

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА
И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

*Dedicatum Viro Clarissimo ac Doctissimo Professore Doctori W.H. Eugenio
Schwarzi occasione ejus diei natali octogintesima quinta*

ORBITALIĀ ATOMICĀ BUNGENIANĀ AC KOGAENSIĀ ANGULŌ
FROBENIANŌ CUM ORBITALIBUS MOSCOVIAE-AQUISGRANAE-
PARISIORUM LUTETIAE (MAP) DICTIS INVESTIGATĀ**

© 2022 г. Andrei L. Tchougréeff^{a,*} and Peter Reinhardt^b

^a *Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

^b *Laboratoire de Chimie Théorique, Sorbonne Université et CNRS UMR7616, Paris, France*

**e-mail: tchougreff@phyche.ac.ru*

Поступила в редакцию 03.12.2021 г.

После доработки 02.03.2022 г.

Принята к публикации 04.03.2022 г.

Minimizatio angulōrum Frobenianōrum inter subspatiā functionaliā prognatā copiis differentibus functionum atomicārum est adhibita ad valores exponentium orbitalium ξ determinandos pro basibus minimalium atomicōrum parametrōrum (Moscovia-Aquisgrana-Lutetia Parisiōrum – MAP) quae praebent optimam repraesentationem duābus copiis functionum atomicārum: alterae Bungenianae existenti ad elementa H–Xe, alterae Kogaensi porrectae ab H ad Lr ($Z = 103$). Valores exponentium ita inventi repraesentati ut functiones oneris nuclearis Z regulas lineares sequuntur in segminibus respectivis, praescriptiones regulis Slateri constitutas ergā exponentes Slaterianos simulantes. Exacte tamen regulas Slateri non sequuntur quia valores numeri quantici efficientis n^* atque abstectionis incrementa σ ab illis praescriptis differunt. Nihilominus ramos lineares dependentiārum ξ ā Z juste structuram Tabulae Periodicae Elementōrum sequuntur et proprii sunt ad segminā respondentīā p -, d - (transitionā) et f - (Lanthanoidā ac Actinoidā) elementis.

С помощью минимизации фробениусовских углов между функциональными подпространствами, растянутыми различными наборами атомных функций, получены значения орбитальных экспонент ξ , характерных для функций типа МАП (минимально атомно параметризованных/московско-ахенско-парижских), дающие наилучшее приближение последних к двум наборам атомных функций: Бунге, известных для элементов H–Xe, и Кога, покрывающих интервал элементов от H до Lr ($Z = 103$). Полученные таким образом значения экспонент, как функции Z , подчиняются кусочно-линейным законам, напоминающим предписанные правилами Слэйтера для его орбитальных экспонент. В деталях, однако, правила Слэйтера для МАП-экспонент не выполняются, так как значения эффективного главного квантового числа n^* так и инкременты экранирования σ отличаются от предложенных Слэйтером значений. Тем не менее, отрезки линейных зависимостей ξ от Z хорошо согласуются со структурой Периодической Системы Элементов и специфичны для отрезков значений Z , отвечающих, соответственно, p -, d - (переходные) и f - (лантаноиды и актиноиды) элементов.

Ключевые слова: углы Фробениуса, функциональные подпространства, орбитальные экспоненты, атомные функции, правила Слэйтера

DOI: 10.31857/S004445372209028X

I. INTRODUCTIO AC THEORIA

Hodie multae variae copiae orbitalium atomicōrumⁱ circumsunt quibus ad computationes perducendas valde utuntur [1, 2]. Efficientiae numericae causā istae

copiae ex functionibus Gaussianis exstructentur. Earum parametri: Gaussianārum exponentes ac contractionis coefficients separatim nullam physicam significationem habent. Vir clarissimus Carolus Bunge cum collaboratoribus jam A.D. 1993 methodō Hartree–Fockis orbitaliā atomicā obtinuit [3] in formā combinationum linearium monomium Slateri:

$$r^{(k-1)} e^{-\xi r} \quad (1)$$

**Эта статья публикуется на латыни в ознаменование службы профессора Ойгена Шварца в качестве редактора статей, публиковавшихся на этом языке в Theoretica Chemica Acta в 60-е годы прошлого века.

differentibus gradibus ($k - 1$) ac exponentibus orbitalibus ξ . Illä orbitaliä atomicä, ab hōc infrä Bungenianä nuncupatä, aliä orbitaliä, numerice cognotä [4, 5], magna cum subtilitate reproducunt, et per hoc pro accuratissimis formae simplicissimae, id est evolutionem brevissimam per orbitaliä Slateri possidentibus, haberi possunt. At, quamquam orbitaliä Bungenianä breve monomialibus Slateri repraesentantur, nullum parametrum hōrum orbitalium – vel exponentes orbitales vel coëfficientes expansionum – significationem physicam habent. In dissertatiunculis nostris [6, 7] formä orbitalium magis simplicatä, primö ä V.Cl. V.A. Focke propositä [8], utebamur ad systematä orbitalium atomicōrum orthonormalium exstruendä modo unö parametrö per corticulam atomicäm numeris quanticis $n\ell$, demum exponenti orbitali $\xi_{n\ell}$, descriptä. Huic parametro significatio physica jam adscribi potest secundum v. gr. Adn. [9, 10] ope:

$$\xi_{n\ell} \approx \sqrt{2\text{PI}_{n\ell}}, \quad (2)$$

ubi $\text{PI}_{n\ell}$ est potential ionizationis ex corticulä $n\ell^{\text{isimä}}$. Ad perveniendum illi metae posuimus functiones radiales atomicas $R_{n\ell}(r)$ polynomiä gradüs ($n - 1$) r^{ae} functionibus $\exp(-\xi_{n\ell}r)$ multiplicatä esse. Pro quövis valore numeri quantici azimuthalis ℓ numerus quanticus principalis n solum magis quam ℓ esse potest.

Polynomium in functione $R_{n\ell}(r)$ multiplicatorem r^ℓ continet et igitur modo ($n - \ell$) membra habet. Consequenter, pōnimus orbital atomicum formae

$$R_{n\ell}(r) \propto (2\xi_{n\ell}\rho)^\ell P_{n\ell}(2\xi_{n\ell}r) \exp(-\xi_{n\ell}r) \quad (3)$$

esse, quod normalizatum sit, et ubi $P_{n\ell}(x)$ sunt polynomiä in Adn. [6] descriptä. Pro $n = \ell + 1$ modo unum membrum existat cujus coëfficiens numericus unitatem esse pōnimus: $P_{\ell+1,\ell}(x) \equiv 1$; itaque functio $R_{\ell+1,\ell}(r)$ sola functio Slateri est. In aliis polynomiis $P_{n\ell}(r)$ pro datö ℓ , coëfficiente apud r^0 pro unitate positö, hujus polynomii alios coëfficientes ex conditione orthogonalitatis functionum $R_{n\ell}(r)$ pro valoribus $n > \ell + 1$ determinare possumus. Haec orbitalium forma MAP ä nobis nuncupata est dedicationis oppidibus nostris causä et ad eārum formam quod illam numeri Minimali Atomicōrum Parametrōrum significandam.

In methodö Hartree–Fockis exponentes orbitales $\xi_{n\ell}$ conditione energiae totalis minimalis determinantur [11]. In Adn. [7] potuimus pro elementis onerum nuclearium $Z = 1-54$, i.e. H–Xe, omnes exponentes ex minimi energiae conditione determinare, et eös monstrare regulas lineares respectu Z :

$$\xi_{n\ell} = a_{n\ell}Z + b_{n\ell} \quad (4)$$

sequi. Flexüs $a_{n\ell}$ intersectionesque $b_{n\ell}$ (cum ordinatä)ⁱⁱⁱ proprii sunt segminibus Tablulae Periodicae Elementōrum, ubi corticula numeris quanticis $n\ell$ dum

implenda est (i.e. aperta) aut ubi eādem corticula jam est completa et consequenter corculae inest.

Haec methodus haud plane ad valores certos ac stabiles ducit: exponentes orbitales MAP-iani ex conditione minimi energiae tarde et taediose sunt inventu. Praeterea, perduntur ca. 3% energiae totalis cum orbitalibus Bungenianis conferendo. Alio modo, habentes orbitaliä atomicä Bungenianä pro datis, possumus exponentes $\xi_{n\ell}$ invenire nunc ex conditione maximi superpositionis inter orbitaliä MAP-ianä et Bungenianä (vel aliquas alias datas copias). Instrumentum numericum ad hōc utile productum Frobenianum ex matricibus operatorōrum in spatiö Hilbertianö L^2 agentium est. Id copias vectorōrum, quibus haec subspatiä progignuntur, comparare permittit.

Actu, sint $\{|\beta\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$ ¹ copiae vectorum, quōrum numeri respective b et m sint, ambo finiti. Tunc licet nobis operadores in L^2 (aequaliter matrices)

$$\mathbf{M} = \sum_{\mu=1}^m |\mu\rangle\langle\mu|; \quad \mathbf{B} = \sum_{\beta=1}^b |\beta\rangle\langle\beta| \quad (5)$$

definire. Quivis operadores lineares quoque spatium vectoreum formant, quia summa duōrum talium operatorum et productum ex operatore et numero (complexö) ipsi sunt operadores. Producti ex duöbus operatoribus \mathbf{C} et \mathbf{D} tractus $-\text{tr}(\mathbf{C}^\dagger\mathbf{D})$ – definit productum scalarem ex operatoribus, faciens ex iis spatium vectoreum Euclideanum. Illud omnia qualitates producti scalaris habet – est sesquilinearis, positiveque definitus pro $\mathbf{C} = \mathbf{D}$, praeter $\mathbf{C} (= \mathbf{D})$ zero operator sit.

Definitione producti Frobeniani ad operadores cum matricibus $\mathbf{M}_{\lambda\kappa} = \langle\lambda|\mathbf{M}|\kappa\rangle$ et similiter \mathbf{B} adhibitä, obtinēmus:

$$\begin{aligned} \text{tr}(\mathbf{M}^\dagger\mathbf{B}) &= \sum_{\kappa\lambda} \sum_{\mu} \sum_{\beta} \langle\kappa|\mu\rangle\langle\mu|\lambda\rangle\langle\lambda|\beta\rangle\langle\beta|\kappa\rangle \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\beta} \langle\beta|\sum_{\kappa} |\kappa\rangle\langle\kappa|\mu\rangle\langle\mu|\sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda|\beta\rangle\rangle \\ &= \sum_{\mu} \sum_{\beta} |\langle\beta|\mu\rangle|^2; \end{aligned} \quad (6)$$

ubi copiae $\{|\lambda\rangle\}$ et $\{|\kappa\rangle\}$ sunt separatim completas ortho-normales bases in L^2 . Itaque operatorem identitatis

$$I = \sum_{\kappa} |\kappa\rangle\langle\kappa| = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda|$$

evolvere possumus.

Operatoris norma deducitur sollemniter ut radix interni Frobeniani producti ex operatore et eö ipsö: $|\mathbf{C}| = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{C}^\dagger\mathbf{C})}$; quae nota est ut Frobeniana norma. Ergo angulus Frobenianus φ_{MB} inter duo subspatiä definiri potest ope:

¹ Hinc notatione Diraciana “un-cas” utemur.

$$\cos \varphi_{\mathbf{MB}} = \frac{\text{tr}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{B})}{|\mathbf{M}| |\mathbf{B}|} = \frac{\sum_{\mu\beta} |\langle \beta | \mu \rangle|^2}{\sqrt{\sum_{\mu\mu'} |\langle \mu | \mu' \rangle|^2} \sqrt{\sum_{\beta\beta'} |\langle \beta | \beta' \rangle|^2}}, \quad (7)$$

quae definitio a definitione dissertatiunculae [12] illō differt quod vectores copiae $\{|\mu\rangle\}$ inter se orthogonales vel normalizatos esse non debent et similiter vectores copiae $\{|\beta\rangle\}$. Dehinc operatores \mathbf{M} vel \mathbf{B} haud necessarie operatores projectivi sunt, quod modo in casu, si vectores copiae $\{|\mu\rangle\}$ (atque $\{|\beta\rangle\}$) orthonormales sunt, evenit.²

Cosinus anguli supra definitus demonstrari potest nihil aliud esse [12] quam probabilitas electronem in quōvis statū subspatii progeniti copiā $\{|\mu\rangle\}$ inveniendi, dummodo id in quolibet statū subspatii progeniti copiā $\{|\beta\rangle\}$ sit. Definitio aeq. (7) positivitatem cosini spondet, quod eum ut quamdā probabilitatem interpretari sinit.

Si vectores copiae $\{|\mu\rangle\}$ a quibusquid parametrīs pendent, angulum $\varphi_{\mathbf{MB}}$ minimizando vel $\cos \varphi_{\mathbf{MB}}$ maximizando respectu hōrum parametrōrum, possumus subspatium prognatum copiā $\{|\mu\rangle\}$ invenire proximum ad subspatium prognatum datā copiā $\{|\beta\rangle\}$. Ut suprā et in Adn. [6, 7, 12] explicatum est, orbitaliā MAP-ianā suis exponentibus omnino determinantur, qui, igitur, variabilibus optimizationis angulō Frobenianō vel ejus cosinō servire possunt.

Cum omni supradictō exponentes pro atomis $Z = 1-54$ i.e. H–Xe in Adn. [12] a nobis ex conditione minimi anguli (maximi cosini) inter subspatiā orbitalium Bungenianōrum et MAP-ianōrum determinati sunt. Pro omnibus valoribus Z^{ae} cosinus anguli Frobeniani valorem 0.96 superabat (vide infrā). In hāc dissertatiunculā nos eundem accessum extendēmus ad atomos $Z = 55-103$ i.e. Cs–Lr, orbitaliā Kogaensiā [13] habentes pro datis, et angulum Frobenianum inter illā et orbitaliā MAP-ianā minimizantes respectu hōrum exponentium. Atque, investigamus regulas, quas exponentes MAP-iani, determinati ex orbitalibus Bungenianis ac Kogaensibus, sequuntur ut functiones a Z .

2. EFFECTŪS AC DELIBERATIO

Primō, exponentes, jam in Adn. [12] pro atomis $Z = 1-54$ ex orbitalibus Bungenianis inventos, consid-

² In Adn. [12], interea, copiae $\{|\beta\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$ relative sunt functiones Bungenianae ac MAP-ianae, et sunt ergo separatim normalizatae et inter se orthogonales. Tunc, quōmodo in Adn. [12] dictum est, summae quadratorum elementorum utraeque matricum \mathbf{M} vel \mathbf{B} aequales sunt dimensionibus m vel b subspatiōrum copiis $\{|\mu\rangle\}$ (vel $\{|\beta\rangle\}$) prognatorum; eārum normae Frobenianae sunt radices quadratae m^{ae} ac b^{ae} . In casu generali in aeq. (7) summae quadratorum elementorum matricum Gramianārum copiārum $\{|\beta\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$ sub signis radices stant.

eravimus. Eōrum dependentiae a Z in Fig. 1 monstatae sunt et parametrā accommodationum (flexus ac intersectiones aeq. (4)) in Tabulā 1 collocatae sunt. Vel oculis vel ex valoribus criterii R^2 videntur exponentes regulis linearibus perfecte parere. Exceptio unica atomus Palladii (Pd, $Z = 46$) est, cujus exponens spectans ad orbital 5s (et multo minus 4s) a lineā rectā delabitur, quia hujus atomi configuratio electronica in ejus statū imō modō implendi (*Aufbauprinzip*), cui alteri atomi parent, non oboedit. Has duas exponentes ex flexūm ac intersectionum accommodatione exclusimus.

Valores autem criterii R^2 in Tabula 1 validitatem regulae linearis perfecte confirmant. Istō modō inventos numeros $a_{n\ell}$ ac $b_{n\ell}$, quamquam simili sunt ipsorum valoribus in Adn. [7] ad exponentes methodō Hartree et Fockis determinatos, illō ab iis differunt, quod valores Adn. [7] in intervallis confidentialibus ($a_{n\ell} \pm 3\delta(a_{n\ell})$ et similiter pro $b_{n\ell}$) valorum Tabulae 1^{ae} non jacent. Sunt enim functiones differentes, tamen propinquae. Hōc mirabile esse non videtur, quia methodi adhibitae ad eās determinandum quoque differunt.

Ut in Adn. [7], flexūs, sic inventi, secundum regulas Slateri [14] interpretari possunt; id est, ope:

$$a_{n\ell} = \frac{1}{n_{n\ell}^*} \times \begin{cases} 1 - \sigma_{n\ell} & \text{pro corticula aperta (implenda),} \\ 1 & \text{pro corticula clausa (completa)} \end{cases}$$

representantur, ubi $n_{n\ell}^*$ est, secundum Slaterum, *numerus quanticus principalis efficiens* pro corticulā $n\ell^{\text{isimā}}$, et $\sigma_{n\ell}$ quemdam decessum (si > 0) interactionis electronum in eādem corticulā, comparatam ad interactiones cum electronibus in corticulis inferioribus, significat. Ut videtur ex Tabulā 1, valores $n_{n\ell}^*$ pro orbitalibus MAP-ianis $n = 1-3$ perfecto coincidunt cum ipsis n ut regulae Slateri praescribunt. Pro $n > 3$ numeri efficientes $n_{n\ell}^*$ minus sunt quam n , eōrum valores pro corticulis 4s, 4p et 5s quoque praescriptionem Slateri sequuntur. Itaque, videmus exponentes orbitalium MAP-ianōrum ex orbitalibus Bungenianis deductos, sicut exponentes MAP-iani deductos methodō Hartree–Fockis, regulas Slateri (generalizatas) sēqui.

Successū confortatos, nos, ut suprā descriptum est, $\cos \varphi_{\mathbf{MK}}$ inter copias orbitalium Kogaensium et MAP-ianōrum maximizavimus pro atomis $Z = 1-103$ respectu exponentium MAP-ianōrum. In Fig. 2 *defectum* i.e. quantitatem $1 - \cos \varphi_{\mathbf{MK}}$ ut functionem a Z monstramus. Manifeste, defectus valorem 0.05 non superat et plurimum apud ca. 0.03 vel inter 0.025 et 0.035 jacet. In Adn. [12] similiter, defectus inter copias orbitalium Bungenianōrum et MAP-ianōrum minimizatus valores similes acquirat in intervallō numerōrum atomicōrum $Z = 1-54$. Sic uniformitas ap-

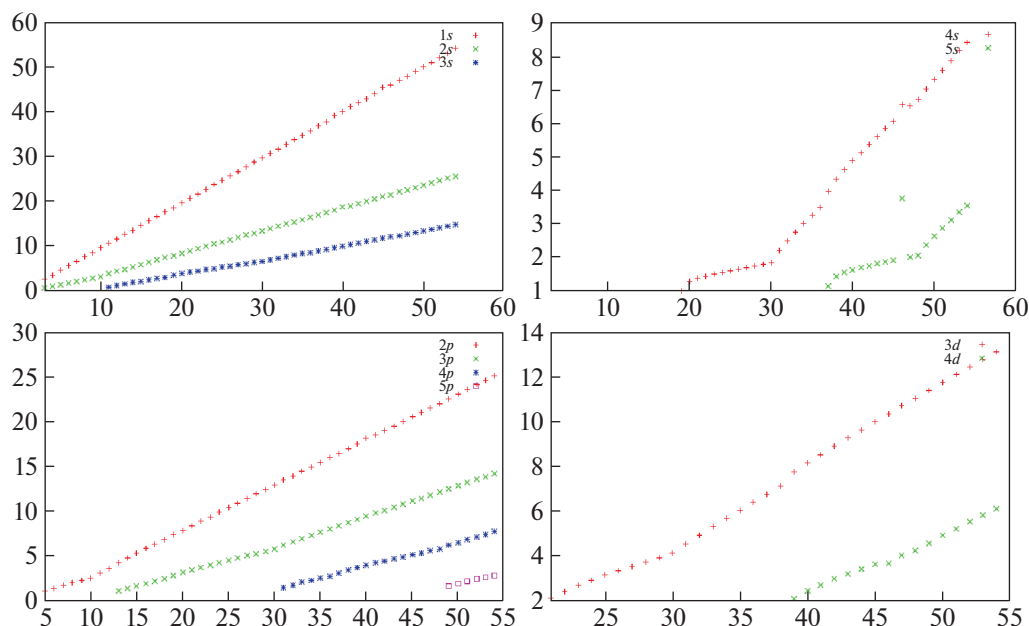


Fig. 1. Dependendiae exponentium ξ_{nl} ex orbitalibus Bungenianis determinatorum ab onere nucleari Z (numerō atomicō) pro corticulis nl . Acies summa: $1s-3s$ – sinistrō; $4s-5s$ – rectō; acies ima: $2p-5p$ – sinistrō; $3d-4d$ – rectō.

proximationis orbitalium Bungenianōrum vel Kogaensium per orbitalia MAP-iana exprobatā est.³

Dependendiae exponentium MAP-ianōrum ξ_{nl} ab onere nucleare Z , in hāc disseratatiunculā obtentae ex orbitalibus Kogaensibus, in Fig. 3 depictae sunt. Eārum coëfficientes – aeq. (4) – aestimationesque eōrum errorum in Tabulā 2 confērīmus. Ad quantitates a_{nl} et b_{nl} determinandas, punctā, quae ex ramis linearibus delabuntur, segregavimus, ne praecisionem flexūum ac intersectionum noceant. Sic tractatae sunt primae atomi cujusque periodi cum corticulis ns implendis, quia pro iīs solum duo punctā adhiberi possunt ad dependendiam ā Z statuendam. Similiter, atomi cum $Z = 46$ (Pd) sicut $Z = 57, 58, 64$ (La, Ce, Gd), quae fortuite (vide infra) electronā in corticulis d accipiunt, ex accommodatione exclusae sunt.

In Fig. 3 clare videmus exponentes regulas Slateri generalizatas sequi: id est flexus in segminibus ad corticulas apertas spectantibus minor sunt quam in segminibus corculaneis (completis). Atque, elementā transitiva ac Lanthanoidā/Actinoidā dependendiam exponentium ns ($n = 4-7$) ā Z valde debilem (lineae 6^a, 8^a, 10^a, 13^a, 14^a, 16^a, 17^a, 25^a Tabulae 2) monstrant. Hoc quoque regulis Slateri generalizatis concordat, quia electrones in his corticulis in respectivis segminibus corticulis inferioribus d vel f forte ab nucleis abstantur.

³ Corticulae variae (s, p , etc.), etsi haud eosdem, sed propinquos valores defectuum dant, ideo has differentias singillatim non consideramus.

Generalim notandum est quod plerumque corticulae structuras simplices dependentiārum eārum exponentium ā Z monstrant: demum, eae duos ramos continent alterum ad segmen, ubi corticula implenda alterum ubi corticula completa est spectantes, perinde ad corticulam apertam vel clausam. Duo sunt genera exceptionum: alterae sunt corticulae nsp ($n = 5, 6$) quārum dependendiae ξ_{nl} ā Z non duo sed plurima segmina habent, certe ad elementā transitivā ac Lanthanoidā Actinoidāque. Altera est corticula $4p$ quae unō solum ramō lineari gaudet (Fig. 3 – acies media sinistrō). Hōc notitiis numericis (lineae 22^a, 23^a Tabula 2)

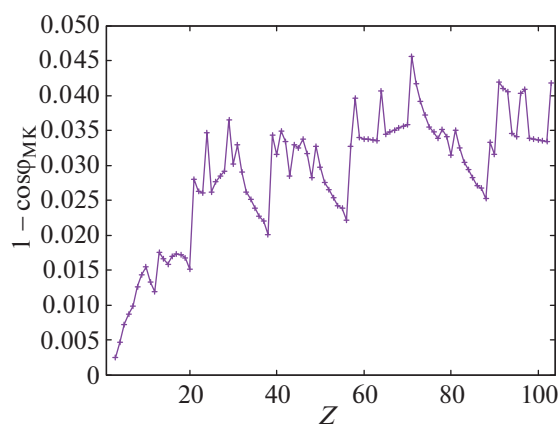


Fig. 2. Defectus, id est quantitas $1 - \cos \varphi_{MK}$, ut functio ā Z pro copiis orbitalium Kogaensium in intervallō $Z = 1-103$.

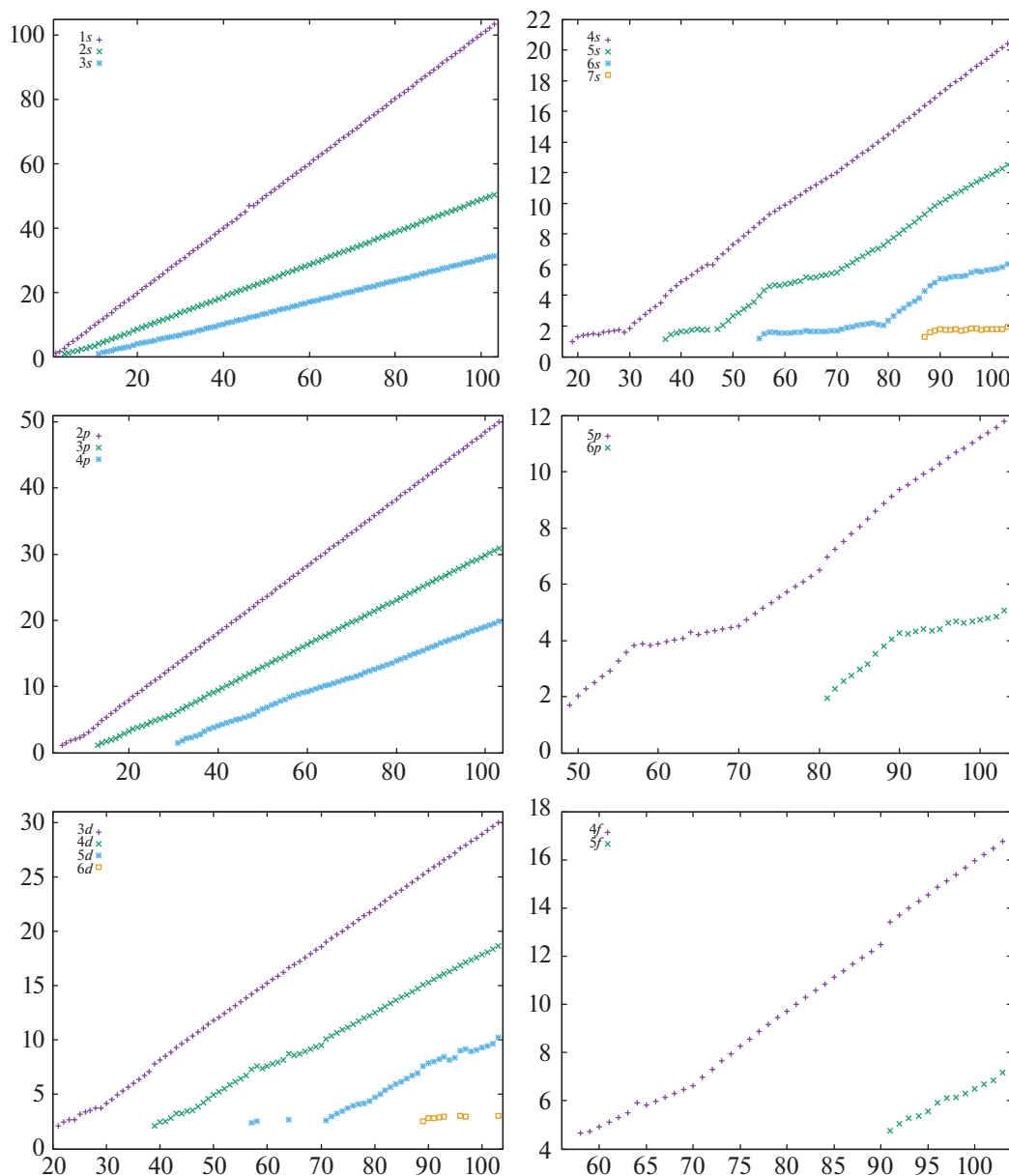


Fig. 3. Dependendiae exponentium ξ_{nl} ex orbitalibus Kogaensibus extractōrum ab onere nucleari Z (numerō atomicō) pro corticulis nl . Acies summa: $1s-3s$ – sinistrō; $4s-7s$ – rectō; acies media: $2p-4p$ – sinistrō; $5p-6p$ – rectō; acies ima: $3d-6d$ – sinistrō; $4f-5f$ – rectō.

monstrantibus intersectionem intervallōrum confidentialium respectivōrum confirmatur.

Parametros n_{nl}^* regulārum Slateri ex notitiis Tabulae 2 determinatos pro valoribus numeri quantici principali $n \leq 4$ videmus ipsi n proximos esse (in omnibus casibus differentiae minus quam 0.05 sunt). Ita stābilitur praescriptio Slateri, ut pro $n = 4$ n_{nl}^* sit 3.7, notitiis ex orbitalibus Kogaensibus extractis, non confirmata esse. Contrarie, notitiae extractae ex orbitalibus Bungenianis praescriptiones Slateri sustinent (notabile, differentiae observantur ad lineas in Tabula 2 “–” designatas); signum “–” tantum in lineis ad corticulas

corculaneas appāret quid explanare possimus numerō multō majōre punctōrum notiti arum adhibitōrum ad flexūum ac intersectionum accomodandos in casu orbitalium Kogaensium quam in casu orbitalium Bungenianorum.

Pro numeris quanticis $n \geq 5$ forma linearis dependentiarum ξ_{nl} ā Z in segminibus respectivis conservatur, sed valores numerici non ita simpliciter explicantur ut pro $n \leq 4$. Corticula v. gr. $5s$ involutissimam formam dependentiae ξ_{5s} ā Z habet. Tametsi formaliter ab $Z = 55$ (Cs – primum elementum periodi 6ⁱ) ea omnino ad corculum spectat, ejus dependentia ā Z

structuram habet complexam. Enimvero apud $Z \geq 55$ segmină spectantiă ad Lanthanoidă, elementă transitiivă $5d$, elementă $6p$ et finaliter Actinoidă perspicue videntur. Ex hăc multitudine segmen pro corculaneŌ tenendum non simplice est sane selectu. Corticulis cum minoribus $n (\leq 4)$ semper segmen corculaneum est illud cum flexū a_{nl} maximŌ. Pro corticulă $5s$ duo segmină sunt cum flexibus propinquis: pro elementis $5p$ (linea 9^a Tabula 2) et elementis $6p$ (linea 12^a Tabula 2), quod respective praebent valores n_{5s}^{*i} 3.6163 et 3.8993. Prima optio non omnino bona est quia e.g. segmină p -elementŌrum pro $n \leq 4$ corculaneă esse non habebantur. Seligentes ultimum segmen pro probŌ segmine corculaneŌ, obtinemus dilectum valorum σ_{5s} datum in Tabula 2 (lineae 8^a–12^a). IllŌrum valorum modo pro elementis $5p$ negativus est. Pure theoretice haud impossibile est σ_{nl}^{as} negativas habitu: hoc simpliciter indicat interactionem electronis cum aliis intra corticulă (implendă) fortior esse illă cum aliis in corticulis inferioribus (completis).

Quoad corticulam $5p$, ad illam unica facultas segminis, ubi haec corticula ad corculum spectat, seligendi, est segmen elementŌrum $6p$ (linea 27^a Tabula 2) pro illŌ accipere. Sub hăc hypothesi valorem n_{5p}^{*} proximum ad n_{5s}^{*} obtinemus et atque omniam copiam valorum σ_{5p} positivŌrum tametsi cum valore perpauco pro ipsis elementis $5p$ (linea 24^a Tabula 2).

Pro corticulă $6s$ nullum segmen certe seligeri potest, ubi ea ad corculum spectet. Notantes quod pro corticulă $5s$ flexus in segminibus Z elementŌrum $5p$ et $6p$ simili sunt, ponamus corticulam $6s$ in segmine elementŌrum $6p$ ad corculum spectare. Sub hăc hypothesi atque valorem n_{6s}^{*} multo minorem quam 6 obtinemus omniam copiam valorum σ_{6s} positivŌrum (in segminibus LanthanoidŌrum, elementŌrum transitiivŌrum $5d$ ac ActinoidŌrum).

Quoad corticulam $6p$, sufficiens notitiae absunt ad valorem n_{6p}^{*} certe determinandum. Quoniam jam vidimus n_{5p}^{*am} proximum ad n_{5s}^{*am} esse ponamus et n_{6p}^{*am} par n_{6s}^{*a} esse et ita valores σ_{6p} pro ipsis elementis $6p$ et egaliter pro Actinoidis (linea 29^a, 30^a Tabula 2) invenimus.

Quoad corticulas nd ($n = 3-5$), eărum exponentium dependentias omnino regulares videntur (Fig. 3 acies ima, sinistro). Notandum est, numeri quantici efficientes n_{nd}^{*} semper minus quam respectivi n sunt et notabilissime pro $n = 5$, qui etiam multo minus quam 4 sunt. Causa istius effectus non est interim praeclara.

Flexus a_{4f} in segminibus Lu–Th et Ac–Lr proximi sunt. Etiam eŌrum intervalli confidentiae marginaliter intersecunt. ErgŌ flexum communitarem pro duŌbus intervallis invenimus et eŌ usi sumus ad numerum efficientem n_{4f}^{*} determinandum (linea 44^a Tabula 2).

Observatio autem generalis deducta ex notitiis Tabularum 1, 2 respectu corticularum $5s$, $5p$, $6s$, (et fortasse $6p$) est quod numeri quantici principali efficientes repente non tantum minor, sed multo minor sunt quam ipsis numeri quantici principali n , enim vero n_{nl}^{*} minori sunt quam 4. Hoc postulat explanationem, sed eam ad alias dissertationes remittimus.

Supră consideravimus dependentias ξ_{nl} ā Z generatim. Istis dependentiis structura Tabulae Periodicae refulget. Nempe notanda est similitas inter dependentias ξ_{nl} ā Z in Fig. 3 hujus disseratiunculae et Figurae 9 Adn. [15] monstrantis dependentias valorum $\sqrt{PI_{nl}}$ ā Z . Periodicitas autem ipsă chemice intellectă aliter se manifestat (vide e.g. Adn. [15, 16]). Ad illam investigandum reordinemus dependentias lineares ξ_{nl} ā Z ita ut structura periodica corticularum apertărum manifesta sit. Actu, in quŌque segmine respondentem implendae cuique corticulae numeris quanticis $n\ell$, haec $Z - Z_{nl}^4$ electrones continet ubi Z_{nl} est numerus atomicus subinvicem praecedens initio implendi corticulae $n\ell$, (apud $Z = Z_{nl}$ corticula $n\ell$ dum nullum electronum continet⁵). In Tabulă Periodicā formae longissimae 32^{abus} columnis (vide e.g. Adn. [15, 16]) elementă aequalibus valoribus $Z - Z_{nl}$ ad easdem gregem spectant: formaliter in easdem columnam stant. Definitio numerŌrum Z_{nl} per numerum columnae in Tabulă Periodicā nimis formalis videtur. Eă autem talis non est. Curiose, ceterum licet pro Z_{nl} accipere numeros, subinvicem praecedentes numeros Z_{n+l} , apud quos electron valore datŌ $n + \ell$ primum apparet secundum regulam $(n + \ell, n)$ [18] i.e. $Z_{nl} = Z_{n+l} - 1$. Quamquam in Adn. [15] iterum iterumque subnotatum est quod regula $(n + \ell, n)$ [18] solum apud libros studiosŌrum gratiă scriptos vera est, et etiam, quod aliquibus viris chemicis placet ipsa regula ex legibus physicae derivata non esse, ambae sententiae haud omnino verae sunt. Quoad $(n + \ell)$ -partem istae regulae, V.Cl. Kletchkowskij stricte ostendit [19], numerum statuum ad valorem datum $(n + \ell)$ is spectantium computens, numerum Z_{n+l} simplicissimă functione (Kletchkowskiis) exprimi posse:

$$K(y) = \frac{y^3}{6} \begin{cases} -\frac{y}{6} & \text{pro } y \text{ impari,} \\ +\frac{y}{3} & \text{pro } y \text{ pari} \end{cases} \quad (8)$$

nempe $Z_{n+l} = K(n + \ell) + 1$ et enim numerus quaesitus Z_{nl} simpliciter valori $K(n + \ell)$ aequat; combinationem autem congruam n et ℓ seligere oportet. Porro, func-

⁴ Olim, dependentia ab $Z - Z_{nl}$ adhibita erat in Adn. [17] analyzi proprietarum Lanthanoidum Actinoidumque.

⁵ Exemplum est segmen elementŌrum transitiivŌrum: pro eŌrum corticulă $3d$ $Z_{3d} = 20$ quia Ca est ultimum elementum istud segmen praecedens.

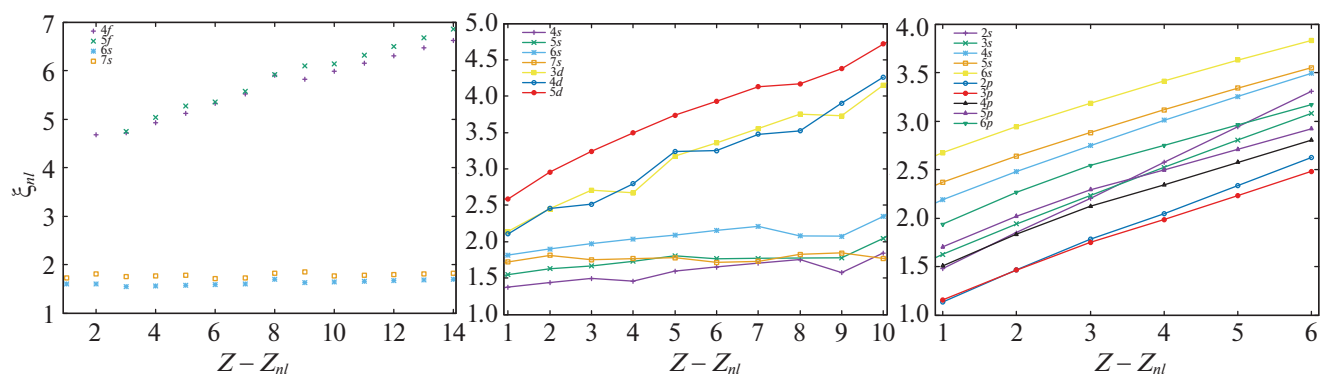


Fig. 4. Dependētia selectōrum exponentium orbitalium MAP-ianōrum in segminibus f - (sinistrō), d - (mediō) et p -elementōrum (rectō) ab onere corculanēo efficiēti $Z - Z_{nl}$.

tio K atque valores $Z_n = K(n + 1) - 1$, apud quos electron numerō quanticō n (et enim $\ell = 0$) primum apparet, recte in omnibus casibus reproducit, ita limites periodōrum Tabulae Elementōrum indicans. Itaque, Tabula 3 monstrat atomos neutrales $(n + \ell)$ -regulam perfecte sequi.

Exceptiones autem ex $(n + \ell; n)$ -regulā tantum ejus n -pars attingunt. Illas in lineis $(n + \ell) = 7; 8$ occurrentes pertinent modo ordinem in quo orbitalia $4f$ et $5d$ ($5f$ et $6d$) implescuntur, non ipsum valorem $Z_{(n+\ell)}$ ubi electrones cum $(n + \ell) = 7, 8$ primum appaerant. Ista exceptiones minus ad rem pertinent. Enimvero, deviatō ab n - (sub)regulā generalis regulae $(n + \ell, n)$, quam in experimentis observamus, posset ab interactionibus (correlationibus) electronum pendere vel manifestatio motūum relativisticōrum esse. Neutra possunt numeros statūum alterūtris numeris quanticis computandō (ut Kletchkowskij fecerat) reproductā esse. In altera parte, orbitaliā Kogaensīā pro Lanthanoidis Actinoidisque determinata aliquam informationem respectu correlationum vel motūum relativisticōrum implicite continent. Hoc evenit quia status imos istārum atomōrum pro quibus orbitaliā determinatā sunt manū propriā auctorum [13] selectos erant in concordīā cum experimentibus. Ergo in Fig. 4 praesentāmus dependentias ξ_{nl} a $Z - Z_{nl}$ in segminibus respondentibus f -, d - ac p -elementis (ubi f -, d - ac p -corticulae apertae sunt). Effectus perfecte illud quod quisque expectare possit monstrant.

Nempe, notitiae ad f -elementā (Lanthanoidā ac Actinoidā – Fig. 4 sinistrō) spectatnes sunt simplicissime interpretatu. Ut ex Fig. 4 videtur, valores exponentium ξ_{4f} ac ξ_{5f} et similiter ad ξ_{6s} ac ξ_{7s} respective fere coincidunt pro Lanthanoidis ac Actinoidis. Etiam magis, exponentes ξ_{ns} ; $n = 6; 7$ a $Z - Z_{nl}$ paene non pendant. Contrarie, quamquam exponentes ξ_{4f} ac ξ_{5f} aequalibus $Z - Z_{nl}$ inter se paene coincidunt, eōrum valores illō efficiēti onere corculi notabiliter quasi lineariter crescunt. Corollarium simplicissimum ex

hōc, ad physicam vel chemiam spectans, sonat: radii atomici Lanthanoidōrum ac Actinoidōrum (id est, veri atomōrum radii qui statim corticulis exterrimis determinantur) inter sē coincidunt (secundum notitias, in bases Kogaensibus hārum atomōrum, condensatas) et, preaterea, a $Z - Z_{nl}$ non pendant. Contrarie, radii ionici hōrum elementōrum ionum onere $3+$, cujus corticulae exterrimae nf sunt, efficiēte onere corculi $Z - Z_{nl}$ crescente, decrescunt, quia crescentibus ξ_{nf} inverse proportionales sunt sic *contractionem Lanthanoidicam* (et fortasse *Actinoidicam*) manifestantes. Ad dendi gratiā notemus, exponentibus numeris quanticis $n = 6, 7$ ad orbitalia s ac illi numeris quanticis $n = 4, 5$ ad orbitalia f respective coincidentibus, unica possibilitas aliquam differentiam inter Lanthanoidā et Actinoidā reproducendi manet in differentiā numerōrum nodōrum eā respective habent. Haec conclusio atque ex notitiis in basibus Kogaensibus condensatis derivata est.

Pictura omnino mūtabitur cum corticulas nsp (Fig. 4 recto) spectaverimus. Ibi exponentes ns vel np fere lineariter cum $Z - Z_{nl}$ crescunt. Notabilissime flexus pro s - et p -orbitalibus quasi congruunt cum tantum duābus exceptionibus. Altera est intersectio dependentiarum a $Z - Z_{nl}$ exponentium pro corticulis $2p$ et $3p$ (duae lineae imae in Fig. 4 recto), quae nimis propincae sunt ad aliquam intersectioni interpretationem dandam. Alteraque est dependentia relative fortis exponentium ξ_{2s} (!) qui citius quam alii cum $Z - Z_{nl}$ crescunt et respectivas lineas, dependentias exponentium corticulārum $5p$, $4p$ et $3s$ depingentes, intersectat. Extra exceptiones annotatas exponentes orbitalium ξ_{ns} et ξ_{np} , $Z - Z_{nl}$ crescente, parallele crescunt autem monstrantes dependentiam notabilem ab n quae abest in segminibus Lanthanoidōrum ac Actinoidōrum.

Elementā transitivā, ut Fig. 4 (medio) monstrat, positionem medialem inter nf et nsp tēnent. In respectivis segminibus exponentes orbitalium ns teniter crescunt manentibus in fauce angustā autem cum incremento visibili inter $n = 4$ et $n = 6$ quamvis illi pro

$n = 5; 7$ fere haud differunt inter se. Exponentes orbitalium nd ($n = 3-5$) crescunt plusminusve lineariter, sed dispersio cirtiter hypotheticam lineam rectam manet aspectabilis. Notanda est atque differentia minimalis inter valoribus exponentium $3d$ et $4d$ adversus notabilem incrementum ad illos pro $5d$.

Generaliter dependentiae $\xi_{n\ell}$ ä $Z - Z_{n\ell}$ notitiis in copiis basalibus Kogaensibus condensatis confirmant observationes Adn. [15, 16] contraponentes orbitaliä *sp* et *df*. Atque clare videtur modus variandi exponentium MAP-ianörum cum dependentiis quasi-lineariibus electronegativitatis Pearsonis monstratis in Fig. 22 Adn. [15] congrüere. Notitae ex orbitalibus Kogaensibus extractae porrigunt ad numerum quantum principalem $n = 7$ quod est autem numerus periodi Tabulae Periodicae scansus copiä orbitalium Kogaensium. Expectari licet periodicitatem in sensu chemicö se manifestare in notitiis ita abundantibus. Id videtur ita esse in notitiis Fig. 4. Secundum eas, periodicitas in casu *f*-elementörum perfecta est, quia exponentes pro atomis cum aequalibus valoribus $Z - Z_{n\ell}$ simpliciter coincidunt: omnino formalis characteristica functionum periodicarum. Similiter *ns* exponentes pro atomis elementörum transitivörum cum aequalibus valoribus $Z - Z_{n\ell}$ proximi sunt et ita atque nd exponentes.

Pro *p*-elementis periodicitas chemica in copiis basalibus condensata aliter manifestari videtur. Exponentes orbitalium $2p$, et $3p$ fere coincidunt et similiner $4p$, et $5p$, qui paucem incrementum respectu illörum cum $n = 2; 3$ acquirunt. Atque exponentes pro orbitalibus $6p$ per quedam constantem incrementum ab illis pro $5p$ differunt.

Quoad rimam energeticam in Adn. [15, 16] observatam inter corticulas np et $(n + 1)s$, eäm in notiis extractis ex copiis basalibus Kogaensibus non videmus. Nempe ξ_{2p} ($Z - Z_{2p} = 6$) (finis periodi 2ⁱ) magis nequaquam minus est quam ξ_{3s} ($Z - Z_{3p} = 1$) qui vicissim magis debeat esse quam ξ_{3s} ($Z - Z_{3s} = 1$) (initium periodi 3ⁱ). Sub hypothesi aeq. (2) id significet rimam $2p-3s$ negativam esse. Simile occurrit atque pro pari corculae $3p-4s$. Solum pro paribus $4p-5s$ et $5p-6s$ possumus rimam positivam exspectare si notitiis in copiis Kogaensibus condensatas innitëbamur.

Aliquis expectare poterit in ita expansä notiärum copiä quaedam signa perioditatis duplicis [20] invenire. Haec spes, tamen, justificaca esse non videtur. Secundum descriptionem superiorem exponentes pro orbitalibus np in dyadis cum sequentibus valoribus n ; $n + 1 = 2k$; $2k + 1$ aggregantur ita, sui generis, periodicitatem duplam simulant. Notandum est interdum quod aggregatio in Adn. [20] proposita non ad sequentes (pares *cum* imparibus) sed ad alternantes (pares *contra* impares) periodos attinet. Itaque, quomquam quaedam aggregatio elementorum respectu n , suppletiva ergä communem, oritur ex dependentiis exponentium $\xi_{n\ell}$ ä $Z - Z_{n\ell}$, ea cum hypothesi originali Adn. [20] non conformat. Curiose, aggregatio in dya-

des sequentium periodorum (parium impariumque) atque functione Klechkowskiis explanatur quae se differenter habet pro paribus imparibusve argumentibus. Haec omnia profundiolem investigationem requirat, quam deferemus ad futurum.

3. COROLLARIA

1. Productum Frobenianum aeq. (6) matricum formae aeq. (5) ex vectoribus differentiarum copiärum $\{\beta\}$ et $\{\mu\}$ exstructarum vel angulum Frobenianum aeq. (7) inter subspatiä his copiis prognatis instrumentä non inutilia collationi variarum vectorum copiärum esse monstravimus.

2. Forma MAP-iana aeq. (3) est ceterum orbitalium forma vere numerum minimum parametrörum habens et simul numerum nodörum correctum.

3. Producti Frobeniani auxiliö valores exponentium orbitalium MAP-ianörum optime orbitaliä Bungenianä ad elementä H-Xe vel Kogaensia ad elementa H-Lr representantes obtinuimus.

4. Höc modö qualitates omnium dilectüum orbitalium basalium investigari possunt. Vere, ad dilectus basales Bungenianos ac Kogaenses angulus Frobenianus inter eös et dilectus basales MAP-ianos exponentium orbitalium optimalium est ca. 15° quod respondet 3-5%-örum densitatis electronicae amissioni apud projectionem in bases MAP-ianas statium repraesentatörum in basibus Bungenianis ac Kogaensibus.

5. Generaliter, ambae copiae orbitalium i.e. Bugneniana ac Kogaensis, dependentiam regularem a Z exponentium MAP-ianörum ex illis extractörum monstrant. Per hanc ostendimus rationem orbitaliä atomicä in formä MAP-ianä presentandi inutilem non esse, quia itaque (in)congruentia variarum orbitalium copiärum investigari potest.

6. Valores exponentium orbitalium MAP-ianörum minimizatione anguli Frobeniani extracti ut functiones Z^{ae} oboediunt regulas lineares magna cum praecisione, sicut generaliter regulae Slateri praescribunt, structuram generalem Tabulae Periodicae reproducentes. Notabilissimae differentiae sunt (i) pro $n \leq 4$ n^* sunt proximi ad ipsos n (Slater praescribit e.g. $n^* = 3.7$ pro $n = 4$); (ii) pro $n \geq 5$ n^* sunt multo minus quam n etenim minus quam 4.

7. Consideratio dependentiarum exponentium MAP = ianörum $\xi_{n\ell}$ ex basisbus Kogaensibus extractörum ab onere corculaneö efficienti $Z - Z_{n\ell}$, ubi valores characteristicos $Z_{n\ell}$ reductä regulä ($n + \ell$; n) vel Kletschkowskiis functione determinantur, perfectam illörum periodicitatem probant.

Gratiae

Ніс opus perfectus est secundum pensum rei publicae Russiae № 122011300053-8 "Phenomena super-

Tabula 1. Parametră accommodationis dependentiarum exponentium MAP-ianōrum $\xi_{n\ell}$ ā Z ad variā intervallā Z inventa ex conditione minimi anguli Frobeniani cum orbitalibus Bungenianis secundum aeq. (7) cum ipsōrum erroribus δ ac R^2 criterii valoribus et parametris Slaterianis $n_{n\ell}^*$, $\sigma_{n\ell}$

$n\ell$	Z		$a_{n\ell}$	$b_{n\ell}$	$\delta(a_{n\ell})$	$\delta(b_{n\ell})$	R^2	$n_{n\ell}^*$	$\sigma_{n\ell}$
1s	2:	He–Xe	1.0143	–0.45	0.0010	0.03	0.999951	0.986	
2s	3:10	Li–Ne	0.3674	–0.36	0.0009	0.01	0.999967	1.973	0.275
	10:	Ne–Xe	0.5069	–1.64	0.0008	0.03	0.999909		
3s	11:18	K–Xe	0.3034	–2.81	0.0048	0.07	0.998491	3.083	0.064
	19:	Na–Ar	0.3243	–2.34	0.0023	0.09	0.998235		
4s	20:30	Ca–Zn	0.05414	0.24	0.0013	0.03	0.994975	3.733	0.798
	30:	Zn–Xe*	0.2679	–6.03	0.0032	0.14	0.996895		
5s	38:48	Sr–Cd*	0.0591	–0.76	0.0032	0.14	0.976638	4.038	0.761
	48:	Cd–Xe	0.2477	–9.78	0.0078	0.40	0.995013		
2p	5:10	B–Ne	0.2943	–0.31	0.0053	0.04	0.998712	1.960	0.423
	10:	Ne–Xe	0.5102	–2.30	0.0006	0.02	0.999938		
3p	13:18	Al–Ar	0.2622	–2.22	0.0064	0.10	0.997603	3.022	0.208
	19:	K–Xe	0.3309	–3.70	0.0027	0.10	0.99766		
4p	31:36	Ga–Kr	0.2550	–6.35	0.0102	0.34	0.993685	3.814	0.027
	37:	Rb–Xe	0.2622	–6.51	0.0049	0.22	0.994449		
5p	49:	In–Xe	0.2390	–9.95	0.0107	0.55	0.992118	4.185	
3d	21:30	Sc–Zn	0.2171	–2.32	0.0058	0.15	0.994392	2.641	0.427
	30:	Zn–Xe	0.3787	–7.13	0.0029	0.12	0.998638		
4d	39:45	Y–Rh	0.2535	–7.70	0.0108	0.46	0.990943	3.247	0.177
	46:	Pd–Xe	0.3080	–10.47	0.0039	0.19	0.998893		

* Sine Palladio ($Z = 46$).

ficialiā in systematibus dispersis ac colloidalibus; mechanica physico-chemica; processus adsorptionales ac chromatographici”. Calculationes praecipue in Luteia Parisiorum sunt performatae cum foederationis IP-2CT adjuto, cui P.R. multas gratias agit.

Notae

ⁱ Quoad terminologiam generalem chemiae quanticae Adn. [21] sequimur.

ⁱⁱ Quoad terminos hodiernos ad chemiam theoreticam spectantes Adn. [22] sequimur.

ⁱⁱⁱ Quoad terminologiam mathematicam Adn. [23, 24], quantum fieri posset, sequimur.

^{iv} Ut manuale generale stylisticum Adn. [25–27], quantum fieri posset, sequimur, cum exceptionibus:

- Signa vocalium correptarum ac productarum adhibimus ut e.g. Abl. Sing. ab Nom. Sing. vel nom. et Acc. Plur. Neut. vel formae verbalia etc scriptae distin-

quantur. Tronskij [28] (§ 103) scribit (fontem haud indicans) Quintilianum suadere in omnibus casibus, ubi indiscretio correptatis productatisve in scribendo ad confusionem ducere possit, signa respectiva inserere.

- Utemur i/j et u/v ut in scripturis scientificis saeculorum AD XVII–XIX.

- Saepius quam Classici ([29] §1113) utemur Gerundio in Gerundivum non converso. Ut in Adn. [27] nōtētur, hodie nemo scit, *cur* Caesar et Cicero Gerundium in Gerundivum conversarent. Quis est illōrum, qui hodie scripturas Caesari Ciceronisque imitare cōnantur, eorum morte mortuōros esse velit?

- Dēclīnāmus nomina vernacularia: masculina in -er, -or secundum Decl. II (vid. [24] “series Taylori”), aliā secundum Decl. III.

- Ut in Adn. [30] notum est, in aeonibus praeclasticis in quaestionibus obliquis Conjunctivus obligatorius non erat, sed secundum sensus ādhībēbātur. Id magna calamitas non est si scriptura scientifica aliquantulum archaice videtur. Ergo nonnumquam In-

Tabula 2. Parametră accommodationis dependentiarum exponentium MAP-ianōrum $\xi_{n\ell}$ ā Z pro differentibus intervallis Z extracta ex conditione minimi anguli Frobeniani cum orbitalibus Kogaensibus secundum aeq. (7) cum ipsōrum erroribus δ ac R^2 criterii valoribus et parametris Slaterianis $n_{n\ell}^*$ et $\sigma_{n\ell}$. Columna “sup” continet “+” si intervalli confidentiales pro $a_{n\ell}$; $b_{n\ell}$ ex copiis orbitalium Bungenianōrum (Tabula) ac Kogaensium (haec Tabula) deducti intersecuntur et “-” si non. Ista cellula manet vida si notitiae necessariae desunt in Tabula

$n\ell$	Linea	Z		$a_{n\ell}$	$b_{n\ell}$	$\delta(a_{n\ell})$	$\delta(b_{n\ell})$	R^2	sup	$n_{n\ell}^*$	$\sigma_{n\ell}$
1s	1	2:	He–Lr	1.0070	–0.32	0.0002	0.01	0.999995	–	0.9931	
2s	2	3:10	Li–Ne	0.3674	–0.36	0.0009	0.01	0.999967	+	1.9821	0.2718
	3	10:	Ne–Lr	0.5045	–1.60	0.0003	0.02	0.999975	+		0
3s	4	11:18	Na–Ar	0.3034	–2.34	0.0048	0.07	0.998491	+	2.9833	0.0948
	5	19:	K–Lr	0.3352	–3.19	0.0006	0.04	0.999782	–		0
4s	6	20:28	Ca–Ni	0.0562	0.18	0.0040	0.10	0.965494	+	4.0297	0.7734
	7	31:	Ga–Lr	0.2481	–5.20	0.0008	0.06	0.999222	–		0
5s	8	39:48	Y–Cd	0.0372	0.15	0.0100	0.44	0.696613	+	3.8993	0.8245
	9	49:57	In–La	0.2766	–11.25	0.0164	0.87	0.982779			–0.3038
	10	59:68	Pr–Er	0.0812	–0.16	0.0004	0.03	0.999832			0.6173
	11	72:80	Hf–Hg	0.1889	–7.64	0.0038	0.29	0.997136			0.1096
6s	12	81:	Tl–Lr	0.2121	–9.21	0.0036	0.33	0.993951			0
	13	56:70	Ba–Yb	0.0143	0.69	0.0003	0.02	0.996536		3.6659	0.9474
	14	72:77	Hf–Ir	0.0614	–2.51	0.0013	0.10	0.998132			0.7748
	15	80:90	Hg–Th	0.2728	–19.47	0.0069	0.59	0.99426			0
16	91:	Pa–Lr	0.0731	–1.58	0.0044	0.42	0.962348			0.7320	
7s	17	89:102	Ac–No	0.0062	1.18	0.0024	0.23	0.385791		–	–
2p	18	5:10	B–Ne	0.2943	–0.31	0.0053	0.04	0.998712	+	1.9728	0.4193
	19	11:	Na–Lr	0.5069	–2.21	0.0001	0.0	0.999994	–		0
3p	20	13:18	Al–Ar	0.2622	–2.22	0.0064	0.10	0.997603	+	2.9574	0.2246
	21	19:	K–Lr	0.3381	–3.96	0.0005	0.04	0.999788	+		0
4p	22	31:36	Ga–Kr	0.2550	–6.35	0.0102	0.34	0.993701		4.0152	0.0233
	23	37:	Rb–Lr	0.2491	–5.91	0.0009	0.07	0.999065	+		0
5p	24	49:57	In–La	0.2578	–10.91	0.0065	0.34	0.995587	+		0.0412
	25	59:70	Pr–Yb	0.0642	0.04	0.0005	0.03	0.999503			0.7614
	26	71:80	Lu–Hg	0.1914	–8.83	0.0021	0.16	0.999009		3.7190	0.2882
	27	81:89	Tl–Ac	0.2689	–14.81	0.0012	0.11	0.99985			0
6p	28	89:	Ac–Lr	0.1870	–7.48	0.0014	0.13	0.999316			0.3045
	29	81:89	Tl–Ac	0.2565	–18.81	0.0063	0.53	0.995854		3.6659	0.0596
	30	89:	Ac–Lr	0.0597	–1.20	0.0039	0.37	0.94795			0.7811
3d	31	21:28	Sc–Ni	0.2291	–2.64	0.0147	0.36	0.975764	+	2.8579	0.3452
	32	29:	Cu–Lr	0.3499	–5.92	0.0009	0.06	0.999523	–		0
4d	33	39:45	Y–Rh	0.2296	–6.81	0.0194	0.82	0.965571	+	3.7350	0.1426
	34	46:56	Pd–Ba	0.3175	–11.00	0.0048	0.25	0.997912			–0.1860
	35	57:71	La–Lu	0.2080	–4.93	0.0068	0.45	0.989369			0.2229
	36	71:	Lu–Lr	0.2677	–8.87	0.0009	0.09	0.999621			0
5d	37	71:77	Lu–Ir	0.2528	–15.27	0.0128	0.94	0.987415		3.4821	0.1197
	38	78:88	Pt–Ra	0.2872	–18.24	0.0039	0.32	0.998335			0
	39	89:	Ac–Lr	0.1582	–6.41	0.0113	1.09	0.937314			0.4490
6d	40	89:	Ac–Lr	0.0153	1.46	0.0154	0.42	0.705118		–	–
4f	41	58:70	Ce–Yb	0.1760	–5.63	0.0038	0.25	0.995303		3.2224	0.4328
	42	tt	Lu–Th	0.2868	–13.27	0.0020	0.17	0.999131			0.0757
	43	91:	Pa–Lr	0.2785	–11.91	0.0010	0.10	0.999852			0.1025
	44	71:	Lu–Lr	0.3103	–15.09	0.0030	0.26	0.997181			0
	5f	45	91:	Pa–Lr	0.1885	–12.31	0.0057	0.55	0.990095		–

Tabula 3. Valores characteristicis numerōrum atomicōrum $Z_{n+\ell}$; Z_n primarii adventi electronum datis valoribus ($n + \ell$) vel n auxiliō functionis Klechkowskiis calculati atque symbolā elementōrum et configurationis electronicae respectivae

$n + \ell; n$	$\frac{Z_{n+\ell}}{Z_n}$		
1	1	H	1s ¹
2	3	Li	[He]2s ¹
3	5	B	[Be]2p ¹
	11	Na	[Ne]3s ¹
4	13	Al	[Mg]3p ¹
	19	K	[Ar]4s ¹
5	21	Sc	[Ca]3d ¹
	37	Rb	[Kr]5s ¹
6	39	Y	[Cd]4d ¹
	55	Cs	[Xe]6s ¹
7	57	La	[Ba]5d ¹
	87	Fr	[Rn]7s ¹
8	89	Ac	[Ra]6d ¹

dicativo in quaestionibus obliquis utemur si de factis sed non de opinionibus agitur.

REFERENCES

1. *Hehre W.J., Stewart R.F., Pople J.A.* // J. Chem. Phys. 51 (1969) 2657.
2. *Nagy B., Jensen F.* // Reviews in Computational Chemistry, A.L. Parrill, K.B. Lipkowitz Eds. 30 (2017) 93–149.
3. *Bunge C.F., Barrientos J.A., Bunge A.V.* // At. Data Nucl. Data Tables 53 (1993) 113–162.
4. *Froese-Fischer C.*, The Hartree-Fock Method for Atoms: A Numerical Approach, Wiley Intersciences, New York, (1977).
5. *Blum V., Gehrke R., Hanke F. et al.* // Comp. Phys. Comm. 180 (2009) 2175–2196.
6. *Popov I.V., Tchougréeff A.L.* // Theor. Chem. Acc. 138 (2019) 9.
7. *Reinhardt P., Popov I.V., Tchougréeff A.L.* // Int. J. Quant. Chem. 121 (2021) e26687.
8. *Фок В.А., Петрашень М.И.* // ЖЭТФ 4 (1934) 295 – 325 (engl. version: Phys. Zs. Sowj. 6 (1934) 368).
9. *Hoffmann-Ostenhoff M., Hoffmann-Ostenhoff Th.* // Phys. Rev. A 16 (1977) 1782.
10. *Ahlich R.* // Chem. Phys. Lett. 18 (1973) 521.
11. *Slater J.C.*, Quantum Theory of Atomic Structure, Vol. 1, McGraw Hill (1960).
12. *Reinhardt P., Popov I.V., Tchougréeff A.L.* // Int. J. Quant. Chem. 121 (2021) e26690.
13. *Koga T. and Thakkar A.J.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29 (1996) 2973.
14. *Slater J.C.* // Phys. Rev. 36 (1930) 57.
15. *Cao C., Hu H., Li J., Schwarz W.H.E.* // Pure and Applied Chemistry 91 (2019) 1969–1999 <https://doi.org/10.1515/pac-2019-0901>.
16. *Cao C., Vernon R.E., Schwarz W.H.E., Li J.* // Frontiers in Chemistry 8 (2021) 813 <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00813>.
17. *Ионова Г.В.* // Усп. хим., 59 (1990) 66–85 (engl. version: Russian Chem. Reviews, 59 (1990) 39-51); *Ионова Г.В., Вохмин В.Г., Спицын В.И.* Закономерности изменения свойств лантанидов и актинидов, М.: Наука (1990).
18. *Madelung E.*, Die Mathematischen Hilfsmittel des Physikers, 6. revidierte Auflage. Springer-Verlag, Berlin, Goettingen, Heidelberg (1957).
19. *Klechkovsky V.M.* // J. Exper. Theoret. Phys. USSR 41 (1962) 465.
20. *Бирон Е.В.* // ЖРФХО, ч. хим. 47 (1915) 964–968.
21. *Suard M., Berthier G., Del Re G.* // Theor. Chem. Acta 7 (1967) 236–244.
22. https://la.wikipedia.org/wiki/Chemia_theoretica
23. *Caraffa A.*, Elementorum Matheseos Partes Prima et Secunda, Romae, Ioannes Ferretti (MDCCCXXXV).
24. *Caraffa A.*, Principia Calculi Differentialis et Integralis itemque Calculi Differentiarum Finitarum, Romae, Ioannis Baptistae Marini et Socii (MDCCCXLV).
25. *Minkova M.*, Introduction to Latin Prose Composition, Mundelein, IL, USA, Bolchazy-Carducci Publishers Inc. (2009).
26. *Allcroft A.H., Collins A.J.F.*, Higher Latin Composition, London, Drury Lane, W.C.: W. B. Clive University Tutorial Press Ltd. (1911).
27. *Albanus A.*, Ars Grammatica, М.: Греко-латинский кабинет Ю.А. Шичалина (2004).
28. *Тронский И.М.*, Историческая грамматика латинского языка, Москва, URSS (2019).
29. *Соболевский С.И.*, Грамматика латинского языка. Теоретическая часть: Морфология и синтаксис, Москва (1948).
30. *Таривердиева М.А.*, От латинской грамматики к латинским текстам, М.: Гуманитарный издательский центр ВЛАДОС (1997).