ЖУРНАЛ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ, 2022, том 96, № 9, с. 1330–1340

СТРОЕНИЕ ВЕЩЕСТВА И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

Dedicatum Viro Clarissimo ac Doctissimo Professori Doctori W.H. Eugeniō Schwarzi occasione ejus diei natali octagintesima quinta

ORBITALIĂ ATOMICĂ BUNGENIANĂ AC KOGAENSIĂ ANGULŌ FROBENIANŌ CUM ORBITALIBUS MOSCOVIAE-AQUISGRANAE-PARISIORUM LUTETIAE (MAP) DICTIS INVESTIGATĂ**

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: tchougreeff@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 subspatiă functionaliă prognată 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 exsistenti 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 segmină respondentiă p-, d- (transitionă) et f- (Lanthanoidă ac Actinoidă) 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 предписаные 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 atomicōrum[i] circumsunt quibus ad computationes perducendas valde utuntur [1, 2]. Efficientiae numericae causā istae copiae ex functionibus Gaussianis exstructentur. Eārum parametri: Gaussianārum exponentes ac contractionis coëfficientes separatim nullam physicam significationem habent. Vir clarissimus Carolus Bunge cum collaboratoribus jam A.D. 1993 methodō Hartree—Fockis orbitaliă atomică 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. Illă orbitaliă atomică, ab hōc infrā Bungeniană nuncupată, aliă orbitaliă, numerice cognotă [4, 5], magna cum subtilitate reprodūcunt, et per hoc pro accuratissimis formae simplicissimae, id est evolutionem brevissimam per orbitaliă Slateri possidentibus, haberi possunt. At, quamquam orbitaliă Bungeniană breve monomialibus Slateri repraesentantur, nullum parametrum hōrum orbitalium – vel exponentes orbitales vel coëfficientes expansionum – significationem physicam habent. In dissertatiunculis nostris [6, 7] formā orbitalium magis simplificatā, primō ā V.Cl. V.A. Focke propositā [8], utebamur ad systematā orbitalium atomicōrum orthonormalium exstruendā modo unō parametrō per corticulam atomicăm numeris quanticis $n\ell$, demum exponenti orbitali $\xi_{n\ell}$, descriptā. Huic parametro significatio physica jam adscribi potest secundum v. gr. Adn. [9, 10] ope:

$$\xi_{n\ell} \approx \sqrt{2\mathrm{PI}_{n\ell}}, \tag{2}$$

ubi $\mathrm{PI}_{n\ell}$ est potential ionizationis ex corticulā $n\ell^{\text{isimā}}$. Ad perveniendum illi metae posuĭmus functiones radiales atomicas $R_{n\ell}(r)$ polynomiă gradūs ($n-1$) r^{ae} functionibus $\exp(-\xi_{n\ell}r)$ multiplicată esse. Pro quōvis valore numeri quantici azimutalis 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, pōnĭmus orbital atomicum formae

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

esse, quod normalizatum sit, et ubi $P_{n\ell}(x)$ sunt polynomiă in Adn. [6] descriptă. Pro $n=\ell+1$ modo unum membrum exsistat cujus coëfficiens numericus unitatem esse pōnĭmus: $P_{\ell+1\ell}(x) \equiv 1$; itaque functio $R_{\ell+1,\ell}(r)$ sola functio Slateri est. In aliis polynomiis $P_{n\ell}(r)$ pro datō ℓ, coëfficiente apud r^0 pro unitate positō, hujus polynomii alios coefficientes ex conditione orthogonalitatis functionum $R_{n\ell}(r)$ pro valoribus $n>\ell+1$ determinare possumus. Haec orbitalium forma MAP ā nobis nuncupata est dedicationis oppidibus nostris causā et ad eārum formam quod illam numeri *M*inimali *A*tomicōrum *P*arametrōrum significandam.

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

$$\xi_{n\ell} = a_{n\ell}Z + b_{n\ell} \tag{4}$$

sequi. Flexūs $a_{n\ell}$ intersectionesque $b_{n\ell}$ (cum ordinatā)[iii] proprii sunt segminĭbus Tablulae Periodicae Elementōrum, ubi corticula numeris quanticis $n\ell$ dum implenda est (i.e. aperta) aut ubi eădem 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 orbitaliă atomică Bungeniană pro datis, possumus exponentes $\xi_{n\ell}$ invenire nunc ex conditione maximi superpositionis inter orbitaliă MAP-iană et Bungeniană (vel aliquas alias datas copias). Instrumentum numericum ad hōc utile productum Frobenianum ex matricicibus operatōrum in spatiō Hilbertianō L^2 agentium est. Id copias vectōrum, quibus haec subspatiă 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 operatores in L^2 (aequaliter matrices)

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

definire. Quivis operatores lineares quoque spatium vectoreum formant, quia summa duōrum talĭum operatorum et productum ex operatore et numerō (complexō) ipsi sunt operatores. Producti ex duōbus operatoribus **C** et **D** *tractus* – $\mathrm{tr}(\mathbf{C}^{\dagger}\mathbf{D})$ – definit productum scalarem ex operatoribus, faciens ex iīs spatium vectoreum Euclideanum. Illud omnias 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 operatores cum matricibus $\mathbf{M}_{\lambda\kappa} = \langle\lambda|\mathbf{M}|\kappa\rangle$ et similiter **B** adhibitā, obtĭnēmus:

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

ubi copiae $\{|\lambda\rangle\}$ et $\{|\kappa\rangle\}$ sunt separatim completas orthonormales 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 eō ipsō: $|\mathbf{C}| = \sqrt{\mathrm{tr}(\mathbf{C}^{\dagger}\mathbf{C})}$; quae nota est ut Frobeniana norma. Ergo angulus Frobenianus φ_{MB} inter duo subspatiă definiri potest ope:

[1] Hinc notatione Diraciana "un-cas" utemur.

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

quae definitio ā 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 **M** vel **B** haud necessare 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 quamdam probabilitatem interpretari sinit.

Si vectores copiae $\{|\mu\rangle\}$ ā quibusquid parametris 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, orbitaliă MAP-iană 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] ā nobis ex conditione minimi anguli (maximi cosini) inter subspatiă 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, orbitaliă Kogaensiă [13] habentes pro datis, et angulum Frobenianum inter illă et orbitaliă MAP-iană minimizantes respectu hōrum exponentium. Atque, investigamus regulas, quas exponentes MAP-iani, determinati ex orbitalibus Bungenianis ac Kogaensibus, sequuntur ut functiones ā Z.

2. EFFECTŪS AC DELIBERATIO

Primō, exponentes, jam in Adn. [12] pro atomis Z = 1–54 ex orbitalibus Bungenianis inventos, consideravimus. Eōrum dependentiae ā Z in Fig. 1 monstratae sunt et parametră accommodationum (flexus ac intersectiones aeq. (4)) in Tabulā 1 collocată 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 5*s* (et multo minus 4*s*) ā lineā rectā delabitur, quia hujus atomi configuratio electronica in ejus statū imō modō implendi (*Aufbauprinzip*), cui alteri atomi parent, non ŏboedit. Has duas exponentes ex flexūum ac intersectionum accommodatione exclusĭmus.

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 iīs 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, siginificat. 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) sĕqui.

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 ā 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 acquīrit in intervallō numerōrum atomicōrum Z = 1–54. Sic uniformitas ap-

[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 ortogonales. Tunc, quōmodo in Adn. [12] dictum est, summae quadratorum elementorum utraeque matricum **M** vel **B** aequales sunt dimensionibus m vel b subspatiōrum copiis $\{|\mu\rangle\}$ (vel $\{|\beta\rangle\}$) prognatōrum; eārum normae Frobenianae sunt radices quadratae m^{ae} ac b^{ae}. In casu generali in aeq. (7) summae quadratōrum elementōrum matricum Gramianārum copiārum $\{|\beta\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$ sub signis radicis stant.

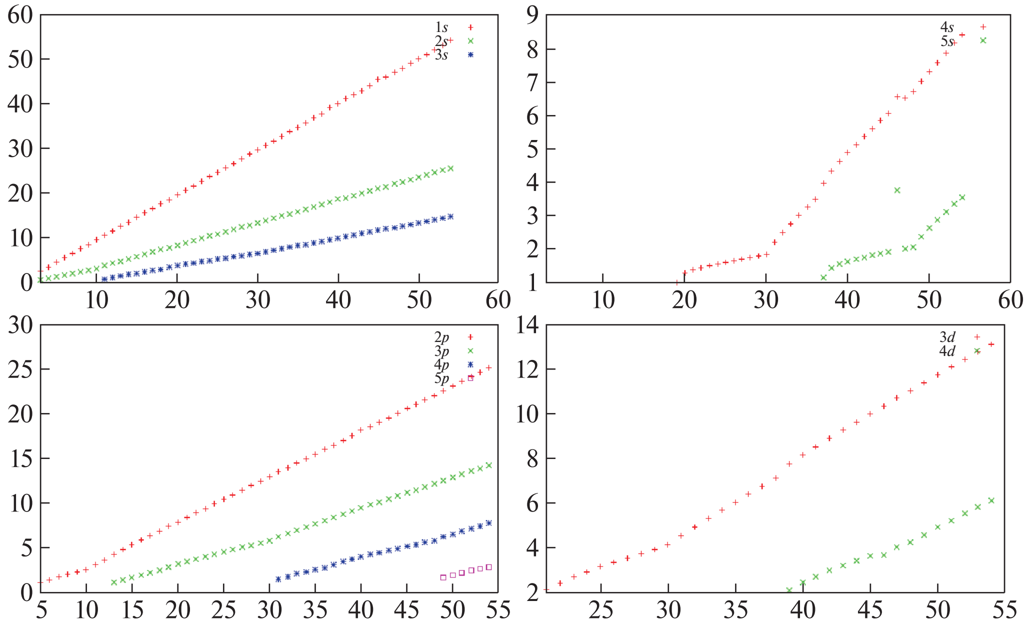

Fig. 1. Dependentiae exponentium $\xi_{n\ell}$ ex orbitalibus Bungenianis determinatōrum ab onere nucleari Z (numerō atomicō) pro corticulis $n\ell$. Acies summa: 1*s*—3*s* — sinistrō; 4*s*—5*s* — rectō; acies ima: 2*p*—5*p* — sinistrō; 3*d*—4*d* — rectō.

proximationis orbitalium Bungenianōrum vel Kogaensium per orbitalia MAP-iana exprobata est.[3]

Dependentiae exponentium MAP-ianōrum $\xi_{n\ell}$ ab onere nucleare Z, in hāc disseratatiunculā obtentae ex orbitalibus Kogaensibus, in Fig. 3 depictae sunt. Eārum coëfficientes — aeq. (4) — aestimationesque eōrum errōrum in Tabulā 2 confĕrĭmus. Ad quantitates $a_{n\ell}$ et $b_{n\ell}$ determinandas, punctă, 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 punctă adhiberi possunt ad dependentiam ā Z statuendam. Similiter, atomi cum $Z = 46$ (Pd) sicut $Z = 57, 58, 64$ (La, Ce, Gd), quae fortuite (vide infra) electronă in corticulis *d* accĭpiunt, ex accommodatione exclusae sunt.

In Fig. 3 clare videmus exponentes regulas Slateri generalizatas sequi: id est flexus in segminĭbus ad corticulas apertas spectantibus minor sunt quam in segminĭbus corculaneis (completis). Atque, elementă transitiva ac Lanthanoidă/Actinoidă dependentiam 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 segminĭbus corticulis inferioribus *d* vel *f* forte ab nucleis absteguntur.

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 dependentiae $\xi_{n\ell}$ ā Z non duo sed plurima segmina habent, certe ad elementă transitivă ac Lantanoidă Actinoindăque. Altera est corticula 4*p* quae unō solum ramō lineari gaudet (Fig. 3 — acies media sinistrō). Hōc notitiis numericis (lineae 22^{a}, 23^{a} Tabula 2)

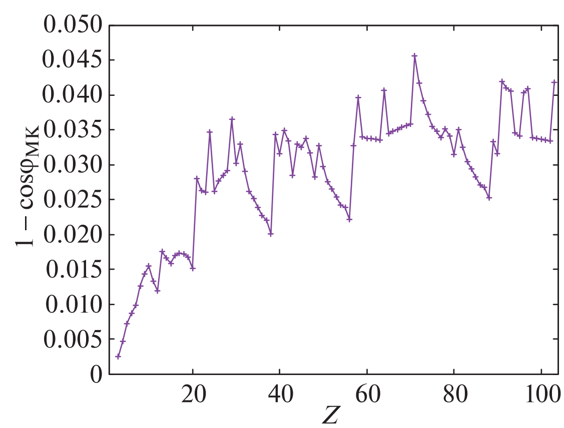

Fig. 2. Defectus, id est quantitas $1 - \cos\varphi_{MK}$, ut functio ā Z pro copiis orbitalium Kogaensium in intervallō $Z = 1$—103.

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

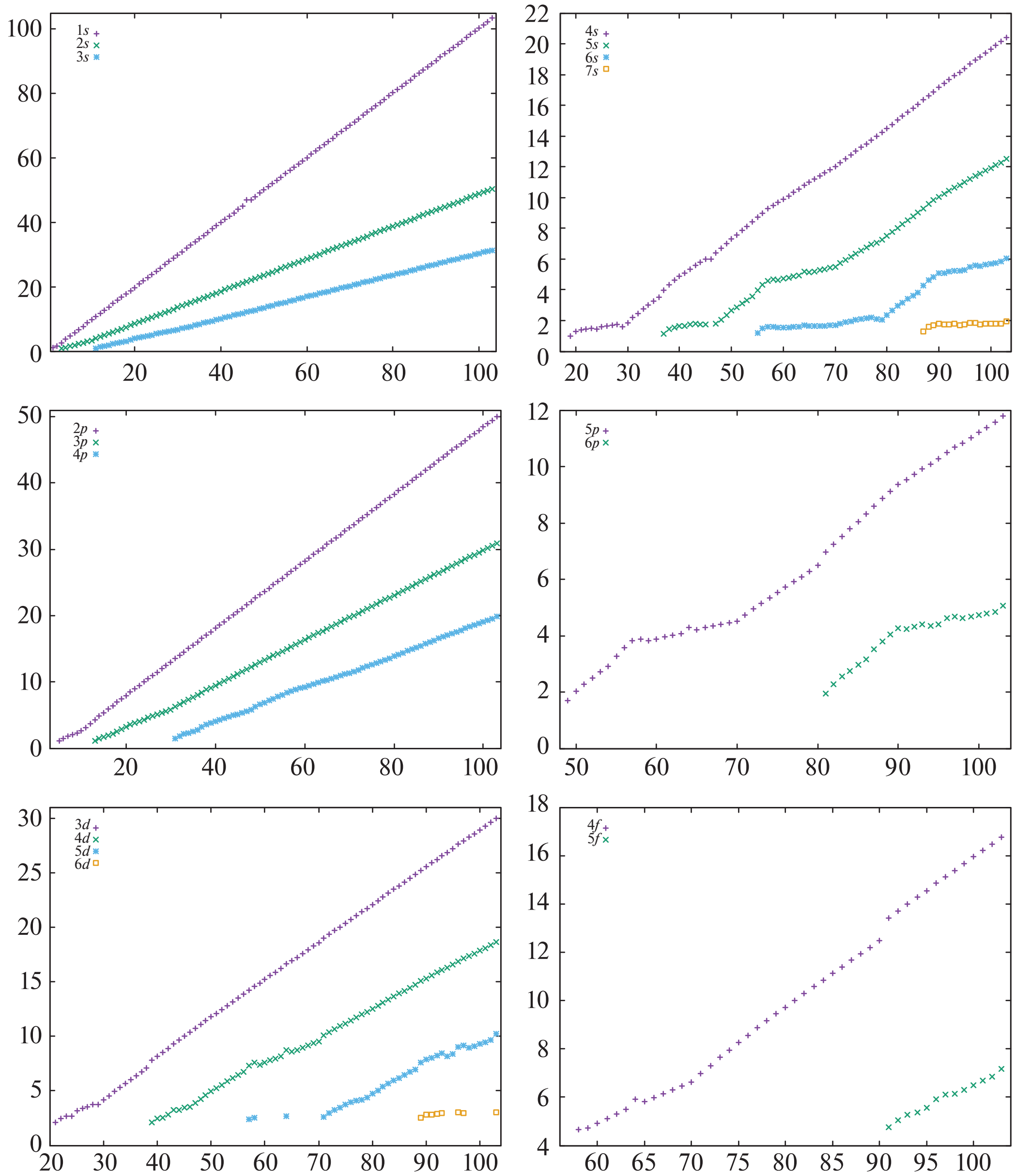

Fig. 3. Dependentiae exponentium $\xi_{n\ell}$ ex orbitalibus Kogaensibus extractōrum ab onere nucleari Z (numerō atomicō) pro corticulis $n\ell$. Acies summa: 1*s*–3*s* – sinistrō; 4*s*–7*s* – rectō; acies media: 2*p*–4*p* – sinistrō; 5*p*–6*p* – rectō; acies ima: 3*d*–6*d* – sinistrō; 4*f*–5*f* – rectō.

monstrantibus intersectionem intervallōrum confidentialium respectivōrum confirmatur.

Parametros $n^*_{n\ell}$ regulārum Slateri ex notitiis Tabulae 2 determinatos pro valoribus numeri quantici principali $n \le 4$ videmus ipsis n proximos esse (in omnibus casibus differentiae minus quam 0.05 sunt). Ita stăbĭlītur praescriptio Slateri, ut pro $n = 4$ $n^*_{n\ell}$ 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 ārum adhibitōrum ad flexūum ac intersectionum accomodandos in casu orbitalium Kogaensium quam in casu orbitalium Bungenianorum.

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

structuram habet complexam. Enimvero apud $Z \geq 55$ segmină spectantiă ad Lanthanoidă, elementă transitivă $5d$, elementă $6p$ et finaliter Actinoidă perspicue videntur. Ex hāc multitudine segmen pro corculaneō tenendum non simplice est sane selectu. Corticulis cum minoribus n (≤ 4) semper segmen corculaneum est illud cum flexū $a_{n\ell}$ maximō. Pro cortuculā $5s$ duo segmină sunt cum flexibus propinquis: pro elementis $5p$ (linea 9ª Tabula 2) et elementis $6p$ (linea 12ª Tabula 2), quod respective praebent valores $n_{5s}^{*\,\mathrm{i}}$ 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 8ª–12ª). Illōrum valorum modo pro elementis $5p$ negativus est. Pure theoretice haud impossibile est $\sigma_{n\ell}^{\mathrm{as}}$ negativas habitu: hoc simpliciter indicat interactionem electronis cum aliis intra corticulā (implendā) fortior esse illā 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 27ª Tabula 2) pro illō accipere. Sub hāc hypothesi valorem n_{5p}^{*} proximum ad n_{5s}^{*} obtinemus et atque omniam copiam valorum σ_{5p} positivōrum tametsi cum valore perpaucō pro ipsis elementis $5p$ (linea 24ª Tabula 2).

Pro corticulā $6s$ nullum segmen certe seligeri potest, ubi ea ad corculum spectet. Notantes quod pro corticulā $5s$ flexus in segminibus Z elementōrum $5p$ et $6p$ simili sunt, ponamus corticulam $6s$ in segmine elementōrum $6p$ ad corculum spectare. Sub hāc hypothesi atque valorem n_{6s}^{*} multo minorem quam 6 obtinemused omniam copiam valorum σ_{6s} positivōrum (in segminibus Lanthanoidōrum, elementōrum transitivōrum $5d$ ac Actinoidōrum).

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

Quoad corticulas nd ($n = 3$–5), eārum 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 invenĭmus et eō usi sumus ad numerum efficientem n_{4f}^{*} determinandum (linea 44ª Tabula 2).

Observatio autem generalis deducta ex notitiis Tabulārum 1, 2 respectu corticulārum $5s$, $5p$, $6s$, (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 $n_{n\ell}^{*}$ minori sunt quam 4. Hoc postulat explanationem, sed eam ad alias dissertationes rĕmittĭmus.

Suprā consideravimus dependentias $\xi_{n\ell}$ ā Z generatim. Istis dependentiis structura Tabulae Periodicae refulget. Nempe notanda est similitas inter dependentias $\xi_{n\ell}$ ā Z in Fig. 3 hujus disseratiunculae et Figurae 9 Adn. [15] monstrantis dependentias valorum $\sqrt{\mathrm{PI}_{n\ell}}$ ā Z. Periodicitas autem ipsā chemice intellectā aliter se manifestat (vide e.g. Adn. [15, 16]). Ad illam investigandum reordĭnēmus dependentias lineares $\xi_{n\ell}$ ā Z ita ut structura periodica corticulārum apertārum manifesta sit. Actu, in quōque segmine respondenti implendae cuique corticulae numeris quanticis $n\ell$, haec $Z - Z_{n\ell}$[4] electrones continet ubi $Z_{n\ell}$ est numerus atomicus subinvincem praecedens initiō implendi corticulae $n\ell$, (apud $Z = Z_{n\ell}$ corticula $n\ell$ dum nullum electronum continet[5]). In Tabulā Periodicā formae longissimae 32$^{\mathrm{abus}}$ columnis (vide e.g. Adn. [15, 16]) elementă aequalibus valoribus $Z - Z_{n\ell}$ ad easdem gregem spectant: formaliter in easdem columnam stant. Definitio numerōrum $Z_{n\ell}$ per numerum columnae in Tabulā Periodicā nimis formalis videtur. Eă autem talis non est. Curiose, ceterum licet pro $Z_{n\ell}$ accipere numeros, subinvincem praecedentes numeros $Z_{n+\ell}$, apud quos electron valore datō $n + \ell$ primum apparet secundum regulam $(n + \ell, n)$ [18] i.e. $Z_{n\ell} = Z_{n+\ell} - 1$. Quamquam in Adn. [15] iterum iterumque subnotatum est quod regula $(n + \ell, n)$ [18] solum apud libros studiosōrum gratiā 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 statūum ad valorem datum $(n + \ell)^{\mathrm{is}}$ spectantium computens, numerum $Z_{n+\ell}$ simplicissimā functione (Kletchkowskiis) exprimi posse:

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

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

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

[5] Exemplum est segmen elementōrum transitivōrum: pro eōrum corticulā $3d$ $Z_{3d} = 20$ quia Ca est ultimum elementum istud segmen praecedens.

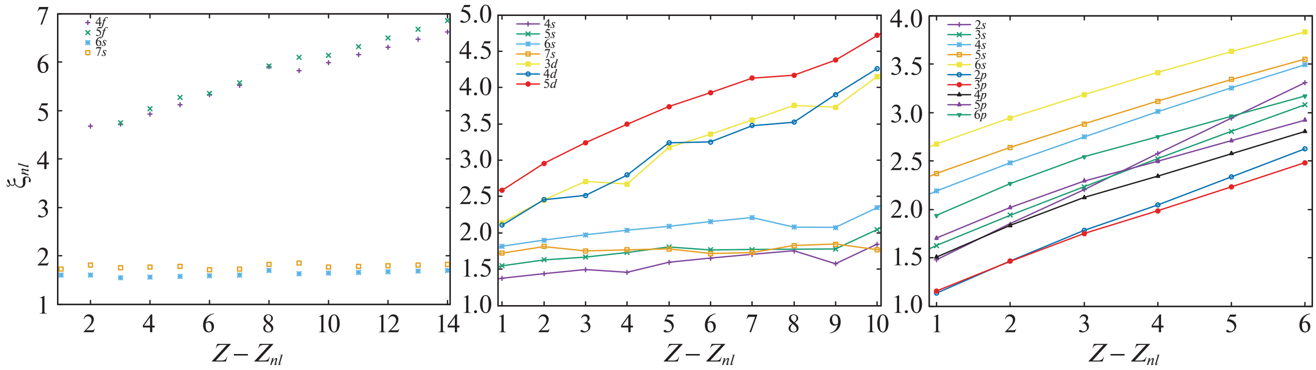

Fig. 4. Dependentiae selectōrum exponentium orbitalium MAP-ianōrum in segminibus *f*- (sinistrō), *d*- (mediō) et *p*-elementōrum (rectō) ab onere corculaneō efficienti $Z - Z_{n\ell}$.

tio K atque valores $Z_n = \mathrm{K}(n + 1) - 1$, 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 4*f* et 5*d* (5*f* et 6*d*) implescuntur, non ipsum valorem $Z_{(n+\ell)}$ ubi electrones cum $(n + \ell) = 7, 8$ primum appareant. Istae exceptiones minus ad rem pertinent. Enimvero, deviatio 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 alterŭtris numeris quanticis computandō (ut Kletchkowskij fecĕrat) reproductă esse. In altera parte, orbitaliă Kogaensiă pro Lanthanoidis Actinoidisque determinata aliquam informationem respectu correlationum vel motūum relativisticōrum implicite continent. Hoc evenit quia status imos istārum atomōrum pro quibus orbitaliă determinată sunt manū propriā auctorum [13] selectos erant in concordiā cum experimentibus. Ergo in Fig. 4 praesentāmus dependentias $\xi_{n\ell}$ a $Z - Z_{n\ell}$ 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*-elementă (Lanthanoidă ac Actinoidă – 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 $Z - Z_{n\ell}$ paene non pendant. Contrarie, quamquam exponentes ξ_{4f} ac ξ_{5f} aequalibus $Z - Z_{n\ell}$ inter se paene coincidunt, eōrum valores illō efficienti 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 $Z - Z_{n\ell}$ non pendant. Contrarie, radii ionici hōrum elementōrum ionum onere 3+, cujus corticulae exterrimae *nf* sunt, efficiente onere corculi $Z - Z_{n\ell}$ crescente, decrescunt, quia crescentibus ξ_{nf} inverse proprtionales sunt sic *contractionem Lanthanoidicam* (et fortasse *Actinoidicam*) manifestantes. Addendi 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 Lantanoidă et Actinoidă reproducendi manet in differentiā numerōrum nodōrum eă respective habent. Haec conclusio atque ex notitiis in basibus Kogaensibus condensatis derivata est.

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

Elementă transitivă, ut Fig. 4 (medio) monstrat, positionem medialem inter *nf* et *nsp* tĕnent. 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 3*d* et 4*d* adversus notabilem incrementum ad illos pro 5*d*.

Generaliter dependentiae $\xi_{n\ell}$ ā $Z - Z_{n\ell}$ notitiis in copiis basalibus Kogaensibus condensatis confirmant observationes Adn. [15, 16] contraponentes orbitaliă *sp* et *df*. Atque clare videtur modus variandi exponentium MAP-ianōrum cum dependentiis quasi-linearibus electronegativitatis Pearsonis monstratis in Fig. 22 Adn. [15] congrŭēre. Notitae ex orbitalibus Kogaensibus extractae porrigunt ad numerum quanticum principalem $n = 7$ quod est autem numerus periodi Tabulae Periodicae scansus copiā orbitalium Kogaensium. Expectari licet periodicitatem in sensu chemicō se manifestare in notitiis ita abundantibus. Id videtur ita esse in notitiis Fig. 4. Secundum eās, periodicitas in casu *f*-elementōrum perfecta est, quia exponentes pro atomis cum aequalibus valoribus $Z - Z_{n\ell}$ simpliciter coincidunt: omnino formalis characteristica functionum periodicārum. Similiter *ns* exponentes pro atomis elementōrum transitivōrum 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 2*p*, et 3*p* fere coincidunt et similiner 4*p*, et 5*p*, qui paucem incrementum respectu illōrum cum $n = 2; 3$ acquīrunt. Atque exponentes pro orbitalibus 6*p* per quedam constantem incrementum ab illis pro 5*p* differunt.

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

Aliquis expectare poterit in ita expansā notitiārum copiā 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 simulantes. Notandum est interdum quod aggreagatio in Adn. [20] proposita non ad sequentes (pares *cum* imparibus) sed ad alternantes (pares *contra* impares) periodos attinet. Itaque, quamquam quaedam aggregatio elementorum respectu *n*, suppletiva ergā communem, oritur ex dependentiis exponentium $\xi_{n\ell}$ ā $Z - Z_{n\ell}$, ea cum hypothesi originali Adn. [20] non conformat. Curiose, aggregatio in dyades sequentium periodorum (parium impariumque) atque functione Klechkowskiis explanatur quae se differenter habet pro paribus imparibusve argumentibus. Haec omnia profundiorem investigationem requirat, quam deferemus ad futurum.

3. COROLLARIA

1. Productum Frobenianum aeq. (6) matricum formae aeq. (5) ex vectoribus differentiārum copiārum $\{|\beta\rangle\}$ et $\{|\mu\rangle\}$ exstructārum vel angulum Frobenianum aeq. (7) inter subspatiă his copiis prognatis instrumentă non inutilia collationi variārum vectorum copiārum esse monstravimus.

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

3. Producti Frobeniani auxiliō valores exponentium orbitalium MAP-ianōrum optime orbitaliă Bungeniană ad elementă H–Xe vel Kogaensiă ad elementa H–Lr representantes obtinuimus.

4. Hōc modō qualitates omnium dilectūum orbitalium basalium investigari possunt. Vere, ad dilectus basales Bungenianos ac Kogaenses angulus Frobenianus inter eōs et dilectus basales MAP-ianos exponentium orbitalium optimalium est ca. 15° quod respondet 3–5%-ōrum densitatis electronicae amissioni apud projectionem in bases MAP-ianas statūum repraesentatōrum in basibus Bungenianis ac Kogaensibus.

5. Generaliter, ambae copiae orbitalium i.e. Bugneniana ac Kogaensis, dependentiam regularem a *Z* exponentium MAP-ianōrum ex illis extractōrum monstrant. Per hanc ostendĭmus rationem orbitaliă atomică in formā MAP-ianā presentandi inutilem non esse, quia itaque (in)congruentia variarum orbitalium copiārum investigari potest.

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

7. Consideratio dependentiārum exponentium MAP = ianōrum $\xi_{n\ell}$ ex basisbus Kogaensibus exctractōrum ab onere corculaneō efficienti $Z - Z_{n\ell}$, ubi valores characteristicos $Z_{n\ell}$ reductā regulā $(n + \ell; n)$ vel Kletschkowskiis functione determinantur, perfectam illōrum periodicitatem probant.

Gratiae

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

Tabula 1. Parametră accommodationis dependentiārum exponentium MAP-ianōrum $\xi_{n\ell}$ ā Z ad variă intervallă 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	$n^*_{n\ell}$	$\sigma_{n\ell}$
1*s*	2:	He–Xe	1.0143	–0.45	0.0010	0.03	0.999951	0.986	
2*s*	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		
3*s*	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		
4*s*	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		
5*s*	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		
2*p*	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		
3*p*	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		
4*p*	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		
5*p*	49:	In–Xe	0.2390	–9.95	0.0107	0.55	0.992118	4.185	
3*d*	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		
4*d*	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).

ficialiă in systematibus dispersis ac colloidalibus; mechanica physico-chemica; processus adsorptionales ac chromatographici". Calculationes praecipue in Lutetia 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 distinguantur. 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] nŏtētur, hodie nemo scit, *cur* Caesar et Cicero Gerundium in Gerundivum conversārent. Quis est illōrum, qui hodie scripturas Caesari Ciceronisque imitare cōnantur, eorum morte mortuūros esse velit?

• Dēclīnāmus nomina vernacularia: masculina in -er, -or secundum Decl. II (vid. [24] "series Taylori"), aliă secundum Decl. III.

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

Tabula 2. Parametră accommodationis dependentiārum 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	$n^*_{n\ell}$	$\sigma_{n\ell}$
1*s*	1	2:	He–Lr	1.0070	–0.32	0.0002	0.01	0.999995	–	0.9931	
2*s*	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
3*s*	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
4*s*	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
5*s*	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
	12	81:	Tl–Lr	0.2121	–9.21	0.0036	0.33	0.993951			0
6*s*	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
7*s*	17	89:102	Ac–No	0.0062	1.18	0.0024	0.23	0.385791		–	–
2*p*	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
3*p*	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
4*p*	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
5*p*	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
	28	89:	Ac–Lr	0.1870	–7.48	0.0014	0.13	0.999316			0.3045
6*p*	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
3*d*	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
4*d*	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
5*d*	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
6*d*	40	89:	Ac–Lr	0.0153	1.46	0.0154	0.42	0.705118		–	–
4*f*	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
5*f*	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 symbolă elementōrum et configurationes 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. *Ahlrichs 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, M.: 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. *Тариверднева М.А.*, От латинской грамматики к латинским текстам, М.: Гуманитарный издательский центр ВЛАДОС (1997).