

Berechnung des Astatvorkommens auf der Erde

Hintergrund dieser kleinen Arbeit ist die fehlende Eindeutigkeit der in Literatur und Internet vorhandenen Zahlenwerte bezüglich des irdischen Astatvorkommens. Nimmt man die unterschiedlichen Angaben zur Grundlage von Berechnungen der Verbreitung des Astat, so werden dabei Werte erhalten, die aufgrund ihrer breiten Streuung als unzuverlässig angesehen werden müssen.

Beispiele:

Quelle	Angabe
http://en.wikipedia.org/wiki/Astatine [Zitierte Quelle: Close, Frank E. (2004). Particle Physics: A Very Short Introduction. Oxford University Press. p. 2. ISBN 978-0-19-280434-1]	“(Natural occurrence) Astatine is the rarest naturally occurring element that is not a transuranic element, with the total amount in Earth's crust estimated to be less than 28 grams (1 oz) at any given time. [...]”
Holleman-Wiberg, Lehrbuch der Anorganischen Chemie, 102. Auflage	“Da die natürlichen Nuklide mit Massenzahlen 215-219 nur in geringsten Spuren ($3 \cdot 10^{-24}$ Gew. %) als Zwischenglieder der radioaktiven Zerfallsreihen vorkommen [...]“
http://www.wissen.de/thema/astat	„Die Isotope ^{215}At und $^{217-219}\text{At}$ kommen in sehr geringen Spuren in Uran- und Thorium-Mineralien vor. Insgesamt soll es auf der Lithosphäre 70 mg At geben. [...]“

Astat ist zweifelsohne das seltenste Element, welches auf der Erde noch natürlich vorkommt mit einer Ordnungszahl von weniger als 94. Es entsteht dabei im Zuge der Uran-Actinium-Zerfallsreihe (ausgehend von U-235) und der Uran-Radium-Zerfallsreihe (ausgehend von U-238) mit insgesamt drei Isotopen als Zwischenprodukt.

Im Folgenden sei die tatsächliche Häufigkeit des Elements berechnet, wobei die in der Literatur/Internet vorhandenen Zahlenwerten für die Häufigkeit des Urans (Erde gesamt, Erdkruste, Erdhülle, Weltmeere), die Zerfallswahrscheinlichkeiten über den Weg der Astat-Isotope, sowie die Halbwertszeiten von Uran/Astat bzw. geologische Angaben bezüglich der Masse der Erde und des Volumens der Weltmeere als Grundlage der Berechnung dienen.

René Rausch
Idstein, im November 2012

1. Zerfallswahrscheinlichkeiten:

At-215 und At-219:

Sie sind Zwischenprodukte beim Zerfall des U-235, wobei sie jeweils auf einem „Seitenast“ der Zerfallsreihe liegen: [1]

Nuklid	Zerfall	Zerfallsprodukt	HWZ	lg HWZ (s)*
²³⁵ U	α	²³¹ Th	7,038·10 ⁸ a	16.3467
²³¹ Th	β ⁻ α 0,000001 %	²³¹ Pa ²²⁷ Ra	25,52 h	
²³¹ Pa	α	²²⁷ Ac	32760 a	
²²⁷ Ra	β ⁻	²²⁷ Ac	42,2 min	
²²⁷ Ac	β ⁻ 98,62 % α 1,38 %	²²⁷ Th ²²³ Fr	21,773 a	
²²⁷ Th	α	²²³ Ra	18,72 d	
²²³ Fr	β ⁻ 99,994 % α 0,006 %	²²³ Ra ²¹⁹ At	22,0 min	
²²³ Ra	α	²¹⁹ Rn	11,435 d	
²¹⁹ At	α 97 % β ⁻ 3 %	²¹⁵ Bi ²¹⁹ Rn	56 s	1.7482
²¹⁹ Rn	α	²¹⁵ Po	3,96 s	
²¹⁵ Bi	β ⁻	²¹⁵ Po	7,6 min	
²¹⁵ Po	α β ⁻ 0,000023 %	²¹¹ Pb ²¹⁵ At	1,781 ms	
²¹⁵ At	α	²¹¹ Bi	0,10 ms	-4

*lg HWZ (s) = dekadischer Logarithmus der Halbwertszeit in Sekunden

Gesamtwahrscheinlichkeit für die Entstehung von At-219 aus U-235:

$$\begin{aligned} \lambda(\text{Gesamt}) &= \lambda(\text{Entstehung } ^{223}\text{Fr}) * \lambda(\text{Entstehung } ^{219}\text{At}) \\ \lambda &= 1,38\% * 0,006 \\ \lambda &= 0,0138 * 0,00006 \\ \lambda &= 0,000000828 \\ \lg \lambda &= -6,082 \end{aligned}$$

Gesamtwahrscheinlichkeit für die Entstehung von At-215 aus U-235:

$$\begin{aligned} \lambda(\text{Gesamt}) &= \lambda(\text{Entstehung } ^{215}\text{At}) \\ \lambda &= 0,000023\% \\ \lambda &= 0,00000023 \\ \lg \lambda &= -6,638 \end{aligned}$$

At-218:

Dieses Nuklid entsteht als Zwischenprodukt innerhalb der Uran-Radium-Zerfallsreihe.

Nuklid	Zerfall	Zerfallsprodukt	HWZ	lg HWZ (s)*	
^{238}U	α	^{234}Th	$4,468 \cdot 10^9 \text{ a}$	17.1492	
^{234}Th	β^-	$^{234\text{m}}\text{Pa}$	24,10 d		
$^{234\text{m}}\text{Pa}$	β^- 99,84 % IT 0,16 %	^{234}U ^{234}Pa	1,17 min		
^{234}Pa	β^-	^{234}U	6,7 h		
^{234}U	α	^{230}Th	245500 a		
^{230}Th	α	^{226}Ra	75380 a		
^{226}Ra	α	^{222}Rn	1602 a		
^{222}Rn	α	^{218}Po	3,8235 d		
^{218}Po	α 99,98 % β^- 0,02 %	^{214}Pb ^{218}At	3,05 min		
^{218}At	α 99,90 % β^- 0,10 %	^{214}Bi ^{218}Rn	1,5 s		0.1761

*lg HWZ (s) = dekadischer Logarithmus der Halbwertszeit in Sekunden

Gesamtwahrscheinlichkeit für die Entstehung von At-218 aus U-238:

$$\begin{aligned} \lambda(\text{Gesamt}) &= \lambda(\text{Entstehung } ^{218}\text{Po}) \\ \lambda &= 0,02\% \\ \lambda &= 0,0002 \\ \lg \lambda &= -3,699 \end{aligned}$$

2. Das radioaktive Gleichgewicht:

Ist die Halbwertszeit des Mutternuklids (Hier: Uran-238 und Uran-235) wesentlich länger als die des Tochternuklids (hier die drei Astat-Isotope), so nähern sich ihre Aktivitäten den Verhältnissen der Halbwertszeiten an: Es entstehen ab einem bestimmten Zeitpunkt genauso viele Atome des Tochternuklids wie gerade zerfallen.

Dabei muss allerdings noch berücksichtigt werden, dass in keinem der Fälle aus jedem Uranatom irgendwann als Zwischenprodukt ein Astat-Atom wird, sondern dies nur zu den oben errechneten Wahrscheinlichkeiten passiert.

Es gilt also:

$$\frac{n(\text{Tochternuklid maximal})}{n(\text{Startnuklid})} = \frac{T_{1/2}(\text{Tochternuklid})}{T_{1/2}(\text{Startnuklid})}$$

und

$$n(\text{Tochternuklid gesamt}) = n(\text{Tochternuklid maximal}) * \lambda$$

Es ergibt sich daraus:

$$n(\text{Tochternuklid gesamt}) = \frac{T_{1/2}(\text{Tochternuklid}) * n(\text{Startnuklid})}{T_{1/2}(\text{Startnuklid})} * \lambda$$

Aufgrund der Dimensionen der Zahlenwerte wird eine logarithmische Formel vorgezogen:

$$\lg n(\text{TN}) = \lg T_{1/2}(\text{TN}) + \lg n(\text{SN}) + \lg \lambda - \lg T_{1/2}(\text{SN})$$

bzw.

$$n(\text{TN}) = 10^{(\lg T_{1/2}(\text{TN}) + \lg n(\text{SN}) + \lg \lambda - \lg T_{1/2}(\text{SN}))}$$

3. Relative und absolute Häufigkeiten der Mutternuklide:

Für die Verbreitung von Uran finden sich in der Literatur bzw. Internetquellen folgende Werte:

Urangehalt der Erde gesamt:	0,014 mg/kg	$5,88 \cdot 10^{-8}$ mol/kg	[2]
Urangehalt in der Erdkruste:	2,7 mg/kg	$1,13 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	[3]
Urangehalt in der Erdhülle*:	3,2 mg/kg	$1,34 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	[4]
Urangehalt im Meerwasser:	0,0032 mg/L	$1,34 \cdot 10^{-8}$ mol/L	[4]

Uran mit natürlicher Isotopenzusammensetzung besteht

zu	100,00%	aus Uran	$M = 238,028$ g/mol	[5]
zu	99,2742%	aus ^{238}U	$M = 238,051$ g/mol	[5]
zu	0,7204%	aus ^{235}U	$M = 235,044$ g/mol	[5]

1 kg (4,201 mol) Uran bestehen also aus

992,742 g	(4,170 mol)	^{238}U	Molverhältnis: 99,262%
7,204 g	(0,0306 mol)	^{235}U	Molverhältnis: 7,28%

Die Masse der Erde wird mit $5,98 \cdot 10^{24}$ kg angegeben [6].
Somit ergeben sich folgende Gesamtmengen von

$$\begin{aligned} m(\text{Uran}) \text{ in kg} &= m(\text{Erde}) \text{ in kg} \cdot \beta(\text{Uran}) \text{ in mg/kg} \cdot 10^{-6} \text{ kg/mg} \\ m(\text{Uran}) \text{ in kg} &= 5,98 \cdot 10^{24} \text{ kg} \cdot 0,014 \text{ mg/kg} \cdot 10^{-6} \text{ kg/mg} \end{aligned}$$

Somit ergeben sich folgende Konzentrationen der einzelnen Uran-Isotope:

Erde gesamt:		β	c	lg c
U	100%	0,014 mg/kg	$5,88 \cdot 10^{-8}$ mol/kg	
^{238}U	99,2742%	0,0139 mg/kg	$5,84 \cdot 10^{-8}$ mol/kg	-7,234
^{235}U	0,7204%	0,0001 mg/kg	$4,25 \cdot 10^{-10}$ mol/kg	-9,367
Erdkruste:		β	c	lg c
U	100%	2,7 mg/kg	$1,13 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	
^{238}U	99,2742%	2,680 mg/kg	$1,12 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	-4,949
^{235}U	0,7204%	0,020 mg/kg	$8,51 \cdot 10^{-8}$ mol/kg	-7,070
Erdhülle:		β	c	lg c
U	100%	3,2 mg/kg	$1,34 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	
^{238}U	99,2742%	3,177 mg/kg	$1,33 \cdot 10^{-5}$ mol/kg	-4,875
^{235}U	0,7204%	0,023 mg/kg	$9,81 \cdot 10^{-8}$ mol/kg	-7,008
Meerwasser:		β	c	lg c
U	100%	3,2 $\mu\text{g/L}$	$1,34 \cdot 10^{-8}$ mol/L	
^{238}U	99,2742%	3,177 $\mu\text{g/L}$	$1,33 \cdot 10^{-8}$ mol/L	-7,875
^{235}U	0,7204%	0,023 $\mu\text{g/L}$	$9,81 \cdot 10^{-11}$ mol/L	-10,008
Erde absolut:		m	n	lg n
U	100%	$8,364 \cdot 10^{16}$ kg	$3,514 \cdot 10^{17}$ mol	17,546
^{238}U	99,2742%	$8,303 \cdot 10^{16}$ kg	$3,488 \cdot 10^{17}$ mol	17,543
^{235}U	0,7204%	$6,025 \cdot 10^{14}$ kg	$2,564 \cdot 10^{15}$ mol	15,409

4. Berechnung der irdischen Gesamtmenge von Astat:

$$\begin{aligned}
 M(^{215}\text{At}) &= 214,999 \text{ g/mol} \quad (= 215 - (1,2554/931,49 \text{ MeV/u}) & [7] \\
 M(^{218}\text{At}) &= 218,009 \text{ g/mol} \quad (= 218 + (8,0979/931,49 \text{ MeV/u}) & [7] \\
 M(^{219}\text{At}) &= 219,011 \text{ g/mol} \quad (= 219 + (10,3973/931,49 \text{ MeV/u}) & [7]
 \end{aligned}$$

Für At-215 ergibt sich aus den Zahlenwerten:

Erde gesamt:

$$\begin{aligned}
 \lg n(^{215}\text{At}) &= \lg T_{1/2}(^{215}\text{At}) + \lg n(^{235}\text{U}) + \lg \lambda - \lg T_{1/2}(^{235}\text{U}) \\
 &= -4 + 15,409 - 6,638 - 16,3467 \\
 &= -11,5757 \\
 n(^{215}\text{At}) &= 2,656 \cdot 10^{-12} \text{ mol} \\
 m(^{215}\text{At}) &= 5,710 \cdot 10^{-10} \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \lg n(^{218}\text{At}) &= \lg T_{1/2}(^{218}\text{At}) + \lg n(^{238}\text{U}) + \lg \lambda - \lg T_{1/2}(^{238}\text{U}) \\
 &= 0,1761 + 17,543 - 3,699 - 17,1492 \\
 &= -3,1291 \\
 n(^{218}\text{At}) &= 7,428 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \\
 m(^{218}\text{At}) &= 0,162 \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \lg n(^{219}\text{At}) &= \lg T_{1/2}(^{219}\text{At}) + \lg n(^{235}\text{U}) + \lg \lambda - \lg T_{1/2}(^{235}\text{U}) \\
 &= 1,7482 + 15,409 - 6,082 - 16,3467 \\
 &= -5,2715 \\
 n(^{219}\text{At}) &= 5,352 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \\
 m(^{219}\text{At}) &= 1,17 \cdot 10^{-3} \text{ g}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m(\text{Astat}) &= m(^{215}\text{At}) + m(^{218}\text{At}) + m(^{219}\text{At}) \\
 \mathbf{m(\text{Astat})} &= \mathbf{\underline{\underline{0,1632 \text{ g}}}}
 \end{aligned}$$

5. Berechnung einer natürlichen Isotopenzusammensetzung / mittleres Atomgewicht:

$$\begin{aligned}
 \omega(\text{Astat}) &= 0,1632 \text{ g} = 100\% \\
 \omega(^{218}\text{At}) &= 0,162 \text{ g} = 99,3\% \\
 \omega(^{219}\text{At}) &= 1,17 \cdot 10^{-3} \text{ g} = 0,7\% \\
 \omega(^{215}\text{At}) &= 5,71 \cdot 10^{-10} \text{ g} = 3,5 \cdot 10^{-7} \%
 \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich folgende mittlere Atommasse für Astat:

$$M(\text{At}) = (0,993 \cdot 218,009) + (0,007 \cdot 219,011) = \mathbf{\underline{\underline{218,016 \text{ g/mol}}}}$$

6. Berechnung der relativen Astat-Verteilung auf der Erde:

$$\begin{aligned} m(\text{Astat}) &= 0,1632 \text{ g} \\ m(\text{Uran}) &= 8,364 \cdot 10^{16} \text{ kg} \\ \text{Verhältnis} &= 1 \text{ Teil Uran} : (0,1632 \text{ g} / 8,364 \cdot 10^{19} \text{ g}) = 1,951 \cdot 10^{-21} \text{ Teilen Astat} \end{aligned}$$

	Uran	β(Astat)	u(Astat)
Erde gesamt:	0,014 mg/kg	$2,73 \cdot 10^{-26}$ g/kg	1 Atom / 13,3 t
Erdkruste:	2,7 mg/kg	$5,27 \cdot 10^{-24}$ g/kg	1 Atom / 68,7 kg
Erdhülle:	3,2 mg/kg	$6,24 \cdot 10^{-24}$ g/kg	1 Atom / 58,0 kg
Meerwasser:	3,2 μ g/L	$6,24 \cdot 10^{-27}$ g/L	1 Atom / 58.020 L

Bei einem angenommenen Volumen aller Weltmeere von $1,338 \cdot 10^9 \text{ km}^3$ ($= 1,338 \cdot 10^{18} \text{ L}$) sind im Meer insgesamt $2,31 \cdot 10^{13}$ Atome Astat gelöst ($= 3,83 \cdot 10^{-11} \text{ mol} \rightarrow 8,35 \cdot 10^{-9} \text{ g}$ absolut) [8]

Quellenverzeichnis:

- [1] Beide Tabellen und die darin enthaltenen Werte stammen aus der Wikipedia (Uran-Radium-Zerfallsreihe: <http://de.wikipedia.org/wiki/Uran-Radium-Reihe>; Uran-Actinium-Zerfallsreihe: <http://de.wikipedia.org/wiki/Uran-Actinium-Reihe>). Die Halbwertszeiten und Zerfallswahrscheinlichkeiten wurden zusätzlich auf <http://www.nndc.bnl.gov> auf ihre Richtigkeit geprüft.
- [2] Claude Allègre, Gérard Manhès, Éric Lewin: Chemical composition of the Earth and the volatility control on planetary genetics. In: Earth and Planetary Science Letters, 2001, 185, 49-69
- [3] Harry H. Binder: Lexikon der chemischen Elemente, S. Hirzel Verlag 1999, ISBN 3-7776-0736-3
- [4] David R. Lide (ed.): CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85. Auflage, CRC Press, Boca Raton, Florida, 2005. Section 14, Geophysics, Astronomy, and Acoustics; Abundance of Elements in the Earth's Crust and in the Sea.
- [5] Holleman-Wiberg. Lehrbuch der anorganischen Chemie, 102. Auflage. Anhang III, natürliche Nuklide (mit Häufigkeitsverteilung und genauem Atomgewicht). ISBN: 978-3-11-017770-1
- [6] Holleman-Wiberg. Lehrbuch der anorganischen Chemie, 102. Auflage. S. 79.
- [7] Recherche auf <http://www.nndc.bnl.gov>.
- [8] Wikipedia: <http://de.wikipedia.org/wiki/Meer>.