

Úloha II.P ... ó Oganesson

10 bodů; (chybí statistiky)

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.

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 objeven. Nicméně i tak se o něm zase 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. Je pojmenován po ruském jaderném vědci Juriji Colakovičovi Oganessianovi. 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. Nicméně 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 teoreticky modely odhadují, že by mohly být takto těžké prvky stabilnější, pokud by měly ještě vyšší počet neutronů. Nicméně 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.

Pro naše extrapolace budeme využívat program Wolfram Mathematica 11 a údaje o prvcích budeme získávat přímo z knihovny ElementData.³ Účastníci samozřejmě mohli využít jiné vhodné dostupné zdroje. Program Wolfram Mathematica je sice pro běžného středoškoláka drahý, ale je možné, alespoň částečně, využívat jeho funkčnosti v rámci webu WolframAlpha.⁴ Nebo lze využít zcela jiné programy či získat údaje o prvcích a ty až následně zpracovat například v Excelu nebo jiném tabulkovém procesoru.

Pro různé fyzikální vlastnosti bude různě účelné extrapolovat na základě buď přímo protonového čísla nebo na základě řádku, ve kterém daný prvek vyskytuje. Logicky pokud se budeme zajímat o hmotnost, tak bude spíš rozhodující protonové číslo. Pokud se ale zajímáme o nějaké chemické vlastnosti, tak se stává potenciálně zajímavější číslo řádku. My budeme provádět pouze jednoduché odhady vlastností prvku 118 na základě známých fyzikálních vlastností jiných prvků a to jednoduchou extrapolací. Nebudeme tedy uvažovat nějaké složitější fyzikální modely na vysokoškolské úrovni, spíše se budeme snažit prokládat hodnoty grafu nějakými rozumný-

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 *Wikipedia, 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 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.
- 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.

⁴ <http://www.wolframalpha.com/>

mi závislostmi a na základě toho tak trochu tipovat. Ono se totiž může ukázat, že závislost, která do nějaké doby byla docela dobře lineární se pak prudce změní kvůli tomu, že se začne projevovat například nějaký jiný fyzikální jev silněji.

Prokládat se budeme snažit co nejjednoduššími závislostmi, protože máme velice málo dostupných bodů. Maximálně budeme mít 6 hodnot předcházejících prvků. Proč? Protože se ukazuje, že podobné vlastnosti mají prvky, které jsou ve stejném sloupci (2 - helium, 10 - neon, 18 - argon, 36 - krypton, 54 - xenon, 86 - radon). Proto nebudeme v našich extrapolacích uvažovat jiné prvky než vzácné plyny. Pro některé fyzikální vlastnosti, jako například pro teplotu tuhnutí, pak budeme mít těchto bodů i méně, protože například helium (alespoň za normálního tlaku) netuhne.

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

Vraťme se k určování relativní atomové hmotnosti oganessonou. Vzhledem k tomu, že hmotnost bude záviset na počtu nukleonů, která je závislá příměji na protonovém čísle než jenom na čísle řádku. Body pak sedí velice dobře na přímce ($R = 0,998$). Je jasné, že pokud použijeme kvadratickou aproximaci, tak dostaneme lepší výsledek - alespoň, co se týče intrapolace. My ovšem extrapolujeme, což je víc závislé na důvěře toho, jak naše funkce bude fungovat i mimo oblast, kde máme data. Obecně je pak zvýšení stupně polynomu používaného v aproximaci a extrapolaci docela rizikové, protože polynom vysokého stupně má tendenci mimo intrapolovanou oblast rychle růst či klesat. Pokud se ovšem podíváme na graf, tak se zdá, že kvadratická závislost je výrazně lepší a opravdu, pokud se podíváme spolehlivost odhadu, tak je $R = 0,99995$. Tedy náš nejlepší odhad relativní atomové hmotnosti prvku 118 bude zhruba 323. Relativní atomová hmotnost izotopu prvku 118, který byl objeven, je ovšem známá a je to 294 (respektive přesněji bude někde mezi 293 a 294 a vlastně je také spočítaná). To je docela velký rozdíl. To nám hned ukazuje, že asi naše odhady nebudou úplně přesné. Nicméně minimálně se očekává, že těžší izotopy oganessonou budou stabilnější, nicméně zatím se je nepodařilo připravit.⁵ Právě i vzhledem k tomuto nedostatku experimentálního ověření však nemůžeme náš, byť primitivnější odhad, považovat za zcela špatný. I když experimentální neúspěchy zase ukazují, že je trochu podezřelý, jak je těžké vyrobit ta těžší jádra.

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 přecijen trochu více souvisí s „chemií“ daného prvku, tedy s elektronovým obalem. Proto je také lépe vidět nějaká jednoduchá závislost z grafu, který je vytvořen v závislosti na řádku, ve kterém se prvek nachází. Pokud proložíme přímkou dostáváme teplotu tání -26 °C při spolehlivosti $R = 0,993$, pro kvadratické proložení dostáváme -37 °C při spolehlivosti $R = 0,995$. Vzhledem k tomu, že se spolehlivost moc 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 možná bude opět mírně nad a na základě tohoto „věštění z křišťálové koule“ bychom mohli říci, že bude kolem -25 °C .

Podobnou vlastností jako teplota tání je teplota varu. Tak se hned podívejme, jak to bude s teplotou varu. Helium nám alespoň kapalní, takže se nám do našich úvah opět vrací. Opět budeme brát jako důležitější číslo řádku daného prvku. Pokud si to tedy proložíme přímkou dostáváme teplotu varu oganessonou -22 °C při spolehlivosti $R = 0,992$ a lineárním prokládá-

⁵https://cs.wikipedia.org/wiki/Ostrov_stability

ní, respektive $-13\text{ }^{\circ}\text{C}$ se spolehlivostí $R = 0,993$ s kvadratickým proložením. Opět bude asi rozumnější vzít lineární položení a to prohlásit za náš odhad.

Co kdybychom se ale chtěli zajímat o nějakou „složenu“ dvou fyzikálních vlastností? Hned první, která by nás mohla napadnout by mohl být teplotní rozdíl mezi teplotou tání a teplotou varu. Ten se ukáže až tak zajímavým, 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 a ukazuje to, že nějaké složitější vlastnosti asi půjde odhadnout jenom velice špatně.

A co srovnání se současnými teoriemi? No vypadá to, že se právě u tohoto prvku už má nejspíše začít projevovat „nová fyzika“, protože podle jednoho článku⁶ by teplota varu měla být kolem $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ s tím, že při pokojové teplotě by tento prvek měl být pevný. Nicméně jsou to také zatím pouze neověřené teorie.

Dále bychom mohli zkoumat další fyzikální vlastnosti, které by vás napadly. A právě i proto čekáme na přijatá řešení, abychom do komentářů k došlým řešením uvedli, o které fyzikální vlastnosti jste se zajímali nejčastěji a které byly nejzajímavější.

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/>.

⁶Nash, 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.