

Relative Atommassen

Stefan Pudritzki
Göttingen

8. September 2007

Berechnung der relativen Atommassen

Nach dem derzeitigen Kenntnisstand können die relativen Atommassen der chemischen Elemente mit einem relativen Fehler von ca. 10^{-2} berechnet werden. Ich möchte einen einfachen und etwas genaueren Rechenweg vorstellen, der ausschließlich die Kenntnis der Anzahl und der Massen der beteiligten Elektronen, Protonen und Neutronen und ansonsten keine zusätzlichen Parameter benötigt. Zur Erklärung meines Ansatzes für eine etwas genauere und wesentlich einfachere Berechnung als beispielsweise die Weizsäcker-Formel, möchte ich die dafür zugrundeliegende Anschauung über die Elementarteilchen kurz erläutern:

Elementarteilchen

Jedes der hier betrachteten Elementarteilchen (Elektron, Proton, Neutron) hat eine Ladungsdichteverteilung, die durch ein Skalarfeld $\varrho(\vec{r}, t)$ beschrieben werden kann. Gleichzeitig hat jedes Elementarteilchen eine Gesamtmasse mit einer Massendichteverteilung, die durch ein Skalarfeld $\mu(\vec{r}, t)$ beschrieben werden kann. Beide Skalarfelder erstrecken sich über den gesamten Raum (über das gesamte Universum) und sind an jedem Punkt \vec{r} nach jeder Koordinate x, y, z und nach der Zeitvariable t unendlich-oft differenzierbar. Es liegt also ein kontinuierliches Weltbild zugrunde, in dem es keine „Punktteilchen“ und keine von der Umwelt abgegrenzten Teilchen gibt. Alle Elementarteilchen zusammen bilden ein gesamtes Kontinuum.

Annahme

Die Bildung der Gesamtmasse einer Menge von Elementarteilchen aus den Einzelmassen ist eine lineare Operation. Desweiteren wird angenommen, dass elektrische Ladungen bzw. irgendwelche elektrischen Bindungsenergien keinen Beitrag zur Masse liefern.

Der Rechenweg

Wegen der vermuteten Linearität der Bildung der Gesamtmasse aus einzelnen Massen ist es erst einmal notwendig, die sog. atomare Masseneinheit u neu zu berechnen.

Es seien m_p , m_n und m_e die jeweiligen Einzelmassen eines Protons, eines Neutrons und eines Elektrons (s. „Teilchen und Kerne“ (Povh/Rith/Scholz/Zetsche), Anhang A.3, S.308, Springer-Verlag, 1994):

$$\begin{aligned}m_p &= 938.272\,31\,(28) \frac{\text{MeV}}{c^2} \\m_n &= 939.565\,63\,(28) \frac{\text{MeV}}{c^2} \\m_e &= 0.510\,999\,06(15) \frac{\text{MeV}}{c^2} \\u_{SI} &= 931.494\,32\,(28) \frac{\text{MeV}}{c^2} \quad (\text{wird nicht verwendet})\end{aligned}$$

Sei $M(X)$ der lineare Gesamtmassen-Operator für ein Teilchen X , der das Volumenintegral der Massendichteverteilung $\mu_X(\vec{r})$ des betrachteten Objektes X über den gesamten Raum (über das gesamte Universum) bildet:

$$M(X) := \left\{ \int d^3r \mu_X(\vec{r}) \right\}$$

Die atomare Masseneinheit wird wie üblich anhand des $^{12}_6\text{C}$ -Isotops definiert:

$$u := \frac{1}{12} M(^{12}_6\text{C})$$

Aus der angenommenen Linearität von M folgt:

$$u = \frac{1}{12} (6m_p + 6m_n + 6m_e) = \frac{1}{2} (m_p + m_n + m_e)$$

Die Massen der beteiligten Elektronen werden nicht vernachlässigt. Sind N_p , N_n und N_e die Anzahl der Protonen, der Neutronen und der Elektronen eines Atoms, so kann

wegen der Linearität von M zur Definition von u jedes Atom X der folgenden Form als Massennormal verwendet werden:

Es seien $N_p = N_n = N_e$:

$$\frac{1}{2N_p} M \left(\begin{smallmatrix} 2N_p \\ N_p \end{smallmatrix} X \right) = \frac{N_p m_p + N_p m_n + N_p m_e}{2N_p} = \frac{1}{2} (m_p + m_n + m_e) = u$$

Der konkrete Wert der Masse u ergibt sich nach dieser eigenen Berechnung zu:

$$u = 939.174\,47 \frac{\text{MeV}}{c^2}$$

Dieser neu berechnete Wert u und der Wert u_{SI} haben eine relative Abweichung von etwa $8 \cdot 10^{-3}$ zueinander. Das Verhältnis beider Werte ist

$$\frac{u_{SI}}{u} = 0.991\,822\,446$$

Im folgenden wird die selbst berechnete atomare Masseneinheit u und nicht u_{SI} verwendet. Die Masse m eines beliebigen Atoms, Isotops, Ions oder Moleküls wird wie folgt berechnet:

$$m = N_p m_p + N_n m_n + N_e m_e$$

Die relative Atommasse ergibt sich dann einfach durch das Verhältnis

$$A = \frac{m}{u} = 2 \frac{N_p m_p + N_n m_n + N_e m_e}{m_p + m_n + m_e}$$

In der Natur liegen meistens jedoch Gemische aus verschiedenen Isotopen eines chemischen Elementes vor. Um die relativen Atommassen der natürlichen Isotopengemische, wie sie in den chemischen Tabellen angegeben sind, zu berechnen, müssen die Gewichtungsfaktoren α_j für die relativen Häufigkeiten der in dem Gemisch vorkommenden Isotope X_j als Koeffizienten der relativen Atommassen A_j der reinen Isotope verwendet werden.

Wenn N die Zahl der vorkommenden Isotope eines Gemisches ist, dann ist $j = 1, \dots, N$ mit den Bedingungen:

$$0 \leq \alpha_j \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^N \alpha_j = 1$$

Die relative Atommasse des natürlichen Isotopengemisches ist

$$A_{\text{Mix}} = \sum_{j=1}^N \alpha_j A_j$$

Überprüfung anhand einiger Beispiele

Als Rechenbeispiele verwende ich die ersten 18 und ausgewählte chemischen Elemente, sowie 15 weitere, zufällig gewählte Elemente mit Ordnungszahlen von 19 bis 83 (für Elemente mit höheren Ordnungszahlen liegen meistens keine genügend genauen Angaben über die relative Atommasse vor). Als Berechnungsgrundlage dienen die Angaben der Isotopenverteilungen der Tabelle „Properties of Elements“ (Seiten 7-8 bis 7-12) aus dem „Handbook“ des American Institute of Physics. Die eigenen Berechnungen der relativen Atommassen der natürlichen Isotopen-Gemische werden mit den beobachteten Werten aus dieser Tabelle verglichen. Die übliche Bezeichnung der Ordnungszahl Z ist identisch mit der Anzahl der Protonen N_p . Die Anzahl der Neutronen ist die Differenz aus Nukleonenzahl A und Protonenzahl N_p : $N_n = A - Z$.

In der folgenden Tabelle bedeuten Z die Kernladungszahl (Protonenzahl), A die Nukleonenzahl und α die relative Häufigkeit eines Isotops, A_{obs} die beobachtete und A_{calc} die berechnete relative Atommasse des Isotopengemisches.

Die ersten 18 Elemente:

Z	Symbol	$A(\alpha)$	A_{obs}	A_{calc}	$\frac{A_{\text{calc}}}{A_{\text{obs}}}$
1	H	1(0.999 85), 2($1.46 \cdot 10^{-4}$)	1.007 97	0.999 73	0.991 825
2	He	4(1.00), 3($1.3 \cdot 10^{-6}$)	4.002 6	4.000 00	0.999 350
3	Li	7(0.924 8), 6(0.075 2)	6.939	6.925 18	0.998 008
4	Be	9(1.00)	9.0122	9.000 42	0.998 693
5	B	11(0.811 7), 10(0.188 3)	10.811	10.812 04	1.000 096
6	C	12(0.989), 13(0.011)	12.011 15	12.011 00	0.999 988
7	N	14(0.996 35), 15($3.65 \cdot 10^{-3}$)	14.006 7	14.003 65	0.999 782
8	O	16(0.997 6), 18($2.04 \cdot 10^{-3}$), 17($3.9 \cdot 10^{-4}$)	15.999 4	16.004 95	1.000 347
9	F	10(1.00)	18.998 4	19.000 42	1.000 106
10	Ne	20(0.909 2), 22(0.088 2), 21($2.57 \cdot 10^{-3}$)	20.183	20.178 44	0.999 774
11	Na	23(1.00)	22.989 8	23.000 42	1.000 462
12	Mg	24(0.786 0), 26(0.112 9), 25(0.101 1)	24.312	24.327 04	1.000 619
13	Al	27(1.00)	26.981 5	27.000 42	1.000 701
14	Si	28(0.922 8), 29(0.046 7), 30(0.030 5)	28.086	28.107 72	1.000 773
15	P	31(1.00)	30.973 8	31.000 42	1.000 859
16	S	32(0.950 18), 34(0.042 15), 33($7.4 \cdot 10^{-3}$), 36($1.6 \cdot 10^{-4}$)	32.064	32.088 86	1.000 775
17	Cl	35(0.754), 37(0.246)	35.453	35.492 62	1.001 118
18	A	40(0.996 0), 36($3.37 \cdot 10^{-3}$), 38($6.0 \cdot 10^{-4}$)	39.918	39.985 78	1.001 698

Ausgewählte Elemente:

Z	Symbol	$A(\alpha)$	A_{obs}	A_{calc}	$\frac{A_{\text{calc}}}{A_{\text{obs}}}$
26	Fe	56(0.916 4), 54(0.058 1), 57(0.022 1), 58($3.4 \cdot 10^{-3}$)	55.847	55.914	1.001 200
83	Bi	209(1.000)	208.980	209.017 91	1.000 181
92	U	238(0.992 8), 235($7.15 \cdot 10^{-3}$), 234($5.8 \cdot 10^{-5}$)	238.03	238.000 27	0.999 885

Zufällig ausgewählte Elemente:

Z	Symbol	$A(\alpha)$	A_{obs}	A_{calc}	$\frac{A_{\text{calc}}}{A_{\text{obs}}}$
23	V	51(0.997 6), 50($2.4 \cdot 10^{-3}$)	50.942	50.999 68	1.001 132
28	Ni	58(0.677 6), 60(0.261 6), 62(0.036 6), 61(0.012 5), 64(0.011 6)	58.71	58.772 06	1.001 057
33	As	75(1.00)	74.921 6	75.003 75	1.001 096
45	Rh	103(1.00)	102.905	103.005 41	1.000 978
48	Cd	114(0.288 6), 112(0.240 7), 111(0.127 5), 110(0.123 9), 113(0.122 6), 116(0.075 8), 106(0.00121 5), 108($8.75 \cdot 10^{-3}$)	112.40	112.526 68	1.001 127
51	Sb	121(0.572 5), 123(0.427 5)	121.75	121.863 27	1.000 930
52	Te	130(0.344 6), 128(0.317 2), 126(0.187 2), 125(0.070 1), 124(0.046 3), 122(0.024 9)	127.60	127.742 08	1.001 113
56	Ba	123($8.9 \cdot 10^{-3}$), 120($9.1 \cdot 10^{-4}$) 138(0.716 6), 137(0.113 2), 136(0.078 1), 135(0.065 9), 134(0.024 2), 130($1.01 \cdot 10^{-3}$), 132($9.7 \cdot 10^{-4}$)	137.34	137.430 03	1.000 656
63	Eu	153(0.522 3), 151(0.477 7)	151.96	152.055 45	1.000 628
64	Gd	158(0.247 8), 160(0.217 9), 156(0.205 9), 157(0.157 1), 155(0.147 8), 154(0.021 5), 152($2.0 \cdot 10^{-3}$)	157.25	157.337 71	1.000 558
65	Tb	159(1.00)	158.924	159.012 08	1.000 554
69	Tm	169(1.00)	168.934	169.012 91	1.000 467
70	Yb	174(0.318 4), 172(0.218 2), 173(0.161 3), 171(0.142 6), 176(0.127 3), 170(0.030 3), 168($1.4 \cdot 10^{-3}$)	173.04	173.026 28	0.999 921
78	Pt	195(0.337), 194(0.328), 196(0.254), 198(0.072 3), 192($7.8 \cdot 10^{-3}$), 190($1.2 \cdot 10^{-4}$)	195.09	194.983 08	0.999 452
81	Tl	205(0.705), 203(0.295)	204.37	204.427 66	1.000 282

Elementarteilchen

Aus dem Buch „Kernmaterie“ von Gernod Eder (Spektrum Akademischer Verlag, 1995), S. 31, sind die in der folgenden Tabelle aufgeführten Werte für die (beobachteten) relativen Massen A_{obs} von Elementarteilchen entnommen. Sie werden wieder den selbst berechneten Werten A_{calc} gegenübergestellt und miteinander verglichen:

Name	Symbol	A_{obs}	A_{calc}	$\frac{A_{calc}}{A_{obs}}$
Elektron	e	$5.485\,799\,0 \cdot 10^{-4}$	$5.440\,938\,58 \cdot 10^{-4}$	0.991 822
Proton	p	1.007 276 470	0.999 039 41	0.991 822
Neutron	n	1.008 664 904	1.000 416 49	0.991 822
Deuteron	d	2.013 553 21(2)	1.999 455 91	0.992 999
Helion	h	3.014 932 23(4)	2.998 495 32	0.994 548
Triton	t	3.015 500 70(4)	2.999 872 40	0.994 817
Alphateilchen	α	4.001 506 16(5)	3.998 911 81	0.999 352

Nuklide

Auf derselben Seite und auf S. 115 sind die relativen Massen einiger Nuklide aufgeführt. Die folgende Tabelle zeigt wieder den Vergleich mit den eigenen Berechnungen:

A	Z	A_{obs}	A_{calc}	$\frac{A_{calc}}{A_{obs}}$
1	1	1.007 825 035	0.999 583 522	0.991 822
2	1	2.014 101 78(2)	2	0.992 998
3	2	3.016 029 31(4)	2.999 583 522	0.994 547
3	1	3.016 049 27(4)	3.000 416 478	0.994 817
4	2	4.002 603 24(5)	4	0.999 350
12	6	12	12	1
16	8	15.990 53	16	1.000 592
17	9	16.991 61	16.999 583 52	1.000 469
60	28	59.933 820(2)	60.001 665 91	1.001 132
62	28	61.913 03	62.002 498 87	1.001 445
63	29	62.913 74	63.002 082 39	1.001 404
66	28	65.913 80	66.004 164 78	1.001 371
67	29	66.911 88	67.003 748 30	1.001 373
102	40	101.922 96(43)	102.009 162 5	1.000 846
122	50	121.876 19	122.009 162 5	1.001 089
123	51	122.876 42	123.008 746 0	1.001 079
126	50	125.880 40	126.010 828 4	1.001 036
127	51	126.879 13	127.010 412 0	1.001 035
134	52	133.911 52(12)	134.012 494 3	1.000 754
206	82	205.930 03	206.017 492 1	1.000 425
207	83	206.933 51	207.017 075 6	1.000 404
212	82	211.947 46	212.019 990 9	1.000 342
213	83	212.949 42	213.019 574 5	1.000 329
236	92	236.045 563(2)	236.021 656 8	0.999 899

Die Tabellen zeigen, dass offenbar der relative Fehler für die eigenen Berechnungen für Teilchen mit mindestens zwei Protonen und zwei Neutronen nur maximal $2 \cdot 10^{-3}$ beträgt; für leichtere Teilchen steigt der relative Fehler auf bis zu $8 \cdot 10^{-3}$ an. Dieser maximale relative Fehler entspricht auch dem relativen Unterschied zwischen der SI-Definition u_{SI} und der Neudefinition u für die atomare Masseneinheit. Besonders auffällig ist, dass bei den Elementarteilchen Elektron, Proton und Neutron das Verhältnis aus berechneter und beobachteter relativer Atommasse nach eigener Rechnung möglicherweise exakt dem Verhältnis $\frac{u_{SI}}{u}$ der unterschiedlichen Definitionen der atomaren Masseneinheit entspricht.