ATOM2009

Az alábbiakban megadom a semleges atomtömegek számítására egy meglepően pontos képletet. Az új tömegképlet egy korábbi hasonló tömegképlet továbbfejlesztése, amely ezrelékes pontossággal adja meg az atomok tömegeit. Minden atomhoz négy „kvantumszám” rendelhető, ezek közül kettő ismert: a Z protonszám, illetve az A tömegszám:

$$Z,\ A,\ S_1,\ S_2 \qquad (1.1)$$
$$S_1, S_2 = 0,\ 1/2,\ 2/2,\ 3/2,...9/2$$

A tömegképlet a következő:

$$\boxed{\begin{array}{c} M(A,Z) \cong \lambda\left[A - \frac{Q^5}{2}\times\frac{G(A,S_1,S_2)}{(1+Q)^F - 1} + Q^3\left(\frac{A-2Z}{QA+1}\right)^2\right] \\ F = \sqrt{A-1};\ \ A \geq 2;\ Q \cong 2/9 \end{array}} \qquad (1.2)$$

ahol:

$$\boxed{\begin{array}{c} G(A,S_1,S_2) = (A+\alpha-S_1)^2 - (S_2+\alpha)^2 \\ S_1,\ S_2\ =\ 0,\ \ 1/2,\ \ 2/2,\ \ 3/2,\ \ 4/2,\ \ldots 9/2 \\ \alpha \cong 3Q^4 \cong 1/137\ (\textit{finomszerkezeti állandó}) \end{array}} \qquad (1.3)$$

A képlet *A > 2* tömegszámú semleges atomok tömegét számolja, tehát kimaradt a hidrogénatom. Az *A = 1* tömegszámhoz azonban nemcsak a semleges hidrogénatom, de a semleges neutron is hozzátartozik. Az *A = 1* tömegszámhoz tartozó két semleges „atom” tömegét az általánosból következő egyszerűbb képlettel tudjuk meghatározni:

$$\boxed{M(1) \cong \lambda\left[1 - \frac{Q^5}{2}\times G(A,S_1,S_2) + \frac{Q^3}{(1+Q)^2}\right];\ \ Q \cong 2/9} \qquad (1.4)$$

A hidrogénatom, illetve neutron tömege az S „kvantumszámokban” különbözik.

A képleteket közel 2000 kísérleti atomtömegekre (izotópra) illesztettem, atomi tömegegységekben. Az atomi tömegegységekben a szén 12-es atomszámú izotópja pontosan 12 (a.u.) atomi tömegegység. A képletek elvileg alkalmasak a magok gerjesztési állapotainak számítására is. Az illesztés eredménye:

$$\boxed{\begin{array}{c} \lambda = 1.003226916129157\ a.u. \\ Q = 0.2218988366357437 \end{array}} \qquad (1.5)$$

A relatív hiba számításának konvencionális módja a magfizikában:

$$\delta(A,Z)=\frac{M_{számított}-M_{kisérlet}}{Z\times M_H+\left(A-2Z\right)\times M_n-M_{kisérlet}}$$
$$M_H=a\ hidrogén\ atom\ tömege \tag{1.6}$$
$$M_n=a\ neutron\ tömege$$

A hidrogénatom, illetve a neutron tömegszámítás relatív hibája:

$$\delta=\frac{M_{számított}-M_{kisérlet}}{M_{kisérlet}} \tag{1.7}$$

amely szerint:

$$\begin{aligned} &M\text{ - }Hidrogen:\ S_1 = 9/2;\ S_2 = 3/2;\quad \text{Rel.hiba}:\ 7.23\times10^{-5}\\ &M\text{ - }Neutron:\ S_1 = 8/2;\ S_2 = 3/2;\quad \text{Rel. hiba}:\ 1.07\times10^{-4} \end{aligned} \tag{1.8}$$

A tömegképletek pontosságát a relatív hibák szórása jellemzi:

$$\sigma=\sqrt{\frac{\sum\delta^2(A,Z)}{n+1}};\quad \left(n=atomok\ szama\cong2000\right) \tag{1.9}$$

Az elvégzett illesztések szórása kiemelkedően jó:

$$\sigma = 1.7300\ldots x10^{-3} \tag{1.10}$$

Ez azt jelenti, hogy az atommagok kötési energiáit ezrelék pontosan tudjuk számolni!
A tömegképletek sokéves elméleti munka során születtek, lépésenként egyre javulva. Döbbenetes, hogy a tömegképlet az egységrendszertől függő lambda arányossági tényezőn kívül mindössze egyetlen illesztési paramétert tartalmaz, a Q dimenziótlan számot.
A képletek megtalálásában óriási segítséget jelentett a mai modern személyi számítógépek gyorsasága és pontossága.

Az elméleti háttér a következő dolgozatomban található:

http://www.geocities.com/fhunman/radatom.pdf

A kvantummechanikai számítások jövőbeli feladata az S kvantumszámok értelmezése, illetve elméleti meghatározása egyedi atomokra. Az atomok (atommagok) egyedi tulajdonságait értelemszerűen az S kvantumszámok egyértelműen determinálják.

2009. március 27.

Sarkadi Dezső