

Úloha II.P ... ó Oganesson

10 bodů; průměr 5,26; řešilo 57 studentů

Jaké vlastnosti má 118. prvek periodické soustavy prvků? Respektive jaké by asi měl, kdyby byl stabilní? Diskutujte alespoň tři fyzikální vlastnosti. Karel chtěl zadat něco na extrapolaci.

Úvod, radioaktivita, elektronová konfigurace a reaktivita Og

Přestože Wikipedie není nezpochybnitelným zdrojem informací, ohledně základních informací o 118. prvku pro nás bude tato encyklopedie dostatečná.^{1,2} Prvek s protonovým číslem 118 již byl oficiálně objeven. Nicméně i tak se o něm mnoho neví, protože jeho objev byl potvrzen v roce 2015 na základě potvrzených a naměřených rozpadů tří (možná čtyř) atomů tohoto prvku z roku 2006. V roce 2016 pak bylo vybráno jméno pro tento prvek – oganesson – se značkou Og. Je pojmenován po ruském jaderném vědci Juriji Colakovičovi Oganesanovi. Vzhledem k tomu, že tento prvek patří do posledního sloupce tabulky, mělo by se jednat o vzácný plyn. Minimálně vzácný opravdu je. O tom, jestli by to byl plyn, se budeme bavit dále.

Naměřený izotop měl 294 nukleonů. Pokud bychom se zajímali o různé další odhady toho, jaké prvky by mohly být stabilní a jaká jejich nukleonová čísla by mohla být vhodná, pak bychom teoreticky mohli čekat, že by mohly být takto těžké prvky stabilnější, pokud by měly vyšší počet neutronů; existují ale modely, dle kterých je nejstabilnější izotop oganessonu skutečně ten s 294 nukleony. Tyto izotopy se zatím nějak nepodařilo naměřit, takže jde zatím pouze o nepotvrzenou teorii. Nicméně hned atomová hmotnost by mohla být zajímavou fyzikální vlastností k prozkoumání.

Ještě hned na úvod můžeme uvést, že když daný prvek patří do VIII.A skupiny, tak bychom očekávali, že bude mít zaplněnou valenční elektronovou slupku a jeho elektronová konfigurace by měla být $5f^{14} 6d^{10} 7s^2 7p^6$. Tím pádem by měl být obecně málo reaktivní, i když na druhou stranu by měl být pravděpodobně nejméně reaktivní z celé skupiny. To plyne z toho, že čím dále jsou elektrony od jádra, tím slaběji jsou vázány, a tak mohou těžší prvky VIII.A skupiny snadněji vstupovat do reakcí. Taky bude nejsnazší jej ionizovat.

Snadno také můžeme tipovat, že bude radioaktivní, a to ve všech izotopech. Prvek s nejvyšším protonovým číslem, který má stabilní izotop, je olovo s protonovým číslem 82. Ještě bismut³ je hodně stabilní se svým izotopem 209, ve kterém se vyskytuje v přírodě a jehož poločas rozpadu je delší než stávající stáří vesmíru.

Pro naše extrapolace budeme využívat program Wolfram Mathematica 11.0.1.0 a údaje o prvcích budeme získávat přímo z knihovny ElementData.⁴ Tato knihovna obsahuje hodnoty známých veličin pro jednotlivé prvky a je tedy praktické, že přímo v programu, ve kterém

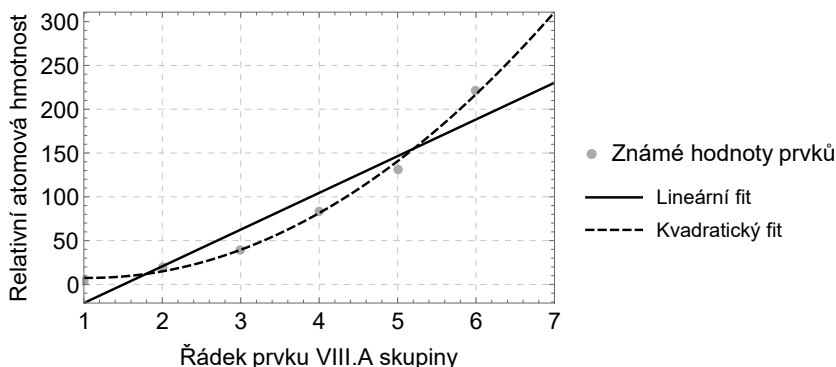
¹ *Wikipedie: Otevřená encyklopedie: Oganesson* [online]. c2017 [citováno 16. 10. 2017]. Dostupný z WWW: <<https://cs.wikipedia.org/w/index.php?title=Oganesson&oldid=14661315>>

² *Wikipedie, The Free Encyclopedia: Oganesson* [online]. c2017 [citováno 16. 10. 2017]. Dostupný z WWW: <<https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Oganesson&oldid=805672099>>

³ *Wikipedie: Otevřená encyklopedie: Bismut* [online]. c2017 [citováno 18. 10. 2017]. Dostupný z WWW: <<https://cs.wikipedia.org/w/index.php?title=Bismut&oldid=15391054>>

⁴ ElementData Source Information: ElementData is based on a wide range of sources, with enhancement at the Wolfram Research Companies by both human and algorithmic processing. Among principal sources for ElementData are:

- Atomic Mass Data Center. *NUBASE*. 2003.
- Barbalace, K. *Periodic Table of Elements*. 2007.
- Cardarelli, F. *Materials Handbook: A Concise Desktop Reference*. Springer, 2000.
- Lide, D. R. (Ed.). *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 87th ed. CRC Press, 2006.
- Speight, J. *Lange's Handbook of Chemistry*. McGraw-Hill, 2004.
- United Kingdom National Physical Laboratory. *Kaye and Laby Tables of Physical and Chemical Constants*. 2007.



Obr. 1: Extrapolace relativní atomové hmotnosti Og – dle periody

probíhají extrapolace, můžeme snadno tyto údaje využít. Účastníci samozřejmě mohli využít jiné vhodně dostupné zdroje. Program Wolfram Mathematica je sice pro běžného středoškolačka drahý, ale je možné, alespoň částečně, využívat jeho funkčnosti v rámci webu WolframAlpha.⁵ Bohužel je u něj omezení na výpočetní složitost, takže při jeho využití pravděpodobně musíte údaje o prvcích nalézt jinde a také vám asi nepůjde snadno naformátovat nějaký graf. Nebo lze využít zcela jiné programy či získat údaje o prvcích a ty až následně zpracovat například v Excelu nebo jiném tabulkovém procesoru.

Pro ověřitelnost a opakovatelnost výsledků přikládáme odkazy na soubory, ve kterých jsou použité příkazy,⁶ a to jak ve formátu nb, tak cdf, který se dá případně alespoň zdarma zobrazit pomocí Wolfram CDF Player. Nicméně zde nejsou žádné interaktivní prvky (Manipulate), takže jde pak pouze o statické grafy.

Pro různé fyzikální vlastnosti bude různě účelné vycházet z hodnot buď na základě přímo protonového čísla nebo periody (čísla řádku), ve které daný prvek vyskytuje. Logicky pokud se budeme zajímat o atomovou hmotnost, tak bude spíše rozhodující protonové číslo. Pokud se ale zajímáme o nějaké chemické či fyzikálně chemické vlastnosti, tak se stává potenciálně zajímavější číslo periody, ve které se daný prvek nalézá. My budeme provádět pouze jednoduché odhady vlastností prvku 118 na základě známých fyzikálních vlastností jiných prvků, a to jednoduchou extrapolací, tedy proložením rozumnou funkcí. Nebudeme tedy uvažovat nějaké složitější fyzikální modely na vysokoškolské úrovni, spíše se budeme snažit prokládat hodnoty grafu nějakými rozumnými závislostmi a na základě toho tak trochu tipovat. I takto jednoduchý postup nám může dát často dostatečně dobré výsledky např. na to, aby mohlo být provedeno přesnější měření. Tedy v principu, pokud je daný prvek/sloučenina dost stabilní na to s ním něco naměřit. Musíme ale mít na paměti, že se může stát, že závislost, která do nějaké doby byla

- United States National Institute of Standards and Technology. *Atomic Weights and Isotopic Compositions Elements*. 2005.
- United States National Institute of Standards and Technology. *NIST Chemistry Webbook*. 2005.
- Winter, M. *WebElements*. 2007.

⁵<http://www.wolframalpha.com/>

⁶https://fykos.cz/_media/rocnik31/ulohy/problem-2p.nb,
https://fykos.cz/_media/rocnik31/ulohy/problem-2p.cdf

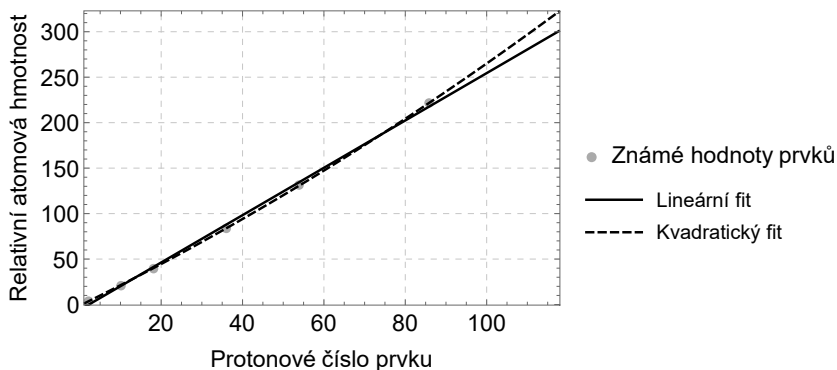
např. lineární, se pak prudce změní kvůli tomu, že se začne projevovat nějaký nový fyzikální jev.

Prokládat se budeme snažit co nejjednoduššími závislostmi, protože povětšinou máme velice málo dostupných bodů. Pokud se budeme zajímat pouze o prokládání v rámci vzácných plynů, pak budeme mít maximálně 6 hodnot předcházejících prvků (dle protonových čísel: 2 – helium, 10 – neon, 18 – argon, 36 – krypton, 54 – xenon, 86 – radon). Pro některé fyzikální vlastnosti, jako například pro teplotu tuhnutí, pak budeme mít těchto bodů i méně, protože například helium (alespoň za normálního tlaku) netuhne a radon není stabilní, ale podléhá radioaktivnímu rozpadu.

Naše metoda bude tím pádem opravdu relativně prostá. Budeme se prostě dívat na data, snažit se odhadnout, jestli nám na ně „dobře sedí“ lineární či kvadratická závislost, a to ještě jestli nám sedí líp na protonová čísla nebo index řádku prvku.

Relativní atomová hmotnost O_g

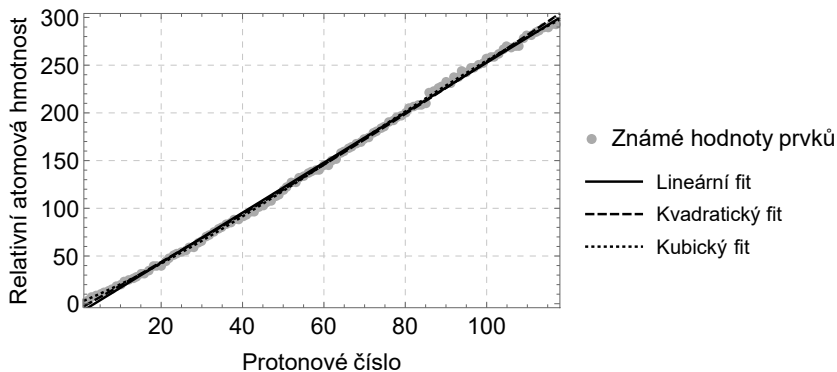
Vraťme se k určování relativní atomové hmotnosti oganessonu a ukažme si, co jsme mysleli tou extrapolací. V grafu na obrázku 1 vidíme relativní atomové hmotnosti prvků VIII.A skupiny v závislosti na periodě, na obr. 2 pak v závislosti na jejich protonovém čísle a v tomto případě na obr. 3 vidíte i data v závislosti na protonovém čísle za všechny prvky. U této vlastnosti oganessonu je ovšem taková výjimka, že je již v datech ElementData odhadnutá, a to na 294. Tím se ovšem nenecháme připravit o tu zábavu s odhadováním a zkusíme si to ukázat právě na tomto příkladu. Navíc u jiných vlastností nám to už tato knihovna nepokazí, protože skoro žádné jiné vlastnosti O_g v ní nejsou definované.



Obr. 2: Extrapolace relativní atomové hmotnosti O_g – dle protonových čísel prvků VIII.A

Pokud bychom se podívali na nějaké číslo, které nám může říci něco o tom, jak moc dobře data sedí na náš model, tak budeme využívat funkci AdjustedRSquared, kterou budeme značit dále R . Tato funkce nám zhruba říká to, jak moc daleko máme data od proložené křivky. Pokud by data ležela na přímce a my jsme je proložili přímkou, dostaneme $R = 1$. Pokud jsou data rozházená, dostáváme menší hodnoty a snažíme se přiblížit té 1, které ale v principu nemůžeme

dosáhnout.⁷ Nicméně ani toto číslo nám neřekne, jestli je odhad správný. Pokud bude ale hodně vzdálené od 1, tak nám to říká, že náš odhad nebude přesný.



Obr. 3: Extrapolace relativní atomové hmotnosti Og na základě všech prvků

Vidíme, že u obr. 1 data vůbec nesedí na přímkou a na parabolu také moc nesedí. Je tam vidět to, že střídavě je hodnota pod a nad křivkou, což si dokážeme vysvětlit právě tím, že rozestupy mezi těmi prvky jsou nestejné (podívejte se na periodickou soustavu prvků). Pokud bychom se podívali na hodnoty kvadratického fitu v řádku 7, odpovídalo by to relativní atomové hmotnosti 311 s $R = 0,995$. Vzhledem k tomu, že se nám tam střídají ty data nad a pod křivkou, tak si docela jistě ještě můžeme říci, že jsme tímto relativní atomovou hmotnost nadhodnotili.

U grafu na obr. 2 už data sedí daleko lépe. Nicméně nám to naopak možná ukazuje, že i když formálně bude lépe sedět kvadratický fit, tak někdy nám ten lineární dá možná lepší extrapolovanou hodnotu. Důvodem je, že kvadratická funkce má o jeden volný parametr víc, máme tedy větší šanci se s ní trefit na naměřená data; pro libovolná data dokonce můžeme najít polynom vysokého řádu, který všemi body přesně prochází, ale mezi nimi se prudce mění. Lineární fit má $R = 0,998$ a kvadratický $R = 0,99994$. Hodnota relativní atomové hmotnosti by podle lineární extrapolace byla 301, kdežto podle kvadratické 323.

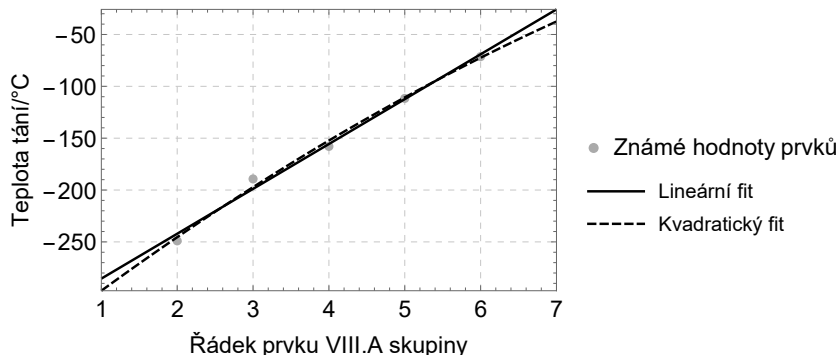
Když se do třetice podíváme na graf na obr. 3, pak dostáváme hodnoty pro jednotlivé fity: lineární 300 ($R = 0,998$), kvadratický 304 ($R = 0,9989$) a kubický 298 ($R = 0,9996$). V tomto případě si můžeme dovolit i ten kubický fit a bude dokonce pro naše využití nejlepší, protože máme hodně dat uvnitř našeho souboru a extrapolujeme těsně za jeho hranici.

Z výše uvedených grafů a hodnot bychom tedy asi vybrali jako nejpravděpodobnější hodnotu relativní atomové hmotnosti Og jako 298. To se sice přesně neshoduje s 294, které jsou předpovězeny, ale jde o relativně blízký odhad. Hned si díky tomu musíme uvědomit, že naše další odhady nebudou úplně přesné. Je ovšem zajímavou informací, že se čeká, že jistě těžší prvky a možná i těžší izotopy oganessonů budou stabilnější, nicméně zatím se je nepodařilo připravit.⁸

⁷Kvůli nepřesnostem měření, kvůli tomu že nebudeme fitovat přesně tu funkci, podle které se daná fyzikální veličina řídí atd.

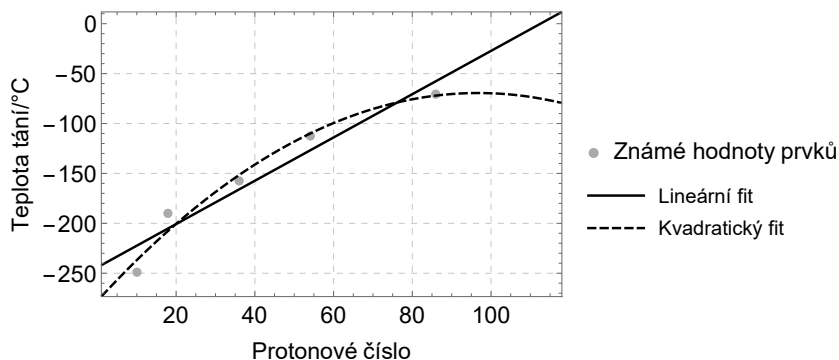
⁸Wikipedie: *Otevřená encyklopedie: Ostrov stability* [online]. c2017 [citováno 18. 10. 2017]. Dostupný z WWW: <https://cs.wikipedia.org/w/index.php?title=Ostrov_stability&oldid=14776718>

Teplota tání a tuhnutí Og

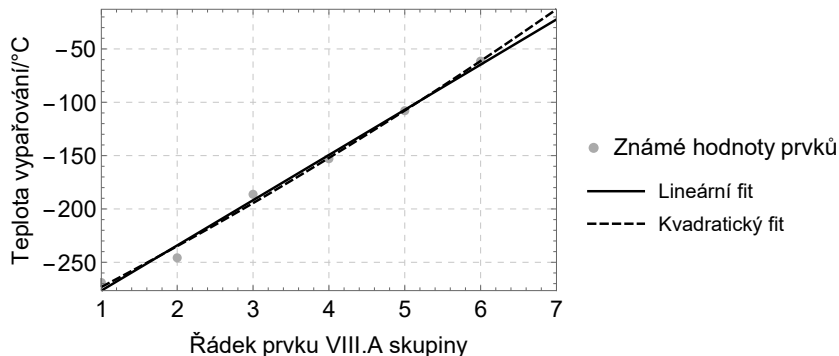


Obr. 4: Extrapolace teploty tání Og – dle periody prvku

Dále se můžeme zabývat například teplotou tání. Jak jsme již zmínili, tak přijdeme o helium jako jeden z bodů, ale budeme se zabývat pouze pěti ostatními vzácnými plyny. Teplota tání už přeci jen trochu více souvisí s „chemií“ daného prvku, tedy s elektronovým obalem viz srovnání v grafech na obr. 4 a 5. Proto je také lépe vidět nějaká jednoduchá závislost z grafu, který je vytvořen v závislosti na periodě, ve které se prvek nachází (obr. 4). V grafu na obr. č. 5 naopak vidíme, že nám dává lineární a kvadratický odhad výrazně jiné výsledky, což tak trochu ukazuje, že odhad dle protonového čísla není úplně vhodný. Pokud graf v obr. 4 proložíme přímkou, dostáváme teplotu tání $-26\text{ }^\circ\text{C}$ ($R = 0,99$), pro kvadratické proložení dostáváme $-39\text{ }^\circ\text{C}$ ($R = 0,99$). Vzhledem k tomu, že se spolehlivost příliš neliší, bude pravděpodobně přesnější lineární odhad. Pokud bychom se podívali na nějaké další pravidelnosti, pak naměřená teplota tání je nejprve pod přímkou, pak nad, pak pod, zase mírně nad a nakonec opět pod. Z toho by se dalo usoudit, že pro Og možná bude opět mírně nad a na základě tohoto „věštění z křišťálové koule“ bychom mohli říci, že bude kolem $-20\text{ }^\circ\text{C}$.

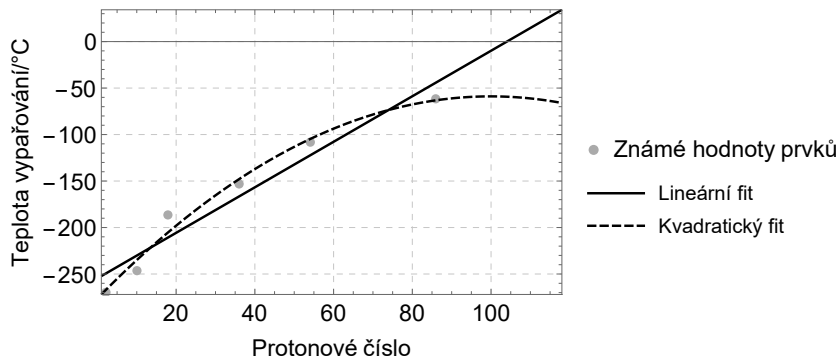


Obr. 5: Extrapolace teploty tání Og – dle protonových čísel prvků



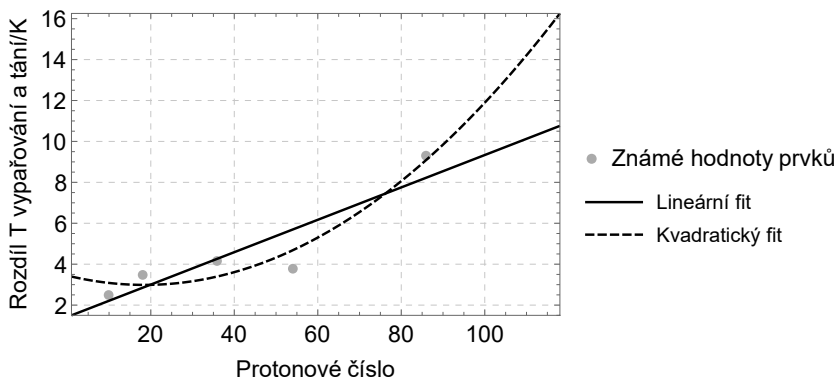
Obr. 6: Extrapolace teploty vypařování Og – dle periody

Podobnou vlastností jako teplota tání je teplota varu. Tak se hned podívejme, jak to bude s teplotou varu viz obr. 6 a 7. Helium nám alespoň kapalní, takže se nám do našich úvah opět vrací. Opět budeme brát jako důležitější periodu daného prvku. Pokud si to tedy proložíme přímkou dostáváme teplotu varu oganessonu -22 °C ($R = 0,99$) s lineárním proložením, respektive -14 °C ($R = 0,99$) s kvadratickým proložením. Tentokrát bude jistě rozumnější vzít lineární proložení, a to prohlásit za náš odhad.



Obr. 7: Extrapolace teploty vypařování Og – dle protonových čísel prvků

Co kdybychom se ale chtěli zajímat o nějakou „složeninu“ dvou fyzikálních vlastností? Hned první, která by nás mohla napadnout, by mohl být rozdíl mezi teplotou tání a teplotou varu. To je zajímavá vlastnost, protože například široké rozpětí kapalně vody umožňuje život na Zemi. Vlastnost se ale pro nás ukáže až tak zajímavou, že z toho nedokážeme nic odhadnout. Proč? Protože pro neon je to $2,5\text{ K}$, pro argon $3,5\text{ K}$ a krypton $4,1\text{ K}$. To by bylo ještě dobré, ale pak nám tento rozdíl klesne na $3,8\text{ K}$ u xenonu a zase docela dramaticky vzroste na $9,3\text{ K}$ u radonu. Takže z těchto málo bodů se dá říci, že se závislost nedá nijak jednoduše odhadnout (maximálně bychom mohli čekat, že půjde řádově o jednotky kelvinů) a ukazuje to, že nějaké



Obr. 8: Extrapolace rozdílu teploty vypařování a tání Og – dle protonových čísel prvků

složitější vlastnosti asi půjde odhadnout jenom velice špatně. Proložené křivky, jejichž výsledné hodnoty ani neuvádíme, můžete vidět jako ukázkou v grafu na obr. č. 8.

Co srovnání se současnými teoriemi? Vypadá to, že se právě u tohoto prvku už má nejspíše začít projevat „nová fyzika“, protože podle jednoho článku⁹ by teplota varu měla být kolem 80 °C s tím, že při pokojové teplotě by tento prvek měl být pevný. Nicméně jsou to také zatím pouze neověřené teorie.

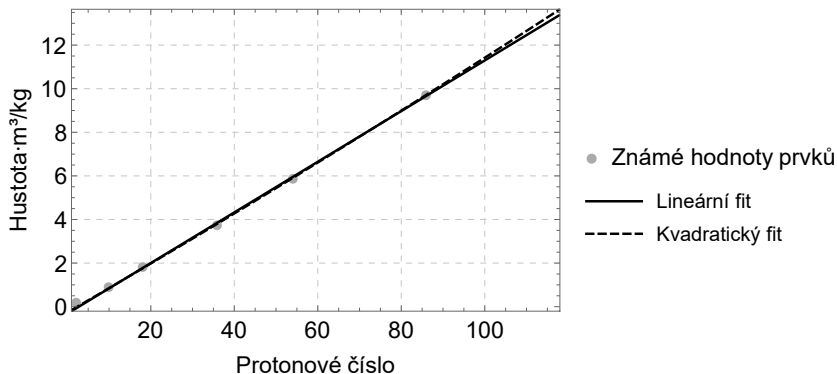
Hustota

Sice je možné, že oganesson by byl pevná látka, nicméně my zkusíme odhadnout, jakou by měl hustotu, byl-li by to plyn za standardních podmínek. Hustotu bychom mohli odhadnout také z již odhadnuté relativní atomové hmotnosti a z rovnice pro ideální plyn, ale my to opět zkusíme na základě extrapolace známých hodnot. Tentokrát rovnou vybereme variantu, kde prokládáme hodnoty hustot plynů, kde na ose x máme protonové číslo prvku. Hustota jednoatomového plynu za standardních podmínek bude opravdu spíše odpovídat hmotnosti jednotlivých atomů než řádku periodické tabulky. Graf vidíme na obrázku 9. Vidíme, že na data velice dobře sedí už samotná přímka. Pro lineární fit dostáváme odhad $\rho = 13,4 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a pro kvadratický fit je to $13,6 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. U obou fitů dostáváme velice vysoké R blížíící se 1. Vzhledem k tomu, že některé hustoty vzácných plynů známe jenom na dvě platné cifry, tak bychom měli prohlásit, že hustotu Og bychom čekali mezi $13 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ a $14 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. To by platilo, pokud by Og netvořil víceatomové molekuly a byl jednoatomovým plynem. Pokud by tvořil dvouatomové molekuly (což asi nemůžeme úplně vyloučit, i když je ve sloupci vzácných plynů), pak by jeho hustota byla zhruba dvojnásobná. Pokud by tedy Og byl stabilní a byl to plyn, tak by za standardních podmínek byl nejhustším plynným prvkem a jednou z nejhustších plynných látek vůbec.

Komentáře k došlým řešením

Za motivační úvod, kde jste popsali, po kom je prvek pojmenovaný a že je radioaktivní či jak byl připraven, jsme body nedávali (max 1), protože to nebylo cílem úlohy. Hlavním úkolem mělo být

⁹Nash, Clinton S. (2005). *Atomic and Molecular Properties of Elements 112, 114, and 118*. Journal of Physical Chemistry A. 109 (15): 3493–3500. doi:10.1021/jp050736o. PMID 16833687.



Obr. 9: Extrapolace hustoty Og jako plynné látky za standardních podmínek

odhadnout nějaké vlastnosti a pro získání plného počtu bodů je odhadnout na základě vlastností jiných prvků a také kvantitativně (číselně) a ne pouze kvalitativně (popisně). Nemohli jste to zachránit ani uvedením více vlastností.

Velkou chybou, která se opakovala docela často, bylo, že jste neuváděli zdroje informací, ze kterých jste vycházeli. Je potřeba uvádět citace a je potřeba citovat i v těch místech, kde dané údaje využíváte.

Častou chybou bylo nějak nepodložené tvrzení „je ve skupině vzácných plynů a proto je to plyn“. To je podobné prohlášení „všechny kovy jsou za standardních podmínek pevné látky“, což sice většinou platí, ale rtuť je výjimka a tak nějak kolem ní ani v periodické tabulce nejsou další kapalné prvky. Také někdo hodně utíkal do chemie, což nebylo úplně negativní, ale pokud popisujete jenom to, že bude reaktivnější, bude tvořit oxidy a jaké látky a jaké vlastnosti budou mít ty sloučeniny, tak na to otázka také úplně necílila.

Na druhou stranu bylo možné dostat body za zdůvodnění, proč si myslíte, že půjde o plyn i o pevnou látku; že půjde o kov nebo nekov; pokud jste měli vnitřně konzistentní řešení. Ale je divné, pokud jednou napíšete, že jde o plyn a hned, že jde o pevnou látku a nijak to nevysvětlíte.

Karel Kolář
karel@fykos.cz

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported. Pro zobrazení kopie této licence navštivte <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.