persista el equilibrio térmico.

La materia en el momento de la recombinación era aproximadamente 76 % en peso de hidrógeno neutral o ionizado, por lo que podemos tomar

$$n_p + n_{1s} = 0,76n_B, \quad (4.2.4.5)$$

donde n_B es la densidad numérica de bariones (es decir, a la temperatura de interés, neutrones y protones). La fracción de ionización del hidrógeno $X \equiv n_p/(n_p + n_{1s})$ satisface la ecuación de Saha (escrita *a la Weinberg*)

$$X(1 + SX) = 1, \quad (4.2.4.6)$$

donde

$$S \equiv \frac{(n_p + n_{1s})n_{1s}}{n_p^2} = 0,76n_B \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{-3/2} \exp(B_1/k_B T). \quad (4.2.4.7)$$

Se podría pensar que la fracción de ionización en equilibrio disminuye cuando la temperatura cae por debajo del valor $B_1/k_B = 157894K$ pero incluso en el equilibrio la recombinación se retrasa considerablemente debido al pequeño valor del coeficiente de la exponencial en la ec. (4.2.4.7).

Con $n_B = n_{B0}(T/T_{\gamma 0})^3$ y $n_{B0} = 1,123 \times 10^{-5} \Omega_b h^2 \text{ nucleones/cm}^3$ tenemos (en unidades naturales)

$$S = 1,747 \times 10^{-22} e^{157894/T} T^{3/2} \Omega_b h^2, \quad (4.2.4.8)$$

donde h es la constante de Hubble en unidades de $100 \text{ kms}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$ y T es la temperatura en grados Kelvin. Esta función de la temperatura varía extremadamente rápido donde esta es del orden de la unidad, entonces la ecuación de Saha a una temperatura de recombinación bastante buena. Como se vió en las secciones anteriores, el valor de la ionización en el equilibrio cae de más del 97 % para $T = 4200K$ a menos de 1 % para $T = 3000K$.

Weinberg fuera del equilibrio.

Lo anterior da el orden correcto de magnitud de la temperatura de la fuerte disminución de la fracción de ionización, pero no es correcta en detalle, porque el equilibrio no se mantuvo realmente para niveles bajos de ionización. El fotón que se emite cuando un electrón libre es capturado por un protón en el estado fundamental tiene energía más que suficiente

para ionizar otro átomo de hidrógeno, por lo que este proceso no produce una disminución neta en la ionización. Del mismo modo, el fotón emitido cuando un electrón en una órbita alta del átomo de hidrógeno con número cuántico principal $n \geq 3$ cae en el estado fundamental tiene energía más que suficiente para elevar un electrón en el estado fundamental de algún otro átomo de hidrógeno al estado excitado $n = 2$, por lo que este proceso tampoco produce un aumento neto en el número de electrones en el estado fundamental. El estado fundamental del hidrógeno se alcanza típicamente mediante la formación de estados excitados H^* en la reacción $e + p \rightarrow H^* + \gamma$, seguido de una cascada de desintegraciones radiativas hasta el estado excitado $n = 2$. La transición final del estado excitado $2p$ al estado fundamental $1s$ mediante la emisión de un solo fotón *Lyman* - α se ve obstaculizada por el mismo efecto que impide la transición de electrones libres o electrones en estados excitados superiores al estado fundamental: el fotón *Lyman* - α no se fusiona simplemente con el fondo de radiación térmica; tiene una gran sección transversal resonante para excitar otro átomo de hidrógeno desde el estado fundamental hasta el primer estado excitado, del cual se reioniza con mayor frecuencia (como lo demuestran los pequeños números de equilibrio de átomos de hidrógeno en estados excitados). Pero en cosmología este proceso no es del todo ineficaz, porque el fotón *Lyman* - α emitido por un átomo tendrá apenas la energía suficiente para excitar a otro átomo de hidrógeno en su estado fundamental al estado $2p$, por lo que si no interactúa muy pronto con otro átomo entonces el redshift cosmológico llevará su energía fuera de la línea de resonancia, después de lo cual ya no tiene suficiente energía para excitar un átomo de hidrógeno en su estado fundamental. Aun así, la formación del estado fundamental por la desintegración radiativa del estado $2p$ es tan ineficiente que también tenemos considerar vías más lentas hacia el estado fundamental, como la formación del estado excitado $2s$, que solo puede descomponerse en el estado fundamental emitiendo dos fotones, ninguno de los cuales tiene suficiente energía para volver a excitar un átomo de hidrógeno en su estado fundamental. Cuando la ionización se hizo pequeña, la velocidad de estas reacciones ya no pudo competir con la velocidad de expansión cósmica, y la ionización ya no cayó tan rápido como lo haría en equilibrio térmico.

Este es un asunto complicado, pero no es difícil ver los contornos principales del proceso de la recombinación. Hacemos las siguientes aproximaciones:

1.- Las colisiones entre los átomos de hidrógeno y las transiciones radiativas entre los estados de estos átomos son lo suficientemente rápidas como para que todos los estados de los átomos estén en equilibrio entre sí a la temperatura T de la radiación, excepto el estado fundamental $1s$, que como ya se mencionó se alcanza solo a través de procesos lentos o ineficientes. Esto tiene la consecuencia de que la densidad numérica de los estados $n\ell$ de hidrógeno que tienen el número cuántico principal n (con $n > 1$) y el momento angular orbital ℓ se pueden expresar en términos de la densidad numérica de cualquier estado, digamos el estado $2s$:

$$n_{n\ell} = (2\ell + 1)n_{2s} \exp((B_2 - B_n)/k_B T) , \quad (4.2.4.9)$$

donde B_n es la energía de enlace del estado con número cuántico principal n .

2.- La tasa neta de cambio en la población de átomos de hidrógeno en su estado $1s$ viene dada por la tasa de desintegración radiativa de los estados $2s$ y $2p$, menos la tasa de excitación de estos estados del estado $1s$. De acuerdo con la discusión anterior, se supone que todos los demás procesos que conducen al estado fundamental se cancelan por la reionización o la excitación de otros átomos por el fotón emitido. Debido a que la recombinación ocurre en colisiones de electrones y protones, disminuye el número $n_e a^3$ de electrones libres en un volumen co-móvil a^3 a una velocidad $\alpha(T)n_p n_e a^3$ que es proporcional tanto a $n_p = n_e$ como a $n_e a^3$, con el coeficiente $\alpha(T)$ que depende solo de la temperatura, no de n_e o de a (aquí no incluimos la recombinación directamente al estado fundamental, ya que es cancelada por la ionización de otros átomos por el fotón emitido, por lo que $\alpha(T)$ es lo que en astrofísica se llama el “coeficiente de recombinación del caso-B”). Además, dejando de lado la ionización del estado fundamental que simplemente cancela la recombinación al estado fundamental, la ionización de los estados excitados del hidrógeno aumenta $n_e a^3$ a una tasa dada por una suma de términos proporcionales a $n_{n\ell} a^3$ con $n > 1$, con coeficientes dependientes solo en temperatura. La ec. (4.2.4.9) da el término $n_{n\ell}$ con $n > 1$ como proporcional a n_{2s} , con coeficientes que también dependen solo de la temperatura, por lo que la ionización aumenta el número de electrones en un volumen co-móvil a^3 a una velocidad que puede escribirse como $\beta(T)n_{2s} a^3$, con $\beta(T)$ en función sólo de la temperatura, no de a o de $n_{n\ell}$. Poniendo estas tasas juntas, tenemos

$$\frac{d}{dt} (n_e a^3) = -\alpha n_e^2 a^3 + \beta n_{2s} a^3 .$$

Dividiendo entre la constante $n a^3$ (donde $n \equiv n_p + n_H = n_p + \sum_{n\ell} n_{n\ell} = 0,76n_B$), esto da

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{n_e}{n} \right) = -\frac{\alpha n_e^2}{n} + \frac{\beta n_{2s}}{n} . \quad (4.2.4.10)$$

Además, esto desaparece bajo las condiciones del equilibrio, donde (dado que las transiciones $e + p \rightleftharpoons 2s$ ocurren rápidamente) en lugar de la ec. (4.2.4.3) tendríamos

$$\frac{n_{2s}}{n_e^2} = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{-3/2} \exp(B_2/k_B T) ,$$

entonces los coeficientes de la ec. (4.2.4.10) están relacionados por

$$\beta/\alpha = \left(\frac{n_e^2}{n_{2s}} \right)_{\text{equilibrio}} = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-B_2/k_B T) . \quad (4.2.4.11)$$

Para la ec. (4.2.4.10), necesitamos relacionar n_{2s} con la densidad numérica total n de protones y átomos de hidrógeno.

3.-El número total de átomos de hidrógeno excitados en un volumen co-móvil $1/n$ cambia mucho más lentamente que los procesos radiativos individuales y que el aumento neto

en este número debido a la recombinación y reionización del hidrógeno que se equilibra con la disminución neta en este número por las transiciones hacia y desde el estado $1s$. Es decir,

$$\alpha n_e^2 - \beta n_{2s} = (\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p})n_{2s} - \varepsilon n_{1s}, \quad (4.2.4.12)$$

donde Γ_{2s} y Γ_{2p} son las tasas para los procesos de desintegración radiativa $2s \rightarrow 1s + \gamma + \gamma$ y $2p \rightarrow 1s + \gamma$, respectivamente. Ignoramos el proceso $2p \rightarrow 1s + \gamma + \gamma$ que es mucho más lento que $2s \rightarrow 1s + \gamma + \gamma$. P es la probabilidad de que el fotón *Lyman* - α emitido en el decaimiento $2p \rightarrow 1s + \gamma$ escape al infinito sin excitar algún otro átomo de hidrógeno en el estado $1s$ al estado $2p$; y ε es la velocidad a la que los átomos de hidrógeno en el estado $1s$ se excitan al estado $2s$ o $2p$, sin incluir aquellos que se excitan al estado $2p$ por los fotones *Lyman* - α de las desintegraciones $2p \rightarrow 1s + \gamma$, que tenemos en cuenta con el factor P . De lo anterior, se obtiene la fórmula necesaria para n_{2s} :

$$n_{2s} = \frac{\alpha n_e^2 + \varepsilon n_{1s}}{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p} + \beta}. \quad (4.2.4.13)$$

Las temperaturas de interés son $T \ll (B_2 - B_3)/k_B = 21900K$, de acuerdo con la ec. (4.2.4.9) todos los $n_{n\ell}$ con $n > 2$ son mucho menores que n_{2s} , y por lo tanto, una muy buena aproximación en el número total de átomos de hidrógeno es

$$n_H = n_{1s} + n_{2s} + n_{2p} = n_{1s} + 4n_{2s}, \quad (4.2.4.14)$$

así, podemos eliminar n_{1s} en favor de n_H en la ec. (4.2.4.13)

$$n_{2s} = \frac{\alpha n_e^2 + \varepsilon n_H}{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p} + \beta + 4\varepsilon}. \quad (4.2.4.15)$$

Además, en el equilibrio, el número de átomos de hidrógeno en el estado $1s$ sería constante, por lo que los coeficientes en el lado derecho de la ecuación (4.2.4.12) (que da la tasa neta de aumento de la densidad numérica de átomos de hidrógeno en el estado fundamental) debe tener la relación

$$\frac{\varepsilon}{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p}} = \left(\frac{n_{2s}}{n_{1s}} \right)_{\text{equilibrio}} = \exp(-(B_1 - B_2)/k_B T). \quad (4.2.4.16)$$

Usando las dos últimas ecuaciones en la ec. (4.2.4.10) tendremos la ecuación en una forma más usual

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{n_e}{n} \right) = \frac{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p}}{(\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p}) [1 + 4 \exp(-(B_1 - B_2)/k_B T)] + \beta} \times \left(- [1 + 4 \exp(-(B_1 - B_2)/k_B T)] \frac{\alpha n_e^2}{n} + \exp(-(B_1 - B_2)/k_B T) \frac{\beta n_H}{n} \right).$$

A las temperaturas de interés, el factor $1 + 4 \exp(-(B_1 - B_2)/k_B T)$ puede reemplazarse por la unidad. Usando la ecuación (4.2.4.11) y la definición de la fracción de ionización $X \equiv n_e/n = n_p/n = 1 - n_H$, tenemos finalmente

$$\frac{dX}{dt} = \left(\frac{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p}}{\Gamma_{2s} + 3P\Gamma_{2p} + \beta} \right) \alpha n (-X^2 + S^{-1}(1 - X)), \quad (4.2.4.17)$$

donde $S(T)$ es la función (4.2.4.7) que aparece en la ecuación de Saha. Si la temperatura fuera constante, esto se satisfaría con cualquier solución de la ecuación de Saha. De hecho, X siempre es mayor que el valor dado por la ecuación de Saha, entonces la ecuación (4.2.4.17) da una fracción de ionización monótonicamente decreciente. El primer factor en la ecuación (4.2.4.17) representa la supresión de la recombinación que ocurre cuando las transiciones de los estados $2s$ y $2p$ al estado fundamental son más lentas que la reionización del átomo.

A las temperaturas de interés, la probabilidad de supervivencia del fotón P viene dada por [Weinberg 2008]

$$P = \frac{8\pi H}{3\lambda_\alpha^3 \Gamma_{2p} n_{1s}}, \quad (4.2.4.18)$$

donde la tasa de la transición *Lyman* - α es $\Gamma_{2p} = 4,699 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ y $\lambda_\alpha = 1215,682 \times 10^{-8} \text{ cm}$ es la longitud de onda de los fotones *Lyman* - α . De aquí se obtiene la cantidad $3P\Gamma_{2p}$ de la ecuación (4.2.4.17)

$$3P\Gamma_{2p} = \frac{8\pi H^3}{\alpha} n_{1s}. \quad (4.2.4.19)$$

Con este resultado para P , la ecuación (4.2.4.17) es la misma que la ecuación encontrada de manera diferente por Peebles⁸ En esta ecuación podemos usar la aproximación de que a las temperaturas de interés, que son mucho menores que $(B_1 - B_2)/k_B = 118420 \text{ K}$, aunque n_{1s}/n_{2s} es menor de lo que sería en equilibrio térmico es aún mucho más grande que la unidad, por lo que podemos reemplazar n_{1s} con $n_H = (1 - X)n$. También reemplazamos el tiempo con la temperatura como la variable independiente, usando

$$\frac{dt}{dT} = -\frac{1}{HT}. \quad (4.2.4.20)$$

⁸Ver el artículo clásico de Peebles [Peebles 1968].

Así, la ecuación (4.2.4.17) queda como

$$\boxed{\frac{dX}{dT} = \frac{\alpha n}{HT} \left(1 + \frac{\beta}{\Gamma_{2s} + 8\pi H/\lambda_\alpha^3 n(1-X)} \right)^{-1} \left[X^2 - (1-X)/S \right]} \quad (4.2.4.21)$$

Expresemos las cantidades en unidades naturales. Al calcular la tasa de expansión, debemos incluir tanto la densidad de energía de la materia no relativista como la de los neutrinos y fotones, pero a temperaturas donde los neutrinos son importantes su masa es insignificante, y para temperaturas $T > 30K$ podemos descuidar la energía de vacío, entonces

$$\begin{aligned} H &= H_0 \left[\Omega_M \left(\frac{T}{T_{\gamma 0}} \right)^3 + \Omega_R \left(\frac{T}{T_{\gamma 0}} \right)^4 \right]^{1/2} \\ &= 7,204 \times 10^{-19} T^{3/2} \sqrt{\Omega_M h^2 + 1,523 \times 10^{-5} T} \text{ s}^{-1}, \end{aligned} \quad (4.2.4.22)$$

donde nuevamente en todas las expresiones numéricas T es la temperatura en grados Kelvin. La densidad numérica del hidrógeno ionizado y no ionizado es

$$n = 0,76 \times \frac{3H_0^3 \Omega_B}{8\pi G m_p} \left(\frac{T}{T_{\gamma 0}} \right)^3 = 4,128 \times 10^{-7} \Omega_B h^2 T^3 \text{ cm}^{-3}, \quad (4.2.4.23)$$

donde m_p es la masa de Planck. La tasa de decaimiento de dos fotones del estado $2s$ es⁹

$$\Gamma_{2p} = 8,22458 \text{ s}^{-1}. \quad (4.2.4.24)$$

El coeficiente de la densidad del número de protones en la tasa de recombinación electrónica utilizada por Peebles es

$$\alpha = 2,84 \times 10^{-11} T^{-1/2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (4.2.4.25)$$

Realmente, α representa una cadena de reacciones más complicadas que solo la captura radiativa de un electrón, incluida la cascada de desintegraciones radiativas hasta los estados $2s$ y $2p$, por lo que tiene una dependencia de la temperatura más complicada. Se puede ajustar una variedad de cálculos numéricos detallados de la tasa efectiva de recombinación a los estados $2s$ y $2p$ con la tasa de recombinación del *case - B*

$$\alpha_B = \frac{1,4377 \times 10^{-10} T^{-0,6166} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}}{1 + 5,085 \times 10^{-3} T^{0,5300}}, \quad (4.2.4.26)$$

que ya incluye el *fudge factor* de 1.14 sugerido en [Seager & Saselov 1999], así como lo mencionamos antes en la aproximación multinivel de Peebles para no dejar de lado la

⁹Peebles en su artículo original [Peebles 1968] usa un valor de $8,227 \text{ s}^{-1}$.

aproximación multinivel.

El valor de β esta dado en términos de α por la ec. (4.2.4.11):

$$\beta = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-B_2/k_B T) \alpha_B = 2,417 \times 10^{15} \text{cm}^{-3} T^{3/2} e^{-39474/T} \alpha_B. \quad (4.2.4.27)$$

Finalmente, la función $S[T]$ está dada por la ec. (4.2.4.8) y consideramos los valores de¹⁰ $\Omega_B h^2 = 0,02238$ y $\Omega_M h^2 = 0,13229$, además de $T_{\gamma 0} = 2,728K$. La condición inicial es tomada tal que $X[T]$ esté dada por la solución de la ecuación de Saha en el equilibrio a una temperatura alta. Consideramos $z = 1700 \rightarrow T = 4640,328K$ para los cuales la fracción de ionización es $X[4640,328K] = 0,999254$.

Los valores de $X[T]$ son calculados por la integración numérica de la ecuación diferencial (4.2.4.21) y su gráfica mostrada en la figura 4.8.

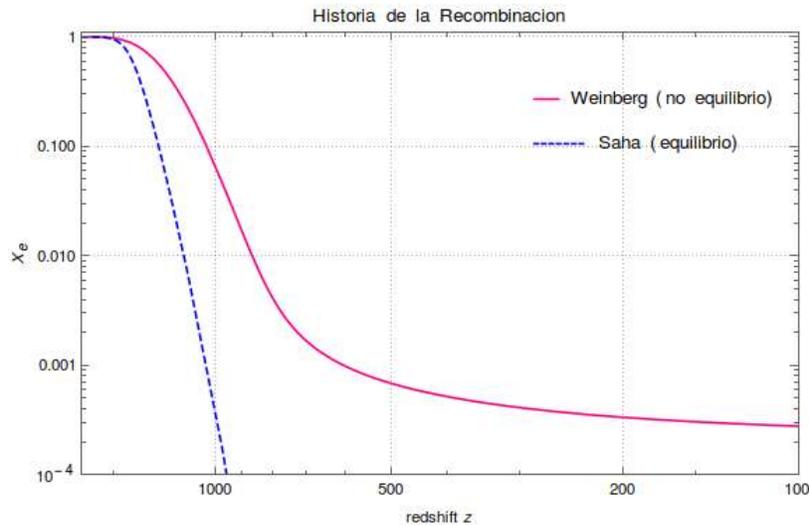


Figura 4.8: La Recombinación de Weinberg comparada con la descripción Saha, en el rango de 1700-100 z .

En realidad, el proceso descrito por Weinberg [Weinberg 2008] es el mismo de la descripción de Peebles en su paper [Peebles 1968], salvo un mejoramiento al afinar algunas constantes y la manera de obtención. A simple vista, una comparación entre la figura 4.7 y la 4.8 hacen notorio el parecido entre ambas, pues la de Weinberg ya incluye el *fudge factor* sugerido para la aproximación multinivel en [Seager & Saselov 1999].

La ecuación de Saha deja de dar una buena aproximación a la fracción de ionización tan pronto como la ionización en el equilibrio cae apreciablemente por debajo de la uni-

¹⁰Usados por Weinberg en [Weinberg 2008] para comparar el cálculo analítico de las anisotropías del CMB con un cálculo numérico.

dad. En particular, aunque en equilibrio la fracción de ionización habría caído a valores extremadamente pequeños para temperaturas inferiores a $2000K$, la ionización calculada a partir de la ecuación (4.2.4.21) se estabilizó a bajas temperaturas a un valor asintótico pequeño pero distinto de cero, debido a la creciente rareza de los encuentros de los pocos protones y electrones libres restantes. Esta ionización residual jugó un papel importante en la formación de las primeras estrellas y es conocida como el *freeze-out* o *congelamiento* de los electrones.

Para esta descripción, el valor de X a $T_{rec}^{(eq)} = 3737,52K \rightarrow z_{rec}^{(eq)} = 1370,6$ es

$$X(T = 3737,52K) = 0,845924 . \quad (4.2.4.28)$$

Un valor cercano a $X = 0,5$ ocurre en $T = 3355,44K \rightarrow z \simeq 1229$, con el valor de la fracción de electrones libres

$$X(T = 3355,44K) = 0,50107 , \quad (4.2.4.29)$$

así que $T_{rec} \simeq 3355,44K \rightarrow z_{rec} \simeq 1229$.

Se encuentra que el universo es 90 % neutral ($X = 0,1$) en $T \simeq 2804,4K \rightarrow z \simeq 1027$.

Freeze-out a la Weinberg.

Se procede de igual manera que con las aproximaciones de Peebles, esto es, con el modo habitual cuando $\Gamma_{ep} = H \rightarrow nX_e^{EQ}\alpha_\beta = H$. Entonces, hay que resolver lo anterior con los valores para los parámetros a usar definidos en esta sección. Tendremos entonces:

$$\frac{1,33368 \times 10^{-4} T^{1,6334}}{196,657 + T^{0,53}} e^{78948/T} = 7,204 \times 10^{-19} T^{3/2} \sqrt{\Omega_M h^2 + 1,523 \times 10^{-5} T} . \quad (4.2.4.30)$$

De la resolución numérica, resulta una temperatura de

$$T_{freeze-out}^{EQ} = 2702,62K , \quad (4.2.4.31)$$

valor en el cual la fracción de ionización en la ec. (4.2.2.33) es de

$$X_{e,EQ}^{freeze-out} = 2,74406 \times 10^{-4} . \quad (4.2.4.32)$$

Directamente de los resultados que arroja el código de la integración numérica, se observa que a $T = 275,528K \rightarrow z = 100$ la fracción de ionización es

$$X^{freeze-out} = 2,78056 \times 10^{-4} , \quad (4.2.4.33)$$

que es un valor muy cercano a la estimación a habitual.

Freeze-out a la Mukhanov: revisión.

Siguiendo la tendencia de que el *freeze-out* ocurre alrededor de $z = 100$, el valor numérico que arroja el código que resuelve el proceso de Mukhanov en ese redshift es:

$$X_e^{f,z=100} = 3,584501071564742 \times 10^{-4}. \quad (4.2.4.34)$$

De igual manera, resulta un valor razonable y dentro del rango de los otros del congelamiento obtenidos por otros métodos.

Después de que la fracción de ionización cae por debajo de la unidad, los resultados aproximados dados en la ec. (4.2.1.12) están en excelente acuerdo con las soluciones numéricas de las ecuaciones cinéticas, mientras que la aproximación Saha falla por completo.

4.2.5. Recombinación a la HyRec Code.

En la actualidad, existen algunos códigos numéricos para calcular la recombinación con un poco más de detalles y de finura.

Los códigos calculan procesos físicos detallados que incluyen otras desintegraciones de dos fotones, recombinación a niveles más altos (incluidas unas 500 capas), otras líneas de Lyman, etc. Algunos de ellos son *RecFast*, *CosmoRec* y *HyRec*.

Un código de fácil uso y recomendado por [Jeong 2019b] es el código de uso público *HyRec* [*HyRec Code 2012*], [Ali-Haïmoud & Hirata 2011]: *Un código para la recombinación primordial de hidrógeno y helio que incluye la transferencia radiativa, programado por Yacine Ali-Haïmoud y Chris Hirata.*

Afina el proceso mediante algunos *data files* como una tabla de coeficientes efectivos de recombinación para el hidrógeno, una tabla de velocidad de transferencia efectiva $2p \rightarrow 2s$ para hidrógeno, una tabla de tasas de desintegración de dos fotones y un *input file* que da los parámetros que pide por defecto (en orden de solicitud):

Parámetro	Valor por defecto
T_0 [Valor actual de la temperatura del CMB]	2.728 K
$\Omega_b h^2$ [densidad de bariones]	0.021976
$\Omega_m h^2$ [densidad total de materia, CDM + bariones]	0.13
$\Omega_k h^2$ [densidad de curvatura]	0
$\Omega_\Lambda h^2$ [densidad de energía oscura]	0.343
w_0, w_a [parámetros de la ecuación de estado de la energía oscura]	-1 , 0
Y [fracción primordial en masa de helio]	0.24
$N_{\nu,eff}$ [número efectivo de especies de neutrinos]	3.04

Otra de las intenciones de este tipo de códigos es la de simular la recombinación y sus resultados en Universos distintos al nuestro; esto se logra jugando con los parámetros que pide el programa cuando no se usa el *input file* incluido.

Una vez que haya ingresado todos los parámetros¹¹ requeridos, el código calculará el historial de recombinación e imprimirá tres columnas en la pantalla: desplazamiento al rojo z de 8000 – 0, espaciado por $\Delta z = 1$, fracción de electrones libres X_e , y relación de materia a temperatura de radiación T_m/T_r .

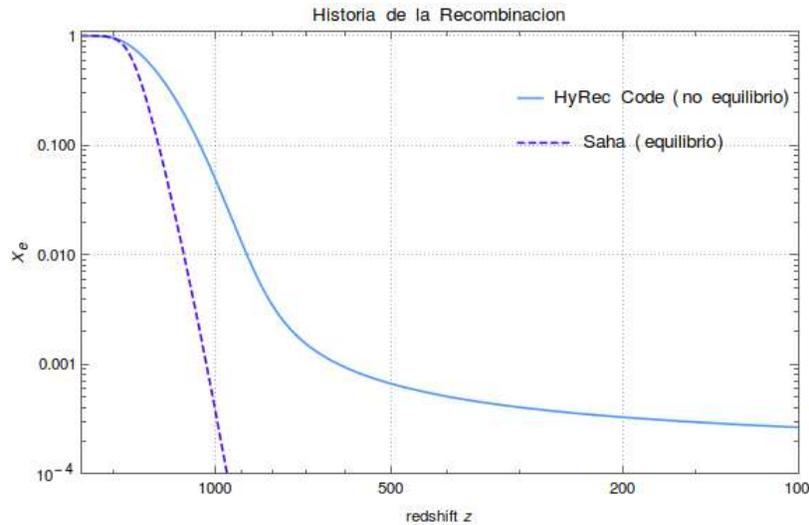


Figura 4.9: Historia de la Recombinación hecha por el código *HyRec* comparada con el proceso de Saha.

Los resultados que brinda el código se muestran en la figura 4.9. Como se puede observar, la gráfica es similar a todas las mostradas anteriormente; el éxito del código consiste en afinar valores numéricos involucrando un poco más de física aprovechando el poder computacional (los autores estiman el error en poco menos de $\sim 10^{-4}$ y la ejecución del código en aproximadamente 2 segundos en una computadora normal). El código incluye la siguiente física [HyRec Code 2012], [Ali-Haimoud & Hirata 2011]:

- Cálculo del átomo multinivel efectivo exacto.
- Una solución simultánea de transferencia radiativa, que representa:
 - *Feedback's* entre líneas de Lyman
 - Transiciones de dos fotones (emisión, absorción, dispersión Raman) de $2s$ y niveles superiores
 - Difusión de frecuencia en *Lyman - α*
- Este código no incluyen transiciones de colisión.

¹¹La ecuación de estado de la energía oscura usada en el *HyRec Code* es $w(a) = w_0 + w_a(1 - a)$.

Usando el valor por defecto de $T_0 = 2,728K$ y el valor del equilibrio de $z_{rec}^{(eq)} = 1370 \rightarrow T_{rec}^{(eq)} = 3740,088K$, el valor de X_e es

$$X_e(z = 1370) = 0,738339083437065 . \quad (4.2.5.1)$$

Un valor cercano a $X_e = 0,5$ ocurre en $z = 1275 \rightarrow T = 3481K$, con el valor de la fracción de electrones libres

$$X_e(z = 1275) = 0,500095757821760 , \quad (4.2.5.2)$$

con lo que $z_{rec} \simeq 1275 \rightarrow T_{rec} \simeq 3481K$.

El código arroja el valor para el cuál el Universo es 90 % neutral ($X_e \simeq 0,1$) en $z \simeq 1063 \rightarrow T = 2902,592K$.

Freeze-out a la HyRec Code.

Fijando el valor de z al cual ocurre el *freeze-out* en $z = 100 \rightarrow T \simeq 276K$ (siguiendo la tendencia/convención, además de que es el valor recomendado en [Jeong 2019b], que usa y recomienda el uso de este código como una alternativa para obtener más precisión en los valores y comparar con su desarrollo de la recombinación de Peebles),

$$X_e^{freeze-out} = 2,658694587 \times 10^{-4} . \quad (4.2.5.3)$$

¡Perfecto! El valor anterior sigue dentro de la cota de tendencia del *freeze-out* que resulta de los otros procesos analizados. Además, por la afinación de los procesos físicos que están detrás de la recombinación, la precisión numérica que otorga *HyRec Code* y la similitud del valor de X_e^f con los otros procesos analizados, podemos fijar sin problemas que

$$\boxed{X_e^f \sim 2,7 \times 10^{-4}} \quad (4.2.5.4)$$

es la fracción residual en el congelamiento de los electrones para el proceso fuera del equilibrio.

4.3. Comparando los resultados ...

Se ha hecho el análisis de la recombinación fuera del equilibrio desde 5 puntos de vista: *Peebles* (tres niveles y multinivel), *Weinberg*, *Mukhanov* y por el código numérico *HyRec*.

En todos la esencia del proceso es la misma y se grafican con los resultados de Saha en el equilibrio para una comparación gráfica y entender así la necesidad de salir del equilibrio, pues en cuanto la fracción de ionización X_e cae significativamente por debajo de la unidad, esto es, $X_e \ll 1$, la aproximación de Saha falla totalmente.

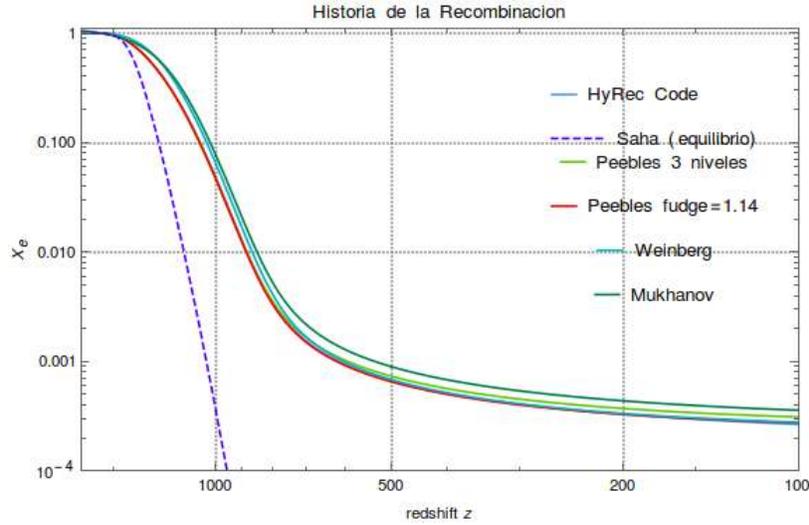


Figura 4.10: Comparativo gráfico de los procesos de recombinación fuera del equilibrio estudiados versus el proceso de Saha.

	Equilibrio	Peebles 3 Niveles	Peebles Multinivel	Weinberg	Mukhanov	HyRec Code
$\Omega_b h^2$	0,023	0,023	0,023	0,02238	-	0,021976
$\Omega_M h^2$	-	0,143	0,143	0,13229	0,3	0,13
$T_{\gamma,0}(K)$	2,726	2,726	2,726	2,728	2,728	2,728
$X_e \approx 0,9$	$T = 4012,26K$ $z = 1470,85$	$T = 3965K$ $z = 1453$	$T = 3965K$ $z = 1453$	$T = 3860K$ $z = 1414$	$T = 3956K$ $z = 1449$	$T = 3961K$ $z = 1451$
$X_e \approx 0,5$	$T = 3737,52K$ $z = 1370,06$	$T = 3478K$ $z = 1275$	$T = 3478K$ $z = 1275$	$T = 3355K$ $z = 1229$	$T = 3342K$ $z = 1224$	$T = 3481K$ $z = 1275$
$X_e \approx 0,1$	$T = 3418,51K$ $z = 1253,04$	$T = 2905K$ $z = 1064$	$T = 2906K$ $z = 1065$	$T = 2804K$ $z = 1027$	$T = 2788K$ $z = 1021$	$T = 2903$ $z = 1063$
$X_e \approx 0,001$	$T = 2830,13K$ $z = 1039,19$	$T = 1617K$ $z = 592$	$T = 1693K$ $z = 620$	$T = 1650K$ $z = 604$	$T = 1457K$ $z = 533$	$T = 1678$ $z = 614$

En la tabla anterior se muestran los parámetros cosmológicos usados para cada proceso de recombinación (dados por la bibliografía de cada proceso) y una comparación de sus resultados. Se nota la diferencia que hay entre los valores de cada proceso para una misma fracción de ionización, sin embargo, es diferencia no es muy grande, las soluciones están dentro de un mismo rango para cada valor de X_e , T y z ; son valores *casi* idénticos para todos los procesos dinámicos.

Ahora, comparemos los resultados del *freeze-out* en el equilibrio y en los procesos dinámicos estudiados.

	Equilibrio	Peebles 3 Niveles	Peebles Multinivel	Weinberg	Mukhanov	HyRec Code
X_e^f	$3,12904 \times 10^{-4}$	$3,10868 \times 10^{-4}$	$2,74562 \times 10^{-4}$	$2,78056 \times 10^{-4}$	$2,7386 \times 10^{-4}$ $3,58450 \times 10^{-4}$	$2,65869 \times 10^{-4}$
z	994,6	100	100	100	0 100	100

Se observa que la cota del *freeze-out* va como $\sim 2,7 \times 10^{-4}$, que es un valor cercano a la cota que da el equilibrio $\sim 3,1 \times 10^{-4}$ pero difiriendo en que en el equilibrio ocurre en un orden de magnitud mayor para z, T del que ocurre usando el enfoque fuera del equilibrio.

El recuadro correspondiente al proceso de Mukhanov tiene los valores para $z = 100$ y $z = 0$, pues como se explicó en su desarrollo, por ser una (muy buena) aproximación, al caer por debajo de $z = 900$, la fracción de ionización decae más rápido que los otros procesos y se alcanza la cota de $X_e^f \sim 2,7 \times 10^{-4}$ en $z = 0$, pero siguiendo la tendencia de $z = 100$, el valor de $X_e(z = 100)$ se extrae directamente de la integración numérica.

Ahora bien, ¿por qué los resultados obtenidos, aunque muy parecidos, son diferentes para cada proceso?

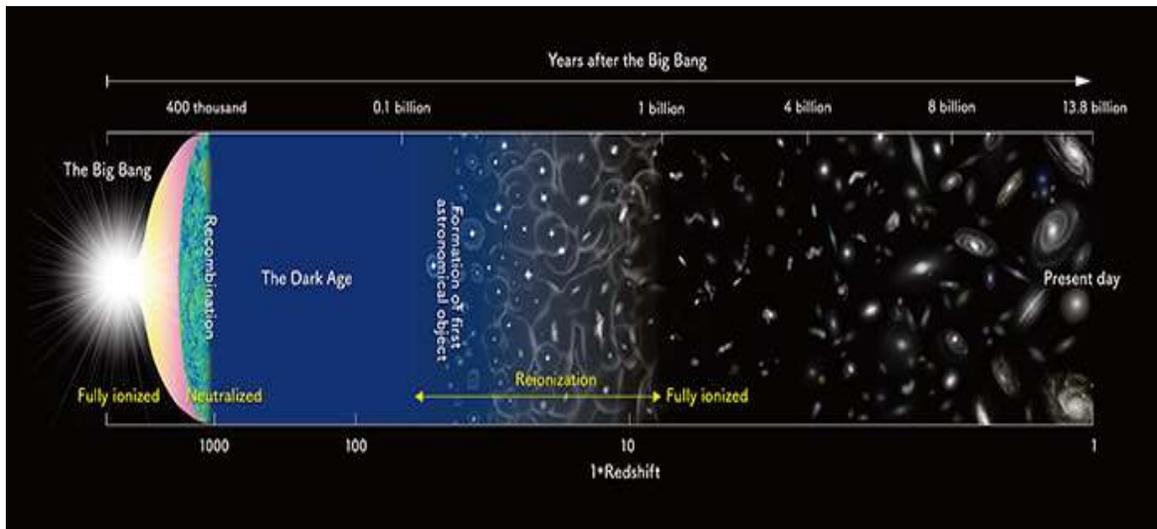


Figura 4.11: Historia del Universo: la recombinación y la formación de las primeras estrellas en escalas de tiempo y redshift [ALMA 2018].

Físicamente, los procesos describen la misma cosa: la recombinación fuera del equilibrio; matemáticamente, aunque la esencia es la misma, cada proceso deduce y/o usa de diferente manera las constantes y los parámetros cosmológicos a usar en la ecuación de Boltzmann; esto tiene que ver con las diferentes hipótesis hechas en cada desarrollo.

Por ejemplo, cada autor da sus valores de los parámetros $\Omega_B h^2$, $\Omega_M h^2$ y $T_{\gamma,0}$ y con esos se resuelven cada tipo de recombinación. Esto afectará también (aunque en menor grado, pues todos caen a $\sim 2,7 \times 10^{-4}$) los valores de la fracción residual en el *freeze-out*.

Capítulo 5

El Papel Cosmológico del *freeze-out* y La Fracción Residual de Electrones

El propósito de este capítulo es darle más sentido cosmológico a la fracción residual de electrones libres. No es el asunto principal del trabajo, pero dado que la fracción residual es una predicción del análisis fuera del equilibrio de la recombinación, hay que ver su importancia en la evolución del universo.

Debido a la expansión del Universo, no todos los electrones libres se recombinan con los protones, como ya se vió en el capítulo anterior. En cambio, se produce una congelación o *freeze-out*, ya que la recombinación se vuelve menos eficiente a densidades y temperaturas más bajas. El *freeze-out* de la abundancia de electrones libres, que ocurre en $z \simeq 100$, fue calculado en el capítulo anterior como

$$X_e^{freeze-out} \simeq 2,7 \times 10^{-4} . \quad (5.0.0.1)$$

El Helio no contribuye a la fracción de electrones libres, ya que el Helio se recombina muy pronto, a etapas anteriores a las de la Recombinación del Hidrógeno. La fracción residual de electrones conduce a la formación de moléculas e iones como H^- y H_2^+ . Su abundancia se puede calcular asumiendo el equilibrio químico, ya que sus escalas de tiempo de formación y destrucción son más cortas que el tiempo de Hubble. Esto produce las expresiones (aproximadas) [Schleicher et. al. 2008]

$$\begin{aligned} X_{H^-} &\equiv \frac{n_{H^-}}{n_H} \sim 2 \times 10^{-9} T^{0,88} X_e^f \\ X_{H_2^+} &\equiv \frac{n_{H_2^+}}{n_H} \sim 3 \times 10^{-14} T^{1,8} X_e^f , \end{aligned} \quad (5.0.0.2)$$

donde X_{H^-} es la fracción del ión H^- , $X_{H_2^+}$ la fracción del ión H_2^+ , n_i las densidades

numéricas de iones y de hidrógeno neutro, T la temperatura en grados Kelvin y X_e^f la fracción residual de electrones.

Con corrimientos al rojo $z \geq 100$, H^- es fotodisociado eficientemente por el CMB y se forma principalmente por el proceso $H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$, donde H_2^+ es un ión de hidrógeno compuesto por dos protones y un electrón (tiene más carga positiva, por eso el superíndice +), H un átomo de hidrógeno neutro (un protón y un electrón), H_2 una molécula de hidrógeno o hidrógeno molecular (dos protones y dos electrones, carga neutra) y H^+ es un protón libre.

Los iones mencionados anteriormente, más la fracción residual de electrones y las reacciones entre estos, jugarán un papel muy importante para la creación de H_2 , que es el refrigerante principal del gas primordial y pieza clave para la formación de las primeras estructuras. Así pues, el papel del *freeze-out* y la fracción residual es contribuir a la creación de hidrógeno molecular para dar paso a los procesos cosmológicos siguientes.

¿Una fracción residual del orden de $\sim 10^{-4}$ es suficiente? Hasta hace poco, la mayor incertidumbre sobre la fracción de electrones residuales se debía al escaso conocimiento de los parámetros cosmológicos Ω_b y h . El número se ajusta bien a la exquisita precisión de experimentos como WMAP, confirmando así los resultados de soluciones numéricas de la recombinación del hidrógeno, como se vió antes con el HyRec Code [Galli & Palla 2013].

¿Qué pasaría si la fracción fuera mayor o menor? Simulaciones pueden dar la respuesta; el tamaño de la fracción dependería del valor de los parámetros cosmológicos usados en la ecuación dinámica a resolver o en el código numérico que resuelva el problema.

Por último, la fracción de protones libres jugará un papel importante en la química del hidrógeno que veremos más adelante y en químicas posteriores como reactivo o producto de las reacciones.

5.1. El Papel del H_2 como Refrigerante.

La investigación del papel del hidrógeno molecular como refrigerante importante para la formación de las primeras estructuras en el universo temprano comenzó a fines de la década de 1960. Saslaw y Zipoy, citados en [Galli & Palla 2013], en 1967 fueron los primeros en señalar el importante papel de las moléculas de H_2 en la evolución térmica y dinámica de las nubes de gas pregalácticas en la era posterior a la recombinación.

Pero, ¿por qué se necesita un refrigerante?. El material en las nubes pregalácticas, hidrógeno y quizás helio, es un radiador pobre, pero se puede formar hidrógeno molecular H_2 por el mecanismo descrito anteriormente (más adelante veremos esto a detalle). La pérdida de energía debido a la radiación del hidrógeno molecular hace que la nube se contraiga hasta que se formen estrellas y se restablezca el equilibrio energético [Peebles & Dicke 1968]. Así pues, se necesita un refrigerante para hacer posible el colapso de las nubes pregalácticas en estrellas.

La formación estelar es el proceso por el cual grandes masas de gas (que se encuentran formando extensas nubes moleculares) colapsan para formar estrellas. La formación de estrellas se produce exclusivamente dentro de las nubes moleculares. Esto es una consecuencia natural de sus bajas temperaturas y altas densidades, ya que la fuerza gravitatoria que hace que la nube colapse debe superar las presiones internas que actúan hacia fuera, tratando de evitar un colapso. Una simulación numérica interesante, además de más información del proceso de formación estelar se puede consultar en [Northwestern 2021] y en [STARFORGE 2020].

El enfriamiento y el equilibrio térmico del gas primordial son ingredientes clave en la formación de las primeras estructuras, ya que determinan la escala de fragmentación característica de las nubes y la magnitud del flujo de acreción hacia las protoestrellas en crecimiento [Galli & Palla 2013]. Mientras que la química determina la abundancia de los principales constituyentes moleculares del gas, la microfísica de cada componente individual define la eficiencia de enfriamiento del gas. En el caso del universo en expansión homogéneo, el equilibrio térmico del gas se establece simplemente por expansión adiabática, ya que las moléculas no se forman en una fracción suficiente para acoplar eficazmente los campos de materia y radiación. Sin embargo, en el gas que colapsa de los primeros minihalos o halos más grandes, la densidad y la temperatura aumentan considerablemente permitiendo la excitación de más grados moleculares de libertad. Por tanto, se necesita un conocimiento detallado de los principales agentes refrigerantes para determinar el estado térmico del gas.

La química primordial es impulsada por reacciones lentas en fase gaseosa promovidas por colisiones con electrones y protones que quedan de la recombinación a un nivel de una parte en $\sim 10^4$. Como resultado, solo las moléculas diatómicas y triatómicas simples y los iones moleculares que contienen H , D (Deuterio), He (Helio) y Li (Litio) se forman en cantidades mayores.

El colapso de las nubes de gas primordial (principalmente formadas por H_2), puede conducir a la formación de estrellas de masa ordinaria¹ ($10 - 100 M_\odot$, que se conocen como estrellas Pop III) o estrellas supermasivas ($M \gtrsim 10^5 M_\odot$, llamadas SMS, *SuperMasive Stars*), dependiendo de la intensidad de los campos de radiación en el medio ambiente [Sugimura et. al. 2016].

El colapso empieza aproximadamente en $z \simeq 100$ (a la par del *freeze-out* de los electrones). La formación de estrellas abarca en el rango de $10 < z < 100$ [Galli & Palla 2002].

Las estrellas Pop III se forman por enfriamiento de H_2 en ausencia de un fuerte campo de radiación Lyman-Werner (LW), con energía $h\nu = 11,2 - 13,6 eV$. Por el contrario, en una nube irradiada por un campo de radiación de LW extremadamente fuerte, el H_2 se destruye por completo y se suprime el enfriamiento.

¹Donde M_\odot son masas solares y $1 M_\odot = 1,989 \times 10^{30} kg$.

5.2. La Química del Universo Temprano.

Básicamente, la química del Universo temprano se reduce a tres especies principales, H_2 , H^- y H_2^+ , cuyos destinos están fuertemente conectados. La química del deuterio no se analizará, pero vale la pena mencionar que podría ser relevante para la formación de estrellas primordiales de baja masa mediante, por ejemplo, fusiones de halo y el enfriamiento del gas post-choque [Bovino & Galla 2018].

5.2.1. Química del H_2 .

El H_2 es la molécula más simple y dominante del universo y desempeña un papel crucial en muchos entornos astrofísicos. Fue la primera especie formada en el universo y tuvo gran relevancia en la formación de los primeros objetos cosmológicos. A pesar de esto, el H_2 se caracteriza por unas propiedades químicas peculiares que afectan su química y la física donde está involucrado.

Al ser una molécula homonuclear (simétrica), el H_2 no posee un momento dipolar permanente y las transiciones rovibracionales en su estado fundamental se producen a través de la radiación cuadrupolo [Bovino & Galla 2018].

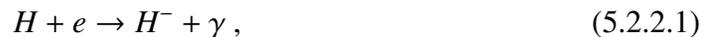
Como primera consecuencia, la formación de H_2 por asociación radiativa directa de átomos de H en el estado fundamental es insignificante porque no se permiten transiciones estabilizadoras. En las nubes moleculares actuales, el H_2 se forma por reacciones superficiales de los granos de polvo que pueden absorber de manera eficiente la energía que debe liberarse en el proceso. Los únicos catalizadores disponibles para formar H_2 en una nube de cero metalicidad² son los electrones y los protones, componentes bastante menores del universo posterior a la recombinación [Bovino & Galla 2018].

La formación del H_2 a partir del canal H^- usando la fracción de electrones libres, comienza a *redshift's* menores de 100 [Galli & Palla 2013].

5.2.2. Canales de Formación del H_2 .

En el gas primordial de baja densidad ($\lesssim 10^8 \text{ cm}^{-3}$), el H_2 es el refrigerante principal en el régimen de bajas temperaturas, y se forma a través del canal H^- o del canal H_2^+ .

El canal H^- comienza con la formación³ de H^- por *apego radiativo*:



²La metalicidad es el concepto astrofísico que se utiliza para describir la abundancia relativa de elementos más pesados que el helio en una estrella. Esos elementos reciben el nombre de metales independientemente de su posición en la tabla periódica. Por lo tanto, una nube de cero metalicidad es aquella que sólo está formada por hidrógeno y helio.

³Ión del hidrógeno que contiene un protón y dos electrones, de ahí su carga negativa.

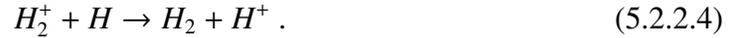
seguido de la formación de H_2 por *desprendimiento asociativo*:



De manera similar, **el canal** H_2^+ comienza con la formación⁴ de H_2^+ por *asociación radiativa*:



seguido de la reacción de *transferencia de carga*:



En cada canal, el segundo paso avanza mucho más rápido que el primero y su velocidad determina la cantidad de formación de H_2 .

El H_2 formado por estos canales se destruyen principalmente por *fotodisociación*:



y por *disociación por colisión* con átomos de H :



En la era posterior a la Recombinación, la formación de H_2 está controlada principalmente por el canal H_2^+ para el corrimiento al rojo $z > 100$, debido a la supresión de H^- por la radiación de fondo cósmica (CMB).

Un ingrediente fundamental en cualquier escenario cosmológico para la formación de las primeras estrellas es la capacidad de las nubes primordiales para irradiar energía de manera eficiente durante la fase de colapso gravitacional.

5.3. Procesos de Enfriamiento.

En un plasma de H y He en equilibrio de ionización (esto es, si en cada punto del plasma hay un balance entre las ionizaciones y recombinaciones radiativas), la energía cinética térmica se puede eliminar del gas mediante excitación/ionización por colisión, recombinación y radiación de la dispersión de electrones libres o iones libres. Este último es, de hecho, la fuente principal de enfriamiento para el gas, $T_{gas} \gtrsim 10^6 K$, cuando el gas está completamente ionizado, pero su eficiencia disminuye al disminuir la temperatura. En $T \approx 10^5 K$, y $T \approx 5 \times 10^4 K$, el enfriamiento está dominado por la excitación por colisión de He^+ y H , respectivamente, seguida de un decaimiento radiativo (principalmente en la línea *Lyman* – α de hidrógeno neutro). Por debajo de $T \approx 10^4 K$, el plasma se

⁴Ión del hidrógeno que contiene dos protones y un electrón, de ahí su carga positiva.

recombina muy rápidamente. Los pocos electrones residuales son incapaces de excitar el primer nivel excitado de H , con una energía de $10,2 \text{ eV}$ por encima del estado fundamental, y la velocidad de enfriamiento cae a cero. Luego, la nube se relaja a un estado térmico estable con $T \approx 10^4 \text{ K}$. Mientras que en un gas de metalicidad distinta de cero, los iones de oxígeno y nitrógeno con los niveles de energía más bajos a solo unos pocos eV por encima del estado fundamental pueden enfriar aún más el gas, la evolución térmica de una nube primordial está controlada por la cantidad de $^5 H_2$ y HD y, en menor medida, H_3^+ , formada por reacciones en fase gaseosa en un ambiente libre de polvo [Bovino & Galla 2018].

5.3.1. Enfriamiento con H_2 .

El enfriamiento de una nube libre de metales está dominado por la emisión espontánea de niveles de vibración de H_2 excitados por colisión principalmente por átomos de H y He u otras moléculas de H_2 .

En el régimen ópticamente delgado, los fotones emitidos pueden escapar libremente de la nube sin ser reabsorbidos o dispersados, transfiriendo energía térmica hacia afuera a una tasa proporcional a la abundancia de H_2 . Sin embargo, a pesar de ser la especie molecular más abundante formada por reacciones en fase gaseosa en un gas sin metal, el H_2 no es un refrigerante eficiente. Debido a la falta de un momento dipolar eléctrico permanente, los niveles de vibración de H_2 tienen pequeñas probabilidades de transición y pueden desactivarse por colisión incluso a densidades relativamente bajas [Bovino & Galla 2018].

Cuando una molécula de H_2 se excita rotacional o vibracionalmente a través de una colisión con un átomo de H u otra molécula de H_2 , existen dos canales en competencia a través de los cuales puede ocurrir la desexcitación resultante: o la desexcitación es radiativa, lo que equivale a enfriamiento, o es colisión, en cuyo caso no hay pérdida neta de energía del gas.

5.4. Discusión.

Hemos seguido la evolución de H , H^+ , H^- y H_2^+ para la formación de H_2 mediante una red química reducida que incluye las reacciones más relevantes en los canales H^- y H_2^+ . La química completa del hidrógeno involucra más de 20 reacciones adicionales; puede chequearse a fondo y claramente en [Galli & Palla 1998].

La química del H_2 depende de la densidad de electrones libres, provenientes de la fracción residual de la Recombinación del Hidrógeno. El *freeze-out* de los electrones es el principal impulsor en la formación de H_2 .

⁵ HD es la unión de un átomo de hidrógeno neutro y un isótopo de este, el deuterio, compuesto por un protón, un neutrón y un electrón simbolizado con la letra D . La molécula HD (llamada deuteruro de hidrógeno) contiene dos protones, un neutrón y dos electrones.

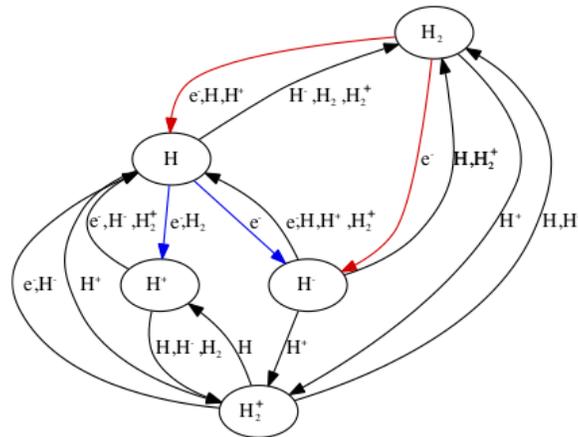


Figura 5.1: Gráfico de una red primordial simple orientada a H_2 . Cada flecha representa una ruta de reacción donde los reactivos involucrados se dibujan como eje o sobre las flechas. Por ejemplo, $H_2 + e$ produce $H + H^-$ como lo indican las flechas de color rojo donde H_2 se informa como un eje y el electrón como un reactivo, o $H + e$ da $H^+ + H^-$ como lo indican las flechas de color azul [Bovino & Galla 2018].

La importancia del H_2 en el Universo temprano está respaldada por las recientes mediciones de la sonda de anisotropía de microondas de Wilkinson (WMAP), lo que implica que el enfriamiento del H_2 es importante para la formación de estructuras tempranas, en especial, las primeras estrellas [Savin et. al. 2004].

Químicas posteriores⁶ a la del H_2 , como son las de Deuterio, Helio y Litio, además de también contribuir al enfriamiento del gas (aunque en mucha menor medida que el H_2), forman moléculas primordiales de D , He y Li en forma similar a la formación del H_2 . Las moléculas primordiales permiten que el gas se enfríe, se contraiga (colapse) y se fragmente. Si bien la respuesta a las preguntas fundamentales sobre la formación de las primeras estructuras y estrellas (escala de fragmentación, espectro de masas, masa máxima, etc.) no dependen solo de la química, una comprensión completa de las propiedades termodinámicas de la materia bariónica es un ingrediente fundamental [Galli & Palla 2013].

La evolución de H_2 , H_2^+ , H_3^+ y sus isotópos deuterados depende en gran medida de la contribución adicional al campo de radiación cósmica de los fotones producidos por la recombinación de H y He . La interacción del CMB con el gas primordial es probablemente la mejor sonda para probar las predicciones de la química primordial y proporciona una forma única de observar la edad oscura antes de la formación de la estructura [Galli & Palla 2013].

⁶Detalles de las químicas posteriores a la del H_2 se pueden consultar a detalle en [Galli & Palla 1998], [Galli & Palla 2013] y [Bovino & Galla 2018].

Capítulo 6

Conclusiones

Se ha presentado la física básica detrás del proceso de la Recombinación desde dos puntos de vista: en el equilibrio y fuera de este.

En el proceso en el equilibrio, se hace uso de la ecuación de Saha

$$\frac{1 - X_e}{X_e^2} = 4\zeta(3) \sqrt{\frac{2}{\pi}} \eta \left(\frac{kT}{m_e c^2} \right)^{3/2} e^{I/kT}, \quad (6.0.0.1)$$

para describir la evolución de la Recombinación. Sin embargo, su rapido decaimiento, la falta de más física involucrada y el asumir que el equilibrio está presente en todo momento, es decir, que la reacción no sale o rompe el equilibrio, cosa que en la realidad si sucede, hacen necesario el replantear el análisis.

Dentro del equilibrio, la fracción de ionización llega a cero, es decir, no queda una fracción residual de electrones. Como asumimos un Universo electricamente neutro, cada protón se ligaría con un electrón para formar un átomo de hidrogeno y en el plasma primordial sólo habria hidrógeno monoatómico y los nucleos procedentes de la nucleosíntesis primordial no tendrían electrones con que ligarse para formar los elementos ligeros. Es obvio que en nuestro Universo esto no ocurrió así: quedó un residuo de electrones y protones libres.

Dado que el plasma primordial es un gas de partículas, un análisis con la Teoría Cinética y su anclaje con la ecuación de Boltzmann,

$$\begin{aligned} \frac{1}{a^3} \frac{d}{dt} (n_1 a^3) &= n_1^{(0)} n_2^{(0)} \langle \sigma v \rangle \left[\frac{n_3 n_4}{n_3^{(0)} n_4^{(0)}} - \frac{n_1 n_2}{n_1^{(0)} n_2^{(0)}} \right] \\ \Rightarrow \frac{1}{a^3} \frac{d}{dt} (n_e a^3) &= n_e^{(0)} n_p^{(0)} \langle \sigma v \rangle \left[\frac{n_H}{n_H^{(0)}} - \frac{n_e^2}{n_e^{(0)} n_p^{(0)}} \right] \\ \Rightarrow \frac{dX_e}{dt} &= \left[(1 - X_e) \beta - X_e^2 n_b \alpha^{(2)} \right], \end{aligned} \quad (6.0.0.2)$$

considerando colisiones entre las especies de la reacción nos acerca más a la realidad, pues involucra más física que Saha y considera el momento en que ya no persiste el equilibrio.

Según la descripción del proceso, la ecuación anterior resulta en una ecuación diferencial que se puede reducir al equilibrio y que describe el proceso fuera del equilibrio. Para ver y analizar la evolución del proceso elegido, hay que hacer una integración numérica.

Pero, aunque un enfoque dinámico se acerca mucho más a la realidad, estos procesos pueden afinarse (involucrando aún más física) y mejorar los resultados.

Se hizo el análisis de 5 puntos de vista del proceso fuera del equilibrio: *Peebles: 3 Niveles y Multinivel*, *Weinberg*, *Mukhanov* y *HyRec Code*.

Entre la aproximación de Peebles¹ 3 niveles (que describe un átomo efectivo de 3 niveles de decaimiento) y multinivel, hay una gran mejora en la precisión de valores en la multinivel, al incluir en este análisis el *judge factor* sugerido por [Seager & Saselov 1999] para considerar los decaimientos en cascada de estados $n > 2$ hasta el estado $n = 2$ y se observa un aceleramiento de la Recombinación a partir de $z = 800$ que resulta en un valor $\sim 10\%$ más bajo y concordante con los cálculos modernos de la fracción residual de electrones a través de la mayor precisión de los parámetros cosmológicos Ω_b , Ω_m , h y $T_{\gamma,0}$ resultado de experimentos como WMAP y Planck [Ade et. al. 2014], [Aghanim et.al. 2020].

El proceso de Weinberg es, en síntesis, el mismo de Peebles. La diferencia en la mejora de Weinberg radica en que, como él mismo cita en [Weinberg 2008], llega a lo mismo de diferente manera, y ya considera los decaimientos en cascada multinivel además de parámetros cosmológicos más precisos.

El proceso de Mukhanov que hemos llamado *una aproximación de aproximaciones*, también presenta buen fundamento físico y excelentes resultados en su integración numérica.

El uso de la potencia numérica y el involucramiento de más física del *HyRec Code* nos da los valores y resultados más precisos que obtenemos y la pauta para considerar los resultados de los otros procesos como muy buenos.

Se define la recombinación en el momento en que $X_e = 0,5$, es decir, cuando la mitad de los electrones se han ligado con protones para formar átomos de hidrógeno que ya no serán ionizados pues con la expansión del Universo la radiación térmica ionizante se enfría y deja de tener la energía suficiente de ionización. En el equilibrio encontramos que $X_e^{EQ} = 0,5$ a la temperatura de recombinación $T_{rec} = 3737,52K \rightarrow z_{rec} = 1370$, es decir,

$$X_e(T_{rec}) = X_e(3737,52K) = 0,5 . \quad (6.0.0.3)$$

Fuera del equilibrio, T_{rec} es mas pequeña y para los diferentes procesos analizados, oscila en el rango de $T_{rec} = (3355 - 3481)K \rightarrow z_{rec} = 1224 - 1275$

En el *freeze-out* de los electrones se fija la fracción residual que será de vital importancia

¹Peebles, quien es considerado el padre de la Recombinación por su clásico paper de 1968 [Peebles 1968], y recientemente laureado Premio Nobel de Física.

para procesos posteriores del Universo. Se llegó a la conclusión de que dicho valor está acotado en

$$X_e^f = 2,7 \times 10^{-4} \quad (6.0.0.4)$$

cerca de $z = 100$.

Se observa también que todos los procesos llevan involucrados los parámetros cosmológicos $\Omega_b h^2$ y $\Omega_M h^2$ y que cada referencia da por buenos los que en ella se incluyen. Estos parámetros influyen decisivamente en el comportamiento de los resultados y evolución de la Recombinación y (aunque en mucho menor medida), en el valor de la fracción residual.

La recombinación se relaciona con las 3 evidencias observacionales del Big Bang:

1.-La expansión: la expansión del Universo a través del tiempo va *enfriando/estirando* los fotones de la radiación térmica ultra energéticos que ionizan rápidamente los átomos de hidrogeno que se logran formar. Al expandirse el Universo, los fotones van perdiendo energía hasta que tienen menos que la necesaria para ionizar al átomo e hidrógeno; la expansión da paso a la recombinación. Además, en el equilibrio y en el enfoque dinámico se toma en cuenta y se usa el factor de escala a . Se usa la ecuación de Boltzmann *para un Universo en expansión*.

2.-Nucleosíntesis primordial: etapa que ocurrió mucho antes que la recombinación, pero al quedar la fracción residual de electrones e intervenir en la química del H_2 , los electrones sobrantes se combinaron en químicas posteriores a la del H_2 con los núcleos creados en la *Big Bang Nucleosynthesis* para formar los primeros átomos de elementos ligeros.

3.-La Radiación Cósmica de Fondo: el proceso inmediato posterior a la recombinación fue el desacoplamiento de los fotones de la materia, es decir, los fotones ya no interactuaron más con la materia aumentando su trayectoria media libre y haciendo el Universo transparente a la radiación. El Desacoplamiento es considerado el origen del CMB.

En resumen, la Recombinación del Hidrógeno es una etapa fundamental de la Historia Térmica del Universo para procesos cosmológicos posteriores, tales como **Desacoplamiento del Fotón** que da pie al inicio de la transparencia a la radiación del Universo², que es el origen de la **Radiación Cósmica de Fondo** o **CMB** y posteriormente, dejar una fracción residual de electrones necesaria para formar hidrógeno molecular, H_2 , que juega un papel importante en el enfriamiento del gas primordial y en la formación de la primera generación de estrellas, reactores de fusión nuclear imprescindibles para la formación de elementos pesados.

²Momento que podemos relacionar con el famoso *¡Hágase la Luz!* relatado en el Génesis 1:3-1:5 (ver epígrafe de esta tesis).

A título personal:

¿De dónde venimos?, ¿hacia dónde vamos?, ¿cómo se formaron las cosas? son preguntas que siempre me han intrigado en su respuesta, y para responderlas no hay nada mejor que la Cosmología. El tema de la recombinación del hidrógeno fue de mi agrado por que, como se dijo atrás, se relaciona con las tres evidencias observacionales del Big Bang, reforzando así dicha teoría.

Un pasaje bíblico muy arraigado en mí es cuando Dios dijo: *¡hágase la luz!*; la recombinación del hidrógeno explica el momento (llamado el desacoplamiento) en que el universo se vuelve transparente a la radiación y la luz viaja libremente, es decir, *se hizo la luz*. La huella de esto es la Radiación del Fondo Cósmico o CMB.

Al estudiar y desarrollar el tema, aprendí sobre teoría cinética, soluciones numéricas y, por supuesto, la recombinación dentro y fuera del equilibrio. Mi panorama sobre la cosmología se amplió y se hizo más profundo, pues para entender etapas previas y posteriores a la recombinación, tuve que estudiar temas como la nucleosíntesis primordial (*BBN*), la razón n/p y la formación de las primeras estructuras en el universo.

Después de este trabajo, quedan más claras las preguntas que me llevaron a estudiar el tema, nuevos horizontes de la física y la cosmología me intrigan ahora, pero solo el tiempo, el universo y *El Creador* dirán hasta donde llegue.

*Juan Luis Calderón Zavala.
Morelia, Michoacán, México, Agosto del 2021.*

Apéndice A

Obtención de la Energía Libre de Helmholtz y el Potencial Químico para un Gas Ideal Clásico

A.1. Energía Libre

Partiendo de que

$$A(N, V, T) = -kT \ln(Z) . \quad (\text{A.1.0.1})$$

La función de partición de un gas ideal clásico es

$$Z = \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{h^3} (2\pi mkT)^{3/2} \right]^N . \quad (\text{A.1.0.2})$$

Sacamos el inverso de Z:

$$Z^{-1} = N! \left[\frac{h^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}} \right]^N = N! \left[\frac{1}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \right]^N . \quad (\text{A.1.0.3})$$

Aplicando logaritmo:

$$\ln(Z^{-1}) = \ln \left(N! \left[\frac{1}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \right]^N \right) = \ln(N! \alpha^N) = \ln N! + \ln \alpha^N = \ln N! + N \ln \alpha \quad (\text{A.1.0.4})$$

$$- \ln Z = \ln N! + \ln \alpha^N = \ln N! + N \ln \alpha . \quad (\text{A.1.0.5})$$

Usando la aproximación de Stirling: $\ln N! = N \ln N - N$

$$-\ln Z = N \ln N - N + N \ln \alpha = N(\ln N - 1 + \ln \alpha) = N(\ln(N\alpha) - 1) = N \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right] - N. \quad (\text{A.1.0.6})$$

Por lo tanto, obtenemos

$$A(N, V, T) = -kT \ln Z = kT(-\ln Z) = kT \left(N \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right] - N \right) \quad (\text{A.1.0.7})$$

$$\Rightarrow \boxed{A(N, V, T) = NkT \left(\ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right] - 1 \right)} \quad (\text{A.1.0.8})$$

A.2. Potencial Químico

Partiendo de

$$A = NkT \left(\ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right] - 1 \right) = kT \left(N \ln \left[N \underbrace{\frac{1}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2}}_{\alpha} \right] - N \right) = kT(N \ln[N\alpha] - N). \quad (\text{A.2.0.1})$$

Usando la relación termodinámica:

$$\mu = \left(\frac{\partial A}{\partial N} \right)_{V,T} = kT \left((1) \ln[N\alpha] + \frac{1}{N\alpha} (1) \alpha N - 1 \right) = kT(\ln[N\alpha] + \cancel{1} - \cancel{1}) = kT \ln[N\alpha] \quad (\text{A.2.0.2})$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = kT \ln \left[\frac{N}{V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \right]} \quad (\text{A.2.0.3})$$

Apéndice B

Digresiones

Al reescribir la ecuación de Saha en el capítulo 2, se usó la *razón barión-fotón* $\eta = n_B/n_\gamma$ como datos ya conocidos. Veamos en estas digresiones¹ la manera en que se obtiene su valor numérico.

B.1. La densidad de fotones n_γ

El comportamiento de una clase de sistemas en los que, si bien las interacciones intermoleculares aún son insignificantes, los efectos de la estadística cuántica (que surgen de la indistinguibilidad de las partículas) asumen un papel cada vez más importante. Esto significa que la temperatura T y la densidad de partículas n del sistema ya no cumplen con el criterio

$$n\lambda^3 = \frac{nh^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \ll 1, \quad (\text{B.1.0.1})$$

donde $\lambda \equiv \frac{h}{(2\pi mkT)^{1/2}}$ es la *longitud de onda térmica* o la *longitud de onda de De Broglie* de las partículas. De hecho, la cantidad $n\lambda^3$ resulta ser un parámetro muy apropiado, en términos del cual se pueden expresar adecuadamente las diversas propiedades físicas del sistema. En el límite $n\lambda^3 \rightarrow 0$, todas las propiedades físicas pasan sin problemas a sus contrapartes clásicas. Cuando $n\lambda^3$ se convierte en el orden de la unidad, el comportamiento del sistema se vuelve significativamente diferente del comportamiento clásico y se caracteriza por efectos cuánticos.

Es evidente que es más probable que un sistema muestre un comportamiento cuántico cuando está a una temperatura relativamente baja y/o tiene una densidad de partículas relativamente alta. Además, cuanto más pequeña es la masa de partículas, mayores son los

¹Según el diccionario de la RAE: Hecho de apartarse en un relato, discurso o exposición del asunto principal para tratar de algo que surge relacionado con él.

efectos cuánticos. Ahora, cuando $n\lambda^3$ es del orden de la unidad, entonces no solo el comportamiento de un sistema muestra una desviación significativa del comportamiento clásico típico, sino que también está influenciado por si las partículas que constituyen el sistema obedecen a las estadísticas de Bose-Einstein o de Fermi-Dirac.

Nuestro sistema a estudiar en esta sección son los fotones, que es bien sabido son bosones y se rigen por la estadística de Bose-Einstein.

En dicha teoría encontramos integrales del tipo [Pathria & Beale 2011]

$$G_n(z) = \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1}e^x - 1} \quad (0 \leq z < 1, n > 0; z = 1, n > 1). \quad (\text{B.1.0.2})$$

Primero, nótese que

$$\lim_{z \rightarrow 0} G_n(z) = \int_0^\infty ze^{-x} x^{n-1} dx = z\Gamma(n), \quad (\text{B.1.0.3})$$

donde $\Gamma(n)$ es la función gamma, definida por $\Gamma(n) = \int_0^\infty e^{-x} x^{n-1} dx$. Entonces, definimos la función $g_n(z)$ tal que

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} G_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1}e^x - 1} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad n \in \mathbb{R} \quad (\text{por convergencia}). \quad (\text{B.1.0.4})$$

Multiplicamos el integrando por ze^{-x}/ze^{-x} tenemos

$$\frac{1}{z^{-1}e^x - 1} = ze^{-x} \underbrace{\frac{1}{1 - ze^{-x}}}_{\text{serie geométrica}} = ze^{-x} \sum_{\alpha=0}^{\infty} (ze^{-x})^\alpha = \sum_{\alpha=0}^{\infty} (ze^{-x})^{\alpha+1} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} (ze^{-x})^\alpha, \quad (\text{B.1.0.5})$$

asi que podemos hacer una expansión en potencias de z :

$$\Rightarrow g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{\alpha=1}^{\infty} z^\alpha \int_0^\infty e^{-\alpha x} x^{n-1} dx, \quad y = \alpha x \rightarrow dx = \frac{dy}{\alpha} \quad (\text{B.1.0.6})$$

$$\Rightarrow g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{z^\alpha}{\alpha^n} \underbrace{\int_0^\infty e^{-y} y^{n-1} dy}_{\Gamma(n)} = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{z^\alpha}{\alpha^n}. \quad (\text{B.1.0.7})$$

Por lo tanto, $g_n(z) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{z^\alpha}{\alpha^n}$; si $z = 1$ tenemos

$$g_n(1) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha^n} = \zeta(n), \quad (\text{B.1.0.8})$$

donde $\zeta(n)$ es la *función zeta de Riemann*. Reemplazando z por 1 en la primera forma de $g_n(z)$, ec. (B.1.0.4)

$$g_n(1) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{e^x - 1} = \zeta(n). \quad (\text{B.1.0.9})$$

Despejando la integral, obtenemos:

$$\boxed{\int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{e^x - 1} = \Gamma(n)\zeta(n)} \quad (\text{B.1.0.10})$$

donde $\Gamma(n)$ y $\zeta(n)$ son constantes conocidas.

De la Ley de Planck, podemos calcular la densidad de fotones en un gas. Sabemos que el *número promedio de fotones por frecuencia* en un intervalo de energía entre E y $E + dE$ es

$$N_\gamma = \frac{8\pi V}{c^3 h^3} \int_0^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\varepsilon/kT} - 1}. \quad (\text{B.1.0.11})$$

Poniendo la expresión anterior en términos de la frecuencia:

$$N_\gamma = \frac{8\pi V k^3 T^3}{c^3 h^3} \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1}. \quad (\text{B.1.0.12})$$

Se define la densidad de fotones $n_\gamma \equiv \frac{N_\gamma}{V}$, de la última expresión dividiendo entre el volumen, obtenemos la *densidad de fotones en el gas incluyendo todas las frecuencias*

$$n_\gamma = \frac{8\pi k^3 T^3}{c^3 h^3} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{e^x - 1}}_{\Gamma(3)\zeta(3)} \quad (\text{B.1.0.13})$$

$$\Rightarrow \boxed{n_\gamma = \frac{8\pi k^3}{c^3 h^3} T^3 \Gamma(3)\zeta(3)} \quad (\text{B.1.0.14})$$

Al incluir el volumen V indica que estamos incluyendo la expansión del Universo, pues recordemos que $V \sim a^3 \sim \left(\frac{1}{T}\right)^3$, es decir, eventualmente n_γ proviene del volumen en expansión. Además, n_γ cambia por que es una densidad, no por que cambie el número de fotones.

B.2. La densidad de bariones n_b

El parámetro de densidad es una forma muy útil de especificar la densidad del Universo. Empecemos con la ecuación de Friedmann:

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3}\rho - \frac{k}{a^2}, \quad (\text{B.2.0.1})$$

donde $H = \dot{a}/a$ es el factor de escala, G es la constante de gravitación de Newton, ρ la densidad y k el término de curvatura.

Para un valor dado de H , hay un valor especial de la densidad que se requeriría para que la geometría del Universo sea plana, es decir $k = 0$ (ver experimento *BOOMERanG* [Liddle 2003], [Masi et. al. 2002]). Esto se conoce como la densidad crítica ρ_c , que está dada por

$$\rho_c = \frac{3H^2}{8\pi G}. \quad (\text{B.2.0.2})$$

Nótese que la densidad crítica cambia con el tiempo, ya que H lo hace. Como conocemos el valor presente de la constante de Hubble ($H_0 = 100 \frac{hkm}{sMpc}$ y el parámetro de Hubble $h = 0,72 \pm 0,08$), podemos calcular la densidad crítica actual. Dado que $G = 6,67 \times 10^{-11} \frac{m^3}{kg s^2}$, y convirtiendo megaparsecs a metros, la densidad crítica rinde $\rho_c = 1,88 h^2 \times 10^{-26} kg/m^3$. Esto es densidad de masa.

Entendamos que la densidad crítica no es necesariamente la verdadera densidad del Universo, ya que el Universo no necesita ser plano. Sin embargo, establece una escala natural para la densidad del Universo. En consecuencia, en lugar de citar directamente la densidad del Universo, a menudo es útil citar su valor en relación con la densidad crítica. Esta cantidad adimensional se conoce como el parámetro de densidad Ω , definido por

$$\Omega(t) = \frac{\rho}{\rho_c}. \quad (\text{B.2.0.3})$$

Nuevamente, en general Ω es una función del tiempo, ya que tanto ρ como ρ_c dependen del tiempo. El valor del parámetro de densidad hoy se denota Ω_0 .

Entonces para cualquier parametro de densidad i tendremos $\Omega_i = \rho_i/\rho_c$ con la restricción de que $\sum_i \Omega_i = 1$.

Para los bariones, tendremos $\rho_b = \Omega_b \rho_c$ que expresa densidades de masa. ρ_b es la *densidad de masa bariónica por volumen*. La *densidad de energía bariónica* se obtiene al multiplicar ρ_b por c^2 para obtener su energía propia. Definimos $\varepsilon_b = \rho_b c^2$ y sustituyendo ρ_b tenemos $\varepsilon_b = \Omega_b \rho_c c^2$. El valor de Ω_b es $0,02/h^2$ y con los demás datos calculamos el valor de la densidad total de energía bariónica:

$$\varepsilon_b = 3,38 \times 10^{-11} J/m^3. \quad (\text{B.2.0.4})$$

La energía en reposo (o energía propia) del protón va como $E_p = 939\text{MeV} = 1,5044 \times 10^{-10}\text{J}$ por cada barión. Ahora podemos calcular la densidad de número bariones:

$$n_b = \frac{\varepsilon_b}{E_p} \Rightarrow \quad (\text{B.2.0.5})$$

$$\boxed{n_b = 0,2246742888\text{m}^{-3}} \quad (\text{B.2.0.6})$$

Esto nos dice que en cualquier punto del Universo hay aproximadamente 0,22 bariones por metro cúbico, es decir, se necesitan 5m^3 para encontrar un barión.

Otra manera de expresar n_b es dejarla en términos de $\Omega_b h^2$ [Dodelson 2003]. Dado que

$$n_b = \frac{\varepsilon_b}{E_p} = \frac{\rho_b}{m_p} = \frac{\rho_c \Omega_b}{m_p}, \quad (\text{B.2.0.7})$$

y sustituyendo los valores de $\rho_c = 1,879h^2 \times 10^{-29}\text{gcm}^{-3}$ y $m_p = 1,673 \times 10^{-24}\text{g}$

$$n_b = \Omega_b \frac{1,879h^2 \times 10^{-29}\text{gcm}^{-3}}{1,673 \times 10^{-24}\text{g}} = 1,12 \times 10^{-5} \Omega_b h^2 \text{cm}^{-3}. \quad (\text{B.2.0.8})$$

B.3. La razón barión-fotón η

La razón barión-fotón es un parámetro cosmológico determinable a partir de observaciones cosmológicas. A partir de cierto momento y a grandes escalas, el número de bariones y de fotones ya no cambia en el Universo. La reacción estudiada es



Hagamos algunas observaciones [Astorga 2018]

- *Conservación de número bariónico*

Conservación de los bariones: asumimos que el número de bariones es igual en el estado inicial que en el final.

- *¿Qué pasa si el número bariónico no se conserva?*

El Modelo Estándar de Partículas usa conservación del número bariónico. Más allá del Modelo Estándar, existen otros modelos que violan el número bariónico, cómo los modelos de Bariogénesis que estudian relaciones de Asimetría Materia/Antimateria en el Universo.

¿Por qué hay exceso de bariones sobre antibariones?, ¿por qué un factor crece y el otro decrece? Son preguntas del área de la Bariogénesis. El universo produjo esto en una época muy temprana, en el orden de 1s. A esto se le llama **Transición de Fase Electrodébil** (EWPT por sus siglas en inglés).

Si el número bariónico no se conserva, el protón decae, sin embargo no se ha observado esto. Después de la EWPT podemos confiadamente asumir que el número de bariones se conserva.

En escalas cosmológicas, podemos ignorar el cambio de fotones por ser mínimo. En procesos astrofísicos se produce radiación y se suma a la Radiación Cósmica de Fondo (RCF), pero es una contribución muy pequeña. Así también, el número de fotones dominante a escalas cosmológicas estaría dado por la RCF y contribuciones astrofísicas pueden despreciarse.

Estas discusiones nos llevan a tomar η como un buen parámetro cosmológico. Obtenemos η :

Dado que la RCF domina, a su temperatura actual $T = 2,726K$, sustituyendo esto y las constantes en la densidad de fotones, ec. (B.1.0.14), tenemos

$$n_\gamma = 4,10953 \times 10^8 / m^3 \quad (\text{B.3.0.2})$$

es decir, hay cerca de 411 millones de fotones por metro cúbico en cualquier punto del Universo. Finalmente, sustituyendo estos valores para calcular $\eta \equiv n_B/n_\gamma$:

$$\eta = 5,46 \times 10^{-10} \quad (\text{B.3.0.3})$$

es decir, hay $\sim 5,5 \times 10^{-10}$ bariones por cada fotón, o bien, hay $\sim 1,7 \times 10^9$ fotones por cada barión [Liddle 2003].

Hemos obtenido los valores numéricos de los parámetros usados en la ecuación de Saha². Nótese que las n 's son hoy, pues se usó $T = T_{\text{hoy}} = T_0$, $\Omega_B = \Omega_{B\text{-hoy}}$, H_0 , etc., es decir, sus valores en el presente. La razón entre la densidad de bariones y la de fotones permanece constante a lo largo del tiempo, pese a que el universo se va expandiendo y diluyendo.

²En la práctica, usaremos los valores obtenidos anteriormente redondeados, a saber:

$$n_B = 0,225 m^{-3} \quad n_\gamma = 4,11 \times 10^8 m^{-3} \quad \eta = 5,5 \times 10^{-10} .$$

Apéndice C

Unidades Naturales en Cosmología

C.1. Fundamento de las Unidades Naturales

El sistema de unidades que uno selecciona para un problema a menudo revela mucho sobre la física subyacente del problema y su enfoque. La cosmología actual implica escalas desde las distancias más microscópicas como $\ll 1 \text{ fermi} = 10^{-13} \text{ cm}$, hasta las distancias más macroscópicas como $\gg \text{Mpc} \sim 3 \times 10^{24} \text{ cm}$. El enfoque de este trabajo es el Universo temprano, y ese enfoque se refleja en nuestra elección de unidades, llamadas *unidades físicas naturales* o de alta energía. En este sistema, las constantes fundamentales son

$$\hbar = c = k_B = 1, \quad (\text{C.1.0.1})$$

y hay una dimensión fundamental, la energía, de modo que

$$[\text{Energía}] = [\text{Masa}] = [\text{Temperatura}] = [\text{Longitud}]^{-1} = [\text{Tiempo}]^{-1}.$$

Los físicos de partículas utilizan dichas unidades naturales. Estas unidades describen naturalmente fenómenos en los que la física cuántica y la relatividad especial son importantes, por ejemplo, en el régimen donde la teoría cuántica de campos es importante. En término de las unidades *cgs*, estas son¹

¹Se muestran los valores en unidades *cgs*, sin embargo, las podemos expresar de igual manera en el *SI* a través de las relaciones

$$1 \text{ cm} = 10^{-2} \text{ m}, \quad 1 \text{ g} = 10^{-3} \text{ Kg}, \quad 1 \text{ erg} = 1 \text{ gcm}^2 \text{ s}^{-2} = 10^{-7} \text{ J}, \quad 1 \text{ dina} = 1 \text{ gcm s}^{-2} = 10^{-5} \text{ N}. \quad (\text{C.1.0.2})$$

Más adelante veremos ejemplos concretos usando valores de las unidades naturales expresados en el *SI*.

$$\begin{aligned}
 c &= 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1} \\
 \hbar &= 1,0546 \times 10^{-27} \text{ erg s} \\
 k_B &= 1,3807 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1},
 \end{aligned}
 \tag{C.1.0.3}$$

y al establecerlos en la unidad, podemos convertir las unidades elementales de la siguiente manera:

$$c = 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1} \Rightarrow c \equiv 1 = 2,9979 \times 10^{10} \frac{\text{cm}}{\text{s}} \Rightarrow \boxed{1 \text{ s} = 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm}}
 \tag{C.1.0.4}$$

De igual manera:

$$\begin{aligned}
 1 \text{ erg} &= 1 \text{ g cm}^2 \text{ s}^{-2}, \quad \hbar = 1,0546 \times 10^{-27} \text{ erg s} = 1,0546 \times 10^{-27} \text{ g cm}^2 \text{ s}^{-1} \equiv 1 \\
 \Rightarrow \frac{1 \text{ erg}}{1} &\equiv \frac{1 \text{ erg}}{\hbar} = \frac{1 \text{ g cm}^2 \text{ s}^{-2}}{1,0546 \times 10^{-27} \text{ g cm}^2 \text{ s}^{-1}} = \frac{1}{1,0546 \times 10^{-27} \text{ s}} = 9,482268 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \\
 \Rightarrow 1 \text{ erg} &\simeq 9,4823 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \Rightarrow \boxed{1 \text{ s} = 9,4823 \times 10^{26} \text{ erg}^{-1}}
 \end{aligned}
 \tag{C.1.0.5}$$

Ahora, usando este último valor obtenido, calculemos:

$$\begin{aligned}
 1 \text{ s} &= 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm} \Rightarrow 9,4823 \times 10^{26} \text{ erg}^{-1} = 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm} \\
 \Rightarrow 1 \text{ cm} &= \frac{9,4823 \times 10^{26} \text{ erg}^{-1}}{2,9979 \times 10^{10}} = 3,162980753 \times 10^{16} \simeq 3,1630 \times 10^{16} \text{ erg}^{-1} \\
 \Rightarrow \boxed{1 \text{ cm} = 3,1630 \times 10^{16} \text{ erg}^{-1}}
 \end{aligned}
 \tag{C.1.0.6}$$

Análogamente, jugando con la definición principal de las unidades naturales ($\hbar = c = k_B = 1$) o usando valores ya calculados, se obtienen los siguientes valores²

²Algunos de los muchos que se pueden obtener con el sistema de Unidades Naturales, como veremos más adelante.

$$\begin{aligned}
1s &= 2,9979 \times 10^{10} cm = 9,4823 \times 10^{26} erg^{-1} \\
1cm &= 3,1630 \times 10^{16} erg^{-1} \\
1K &= 1,3807 \times 10^{-16} erg \\
1g &= \frac{1}{1,0546 \times 10^{-27}} \frac{s}{cm^2} = 2,8427 \times 10^{37} cm^{-1} = 8,9874 \times 10^{20} erg .
\end{aligned} \tag{C.1.0.7}$$

Seguindo esta convención, convertimos todas las unidades en términos de la unidad de energía *ergios*. Sin embargo, la unidad de energía más utilizada es $1eV = 1,6022 \times 10^{-12} erg$ ($1erg = 6,2414 \times 10^{11} eV$) en términos de las cuales escribimos las unidades *cgs* como:

$$\begin{aligned}
1s &= 1,5193 \times 10^{24} GeV^{-1} \\
1cm &= 5,0678 \times 10^{13} GeV^{-1} \\
1g &= 5,6094 \times 10^{23} GeV \\
1K &= 8,86175 \times 10^{-5} eV .
\end{aligned} \tag{C.1.0.8}$$

¿Qué significan todos estos números?. Por ejemplo, la energía de masa (mc^2) correspondiente a $1g$ es $5,6094 \times 10^{23} GeV$, y la energía cinética promedio correspondiente a la temperatura $1K$ es $8,6175 \times 10^{-5} eV$ por dos grados de libertad.

C.2. Ejemplos

Veamos algunos ejemplos de su uso en la historia térmica del Universo temprano.

Ejemplo 1: Dodelson, en su libro [Dodelson 2003], propone como ejercicio al lector, con el valor (ya en unidades naturales) de $T_0 = 2,725K = 2,348 \times 10^{-4} eV$ encontrar $\rho_\gamma = \frac{\pi^2 T_0^4}{15}$ en eV^4 y $g cm^{-3}$.

$$\rho_\gamma = \frac{\pi^2 T_0^4}{15} = \frac{\pi^2}{15} (2,348 \times 10^{-4} eV)^4 \simeq 2,00 \times 10^{-15} eV^4 .$$

Calculamos la cantidad $\hbar c^2 = 1,973 \times 10^{-5} eV cm$ y dividimos el resultado anterior de ρ_γ entre $(\hbar c^2)^3 = (1,973 \times 10^{-5} eV cm)^3$:

$$\rho_\gamma = \frac{2 \times 10^{-15} eV^4}{(1,973 \times 10^{-5} eV cm)^3} = \frac{2 \times 10^{-15} eV^4}{7,680624314 \times 10^{-15} eV^3 cm^3} = 0,2604 eV cm^{-3} ,$$

y sabemos que $1eV = 1,783 \times 10^{-33} g$, entonces

$$\begin{aligned}\rho_\gamma &= 0,2604 \frac{\text{eV}}{\text{cm}^3} \left[\frac{1,783 \times 10^{-33} \text{g}}{1 \text{eV}} \right] \\ &= 4,643 \times 10^{-34} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \\ \Rightarrow \rho_\gamma &= 4,643 \times 10^{-34} \text{g cm}^{-3} \quad \blacksquare\end{aligned}$$

Ejemplo 2: De igual manera, Dodelson en su libro [Dodelson 2003], para cálculos de la razón n/p y la abundancia de neutrones, hace uso del parámetro³ $H(x = 1) = 1,13 \text{ s}^{-1}$. Veamos la manera en que se obtiene ese valor a través del sistema de unidades naturales ($\hbar = c = k = 1$).

Partimos de que:

$$H = H(Q)x^{-2} = \sqrt{10,45} \sqrt{\frac{4}{45} \pi^3 G Q^4} \frac{1}{x^2}$$

y de que

$$T = Q = 1,293 \text{ MeV} \Rightarrow T^4 = Q^4 = (1,293 \times 10^6 \text{ eV})^4 = 2,795 \times 10^{24} \text{ eV}^4 .$$

Podemos usar

$$\hbar c = 1,973 \times 10^{-5} \text{ eVcm} \Rightarrow (\hbar c)^3 = (1,973 \times 10^{-5} \text{ eVcm})^3 .$$

Así, la división

$$\frac{Q^4}{(\hbar c)^3} = \frac{2,795 \times 10^{24} \text{ eV}^4}{(1,973 \times 10^{-5} \text{ eVcm})^3} = 3,64 \times 10^{38} \text{ eVcm}^{-3} .$$

Sabemos que $1 \text{ eV} = 1,783 \times 10^{-33} \text{ g}$, esto implica

$$3,64 \times 10^{38} \text{ eVcm}^{-3} \left(\frac{1,783 \times 10^{-33} \text{ g}}{1 \text{ eV}} \right) = 648879,699 \text{ g cm}^{-3} .$$

Así, a través de conversiones con unidades naturales convertimos la temperatura en unidades de energía a temperatura en unidades de densidad.

$$T^4 = Q^4 = 648879,699 \text{ g cm}^{-3} .$$

³Para hacer más fácil la integración de la ecuación de la razón n/p (ver [Dodelson 2003]) y eliminar las complicadas dependencias de la temperatura con el tiempo, se hace el cambio de variable $x = Q/T$, por lo que, $x = 1$ significa que $Q = T$.

El valor de la constante de Newton es $G = 6,673 \times 10^{-8} \text{ g}^{-1} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-2}$. Sustituyendo los anteriores valores numéricos en la ec. $H(x)$:

$$\begin{aligned} H(x=1) &= \sqrt{\frac{4\pi^3 G Q^4}{45}} \sqrt{10,75} = \sqrt{\frac{4\pi^3}{45} (6,673 \times 10^{-8} \text{ g}^{-1} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-2})(648879,699 \text{ g cm}^{-3})} \sqrt{10,75} \\ &= 0,3454547779 \text{ s}^{-1} \sqrt{10,75} \simeq 1,13 \text{ s}^{-1} \\ \Rightarrow \quad &\boxed{H(x=1) = 1,13 \text{ s}^{-1}} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Ejemplo 3: Veamos la manera de obtener la ec. (4.2.4.27) en unidades naturales, es decir, demostrar que:

$$\beta = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-B_2/k_B T) \alpha_B = 2,417 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} T^{3/2} e^{-39474/T} \alpha_B .$$

Conocemos los valores de

$$m_e = 0,511 \text{ MeV}, \quad k_B = 8,6173 \times 10^{-5} \text{ eV/K}, \quad \hbar = 6,5821 \times 10^{-16} \text{ eV s} .$$

Vayamos por partes. Analicemos el factor $\exp(-B_2/k_B T)$, donde $B_2 = 3,401593002 \text{ eV}$ y la temperatura debe estar en grados Kelvin, $T = T(\text{K})$.

$$\exp(-B_2/k_B T) = \exp\left[-\frac{3,401593002 \text{ eV}}{(8,6173 \times 10^{-5} \text{ eV/K})T(\text{K})} \right] = \exp\left[-\frac{39474}{T} \right] .$$

Ahora chequemos el factor $\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$, de igual manera con $T = T(\text{K})$.

$$\left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} = \left[\frac{(0,511 \text{ MeV})(8,6173 \times 10^{-5} \text{ eV/K})T(\text{K})}{2\pi(6,5821 \times 10^{-16} \text{ eV s})^2} \right]^{3/2} = \left[1,61764527 \times 10^{31} \frac{T}{\text{s}^2} \right]^{3/2} .$$

Se requiere tener la cantidad en cm^{-3} , así que dividimos lo que está dentro del corchete por un uno, esto es, $1 = c = 2,9979 \times 10^{10} \text{ cm/s} \rightarrow 1^2 = c^2 = (2,9979 \times 10^{10} \text{ cm/s})^2$:

$$\begin{aligned} &= \left[1,61764527 \times 10^{31} \frac{T}{\text{s}^2} \right]^{3/2} = \left[\frac{1,61764527 \times 10^{31} T}{(2,9979 \times 10^{10} \text{ cm/s})^2 \text{s}^2} \right]^{3/2} = \left[1,799902615 \times 10^{10} \frac{\cancel{\text{s}^2} T}{\text{cm}^2 \cancel{\text{s}^2}} \right]^{3/2} \\ &= 2,414757435 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} T^{3/2} \simeq 2,4147 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} T^{3/2} . \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\beta = \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-B_2/k_B T) \alpha_B = 2,417 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} T^{3/2} e^{-39474/T} \alpha_B} \quad \blacksquare$$

Bibliografía

- [Astorga 2018] Astorga-Sáenz, F.A., *Archivos personales*.
- [Liddle 2003] Liddle, A., *An Introduction to Modern Cosmology*, Wiley, Second Edition, 2003.
- [Pathria & Beale 2011] Pathria R.K., D.Beale Paul, *Statistical Mechanics*, Academic Press, Third Edition, 2011.
- [Ryden 2003] Ryden, B., *Introduction to Cosmology*, Addison-Wesley, First Edition, 2003.
- [Gratton 2018] Gratton Fausto, *Notas del Curso de Mecánica Estadística*.
<http://www.lfp.uba.ar/es/notas%20de%20cursos/notastermodinamica/08Equilibrio.pdf>
- [Masi et. al. 2002] Masi, S., De Bernardis, P., De Troia, G., Giacometti, M., Iacoangeli, A., Piacentini, F., ... & Romeo, G. (2002). The BOOMERanG experiment and the curvature of the universe. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 48(1), 243-261.
- [Huang 1987] Huang, K., *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Second Edition, 1987.
- [Tong 2018b] Tong David, *Lectures on Kinetic Theory*.
<https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/kintheory/two.pdf>
- [Jeong 2019a] Jeong Donghui, *Lecture Notes for Cosmology Course: Chapter 2 FRW (Friedmann-Robertson-Walker) Universe (Spring 2019)*.
<http://www.personal.psu.edu/duj13/ASTR0545/notes/ch2-FRWuniverse.pdf>
- [Dodelson 2003] Dodelson, S., *Modern Cosmology*, Academic Press, First Edition, 2003.
- [Jeong 2019b] Jeong Donghui, *Lecture Notes for Cosmology Course: Chapter 5 Out-Of-Equilibrium and Freeze-Out (Spring 2019)*.
<http://www.personal.psu.edu/duj13/ASTR0545/notes/ch5-Out-of-Equilibrium.pdf>

- [Mukhanov 2005] Mukhanov V., *Physical Foundations of Cosmology*, Cambridge University Press, First Edition, 2005.
- [Péguignot 1991] Péguignot, D., Petitjean, P., & Boisson, C. (1991). *Total and effective radiative recombination coefficients*. *Astronomy and Astrophysics*, 251, 680-688.
- [Weinberg 2008] Weinberg, S., *Cosmology*, Oxford university Press, First Edition, 2008.
- [Peebles 1993] Peebles, P.J.E., *Principles of Physical Cosmology*, Princeton University Press, First Edition, 1993.
- [Peebles 1968] Peebles, P. J. E. (1968). *Recombination of the Primeval Plasma*, *Astrophysical Journal*, 153, 1-11.
- [Seager & Saselov 1999] Seager, S., Saselov, D. D., & Scott, D. (1999). *A new calculation of the recombination epoch*. *The Astrophysical Journal Letters*, 523(1), L1.
- [Kholupenko et. al 2011] Kholupenko, E. E., Ivanchik, A. V., Balashev, S. A., & Varshalovich, D. A. (2011). *Advanced three-level approximation for numerical treatment of cosmological recombination*. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 417(4), 2417-2425.
- [Wong et. al. 2008] Wong, W. Y., Moss, A., & Scott, D. (2008). *How well do we understand cosmological recombination?*. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 386(2), 1023-1028.
- [Kolb & Turner 1989] Kolb E. W. & Turner M. S., *The Early Universe*, CRS Press, 2018.
- [Komatsu 2011] Komatsu Eiichiro, *Elements of Cosmology (Spring 2011)*
https://wwwmpa.mpa-garching.mpg.de/~komatsu/cmb/lecture_cosmo_iucaa_2011.pdf
- [HyRec Code 2012] HyRec Code, *Programed by Yacine Ali-Haimoud and Chris Hirata*, 2012 <https://pages.jh.edu/~yalihai1/hyrec/hyrec.html>
- [Ali-Haimoud & Hirata 2011] Ali-Haimoud, Y., & Hirata, C. M. (2011). *HyRec: A fast and highly accurate primordial hydrogen and helium recombination code*. *Physical Review D*, 83(4), 043513.
- [Schleicher et. al. 2008] Schleicher, D. R. G., Galli, D., Palla, F., Camenzind, M., Klessen, R. S., Bartelmann, M., & Glover, S. C. O. (2008). *Effects of primordial chemistry on the cosmic microwave background*. *Astronomy & Astrophysics*, 490(2), 521-535.
- [Savin et. al. 2004] Savin, D. W., Krstić, P. S., Haiman, Z., & Stancil, P. C. (2004). *Rate Coefficient for $H^+ + H_2(x^1 \Sigma_g^+, v+0, J=0) \rightarrow H(1s) + H_2^+$ Charge Transfer and Some Cosmological Implications*. *The Astrophysical Journal Letters*, 606(2), L167.

- [Galli & Palla 2002] Galli, D., & Palla, F. (2002). *Deuterium chemistry in the primordial gas*. Planetary and Space Science, 50(12-13), 1197-1204.
- [Galli & Palla 2013] Galli, D., & Palla, F. (2013). *The dawn of chemistry*. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 51, 163-206.
- [Sugimura et. al. 2016] Sugimura, K., Coppola, C. M., Omukai, K., Galli, D., & Palla, F. (2016). *Role of the H_2^+ channel in the primordial star formation under strong radiation field and the critical intensity for the supermassive star formation*. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 456(1), 270-277.
- [Bovino & Galla 2018] Bovino, S., & Galli, D. (2018). *Thermodynamics and chemistry of the early universe*. arXiv preprint arXiv:1807.05939.
- [Galli & Palla 1998] Galli, D., & Palla, F. (1998). *The chemistry of the early Universe*. arXiv preprint astro-ph/9803315.
- [Ade et. al. 2014] Ade, P. A., Aghanim, N., Armitage-Caplan, C., Arnaud, M., Ashdown, M., Atrio-Barandela, F., ... & Meinhold, P. R. (2014). *Planck 2013 results. XVI. Cosmological parameters*. Astronomy & Astrophysics, 571, A16.
- [Aghanim et.al. 2020] Aghanim, N., Akrami, Y., Ashdown, M., Aumont, J., Baccigalupi, C., Ballardini, M., ... & Roudier, G. (2020). *Planck 2018 results-VI. Cosmological parameters*. Astronomy & Astrophysics, 641, A6.
- [ESA Planck 2013] ESA-Planck Collaboration, *Planck history of Universe zoom*.
http://www.esa.int/ESA_Multimedia/Images/2013/03/Planck_history_of_Universe_zoom
- [ALMA 2018] ALMA 2018-2011 *ALMA imagery in the period 2018-2011*.
<https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/a/alma-2018-2011>
- [Peebles & Dicke 1968] Peebles, P. J. E., & Dicke, R. H. (1968). *Origin of the globular star clusters*. The Astrophysical Journal, 154, 891.
- [Northwestern 2021] Northwestern Now For Journalists. *Now Stunning simulation of stars being born is most realistic ever*.
<https://news.northwestern.edu/stories/2021/05/stunning-simulation-of-stars-being-born-is-most-realistic-ever/?&fj=1>
- [STARFORGE 2020] STARFORGE *Star Formation in Gaseous Environments*.
<http://starforge.space/index.html>