

Jean Claude JODOGNE

Ir. Dr., Chef de département honoraire
consultant libre IRM, 3 Av.Circulaire - 1180 Bruxelles
jodjc63cm@gmail.com

Un nouveau tableau périodique conforme à la chimie quantique relativiste

À mon père, Joseph Jodogne, initiateur en 1962 de la première réforme fondamentale pour une Chimie déductive et non plus quelque peu apparentée à des recettes de cuisine, dans l'enseignement secondaire en Belgique francophone.

Résumé

Mettant à profit les progrès de la chimie quantique relativiste, une voie est proposée pour une représentation nouvelle basée sur les niveaux d'énergie des électrons dans l'état fondamental des atomes. Avec un nouveau paramètre de famille, on met alors en évidence de très nombreuses corrélations (similitudes ou périodes). Ce nouveau tableau permet d'avoir une disposition très voisine de celle, historique du tableau usuel mais bénéficie de plus d'avantages pour son usage en chimie.

A new periodic table according to relativistic quantum Chemistry

Abstract

Relativistic quantum Chemistry progresses permit a new way to the periodic table's representation taking into account energy levels of electrons in atom's ground state. Use of a new family parameter shows then a lot of correlations (similarities thus periods). This new table allows to have a display similar to the historical one of the usual periodic table but has more advantages when using it in Chemistry.

Keywords

Periodic Table, Family, Quantum Chemistry

1. Introduction

À la lumière des idées de ses précurseurs, Dmitri Mendeleïev, tenant compte de la parenté de comportement de certains composés chimiques, a pu classer les atomes connus à son époque, par rapport à leur masse atomique (Figure 1). Avec 63 éléments, il a remarquablement prévu l'existence de quelques atomes manquants dans ses suites d'atomes, atomes qu'il appelait éléments « réels » pour les distinguer de la substance.

Pour arriver à un classement suivant la charge du noyau au lieu de la masse atomique, il a fallu attendre les recherches et la proposition de l'anglais Henri Moseley (1913). Celui-ci prédit l'existence de quatre atomes alors inconnus (de $Z = 43, 61, 72$ et 75). Suite au bombardement de l'azote par des particules alpha, la découverte des protons émis initia l'idée de l'existence de ceux-ci dans le noyau de l'atome.

En avril 1928, un chimiste français, Charles Janet présenta le premier Tableau Périodique (TP) en blocs dans l'ordre spdf (de dr. à g.). Il était ordonné suivant Z mais très étendu en largeur. La troisième version publiée en novembre (Figure 2) [1] corrige la première où la ligne 1 était composée des quatre premiers atomes et où tous les atomes ayant un nombre quantique $\ell = 0$ étaient décalés d'une ligne vers le haut par rapport au TP usuel.

	Ti = 50	Zr = 90	? = 180.
	V = 51	Nb = 94	Ta = 182.
	Cr = 52	Mo = 96	W = 186.
	Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,1.
	Fe = 56	Rn = 104,4	Ir = 198.
	Ni = 59	Pd = 106,6	O = 199.
H = 1	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.
Be = 9,1	Mg = 24	Zn = 65,2	Cd = 112
B = 11	Al = 27,1	? = 68	Ur = 116
C = 12	Si = 28	? = 70	Sn = 118
N = 14	P = 31	As = 75	Sb = 122
O = 16	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?
F = 19	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127
Li = 7	Na = 23	K = 39	Rb = 85,4
		Cs = 133	Tl = 204.
		Ca = 40	Sr = 87,6
		Ba = 137	Pb = 207.
		? = 45	Ce = 92
		?Er = 56	La = 94
		?Yt = 60	Di = 95
		?In = 75,6	Th = 118?

Д. Менделѣевъ

Figure 1. Un des tableaux de Mendeleïev (extrait de Wikipedia)

Après la découverte par réactions nucléaires de nombreux nouveaux atomes radioactifs, Glenn Seaborg en 1944, donna sa forme actuelle au TP et y ajouta la série des atomes révélés (les acti-

nides). Les propriétés de ces derniers en rapport avec la périodicité chimique étant peu ou pas connues, il est sans doute prématuré d'établir leurs contributions à cette dernière.

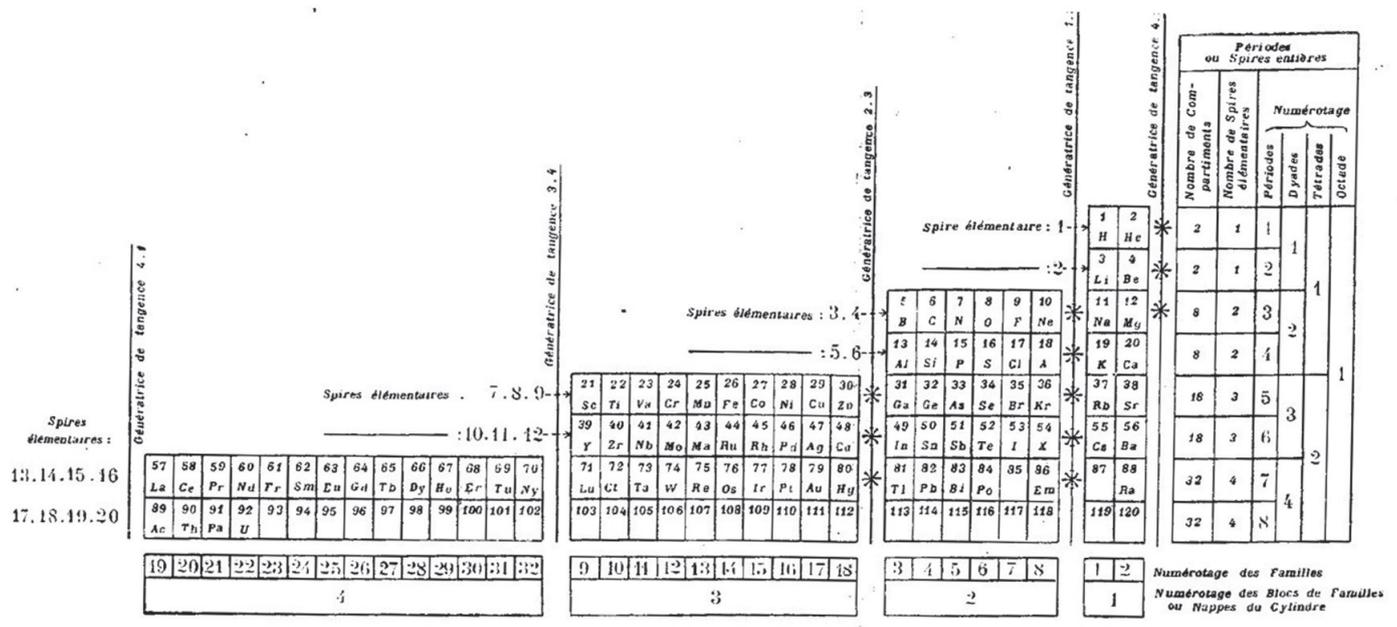


Figure 2. Troisième version publiée en novembre 1928 avec des renvois vers la représentation en spirale

Plus d'un millier de représentations du TP existent mais aucune de celles-ci ne tient compte des progrès récents de la Chimie Quantique (CQ). Déjà en 1975, E.G. Mazurs, auteur d'un livre remarquable sur les représentations du tableau, écrivait [2] : « The time has come to accept the electronic structure tables ». Au XXI^e siècle, le tableau de l'IUPAC ne tient pas compte des progrès des connaissances récentes. Pour aborder la configuration électronique de chaque atome, il est tellement difficile de s'y retrouver que la solution généralement adoptée est de l'inscrire dans chaque case du tableau, de renvoyer vers un autre tableau ou encore d'utiliser les « couches » K, L, M... qui n'existent pas. La question posée est dès lors de trouver une représentation qui tienne compte des progrès considérables des connaissances atomiques et moléculaires. Et que cette nouvelle représentation conserve l'idée capitale de Mendeleïev, celle qui a présidé à l'ordonnement historique du tableau : la périodicité chimique.

2. Construire un tableau des éléments tenant compte des idées actuelles

Ces dernières années, la chimie théorique et en particulier, la chimie computationnelle a accompli des progrès remarquables en démontrant l'impact de la Mécanique Quantique (MQ) mais aussi de la MQ relativiste, sur la compréhension des éléments chimiques. Ces développements tendent à montrer que la MQ est, jusqu'à présent, le meilleur modèle.

La configuration électronique de l'atome comme base de départ a priori

La MQ décrit les électrons dans l'atome par des fonctions d'onde. Mais dès qu'il y a plus d'un électron, cela devient un problème à plusieurs corps. Pour contrer cette difficulté, l'approche est alors d'utiliser une combinaison linéaire (orbitale) des solutions relatives aux ions qui ne possèdent plus qu'un seul électron (atomes hydrogénoïdes). À ces fonctions d'onde correspondent des **niveaux d'énergie** de l'électron dans l'atome, chaque électron ayant un seul jeu distinct de quatre nombres quantiques n , ℓ , m et s .

Ces nombres quantiques satisfont à des règles très simples ; celles des deux premiers sont essentielles pour le TP :

$$n, \ell = \text{premiers entiers positifs et } \ell < n.$$

Les nouveaux développements en CQ sont décrits par exemple à la Ref. [3]. Dans l'article de Hiroshi Nakatsuji [4] une méthode générale pour résoudre les équations quantiques atomiques et moléculaires est proposée. Mais il faut aussi tenir compte des progrès récents de la CQ relativiste. En effet, les travaux de Pekka Pyykkö [5] ont montré que quelques niveaux d'énergie calculés par le modèle hydrogénoïde doivent être ajustés quand on considère les atomes neutres (avec autant d'électrons que de protons). Sauf ceux des niveaux $n = 1$ et 2 qui ne changent pas, ces quelques premiers niveaux d'énergie sont représentés à la Figure 3 avec l'énergie croissante vers le haut et les nouvelles positions des niveaux (en rouge). Pour l'édification du TP, il en résulte que le principe H-like Aufbau doit être remplacé par le principe Real Aufbau (tableau 1 [5]).

Dans l'état fondamental des différents atomes, les électrons vont occuper les niveaux d'énergie la plus basse. Lors de la progression en Z , la séquence de succession des électrons sur ces niveaux se réalise vers ceux d'énergie de plus en plus élevée puisque les niveaux d'énergie plus basse sont les premiers remplis. Ainsi, lors du passage d'un atome Z à l'atome $Z+1$, l'électron additionnel occupera soit le même sous-niveau (pour n et ℓ déterminés) que l'électron ajouté pour l'atome Z s'il y a encore de la place, soit la première place du sous-niveau d'énergie immédiatement supérieur (le nombre de places est équivalent à 2 fois $2\ell + 1$). Dans la présentation des éléments, si nous adoptons l'idée de placer les cases des atomes sur des segments horizontaux dans l'ordre de la hiérarchie du Real Aufbau des niveaux d'énergie, la continuité de la succession selon Z devient possible sans exception. En conséquence, la séquence en nombre atomique Z croissant suit alors exactement l'ordre croissant des niveaux d'énergie de l'atome Z dans son état fondamental. La succession des places des différents atomes est alors expliquée par l'état d'énergie minimale correspondant à l'état fondamental

de chaque atome. Elle suit la progression horizontale **et verticale** en Z comme le recommande Eric Scerri [5]. Le nombre atomique Z est le facteur d'agencement **logique**. Mais si Z progresse de gauche à droite et de bas en haut, cela conduit à un tableau d'allure inversée par rapport au tableau usuel [1]. On perdrait ainsi les familiarités d'usage déjà bien établies. Pour cette raison, le choix de la croissance de l'énergie des niveaux de l'atome vers le bas (Figure 4) sera adopté. Le nouveau tableau se présentera alors comme dans la Figure 5.

Un avantage considérable apparaît : les blocs s, p, d et f sont dans l'ordre logique. Dans un atome à l'état le plus stable, les électrons vont remplir les sous-niveaux les plus bas en énergie jusqu'à épuisement du nombre d'électrons. Lorsqu'on ajoute une charge au noyau, l'électron supplémentaire ne peut occuper qu'un sous-niveau non rempli sur le même sous-niveau que celui de l'électron ajouté à l'élément précédent ou si ce

dernier sous-niveau est complet, sur celui immédiatement supérieur en énergie c'est-à-dire plus bas (à cause du choix de la progression en énergie vers le bas).

Remarquons que l'électron additionnel lors du passage de Z à Z+1, étant sur le sous-niveau le plus élevé en énergie, est le plus facile à extraire de l'atome (ionisation). Pour des raisons pratiques, sur le nouveau tableau, les écarts séparant les différents niveaux ne sont pas à l'échelle (Figure 6). Grâce à l'usage des couleurs, on indique les périodes par une ligne jaune, parfois brisée, au contact des cases et on suggère d'autres comportements chimiques traditionnels (métaux, semi-métaux, halogènes, gaz nobles...). La représentation du tableau proposée à la Figure 6 permet également de faire apparaître les familles du tableau, ce qui est essentiel pour faire ressortir la périodicité des propriétés chimiques des composés.

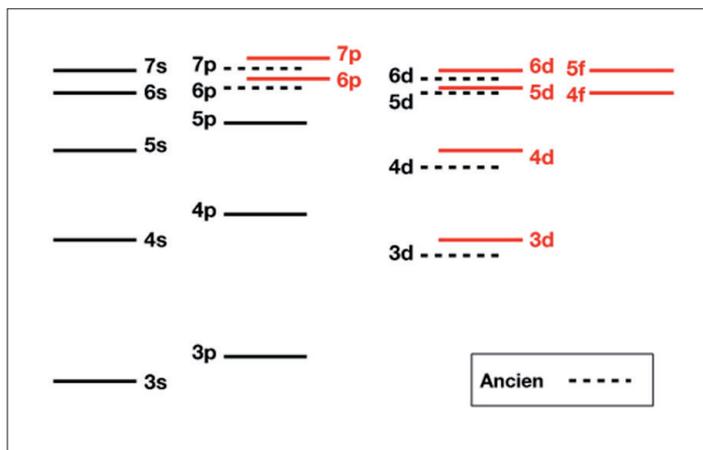


Figure 3. Niveaux d'énergie adaptés de la réf.5 (en rouge)

H-like Aufbau		Real Aufbau	
P Niveaux d'énergie	Nombre d'électrons	P Niveaux d'énergie	Nombre d'électrons
7 7s 7p 7d 7f 7g 7h 7i	98	7 (7s 6d 5f) 7p	32
6 6s 6p 6d 6f 6g 6h	72	6 (6s 5d 4f) 6p	32
5 5s 5p 5d 5f 5g	50	5 (5s 4d) 5p	18
4 4s 4p 4d 4f	32	4 (4s 3d) 4p	18
3 3s 3p 3d	18	3 3s 3p	8
2 2s 2p	8	2 2s 2p	8
1 1s	2	1 1s	2

Tableau 1. H-like Aufbau et Real Aufbau (entre parenthèses les niveaux égaux en énergie)

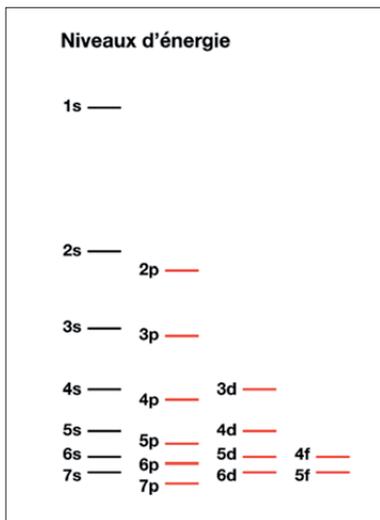


Figure 4. Niveaux avec l'énergie croissante vers le bas

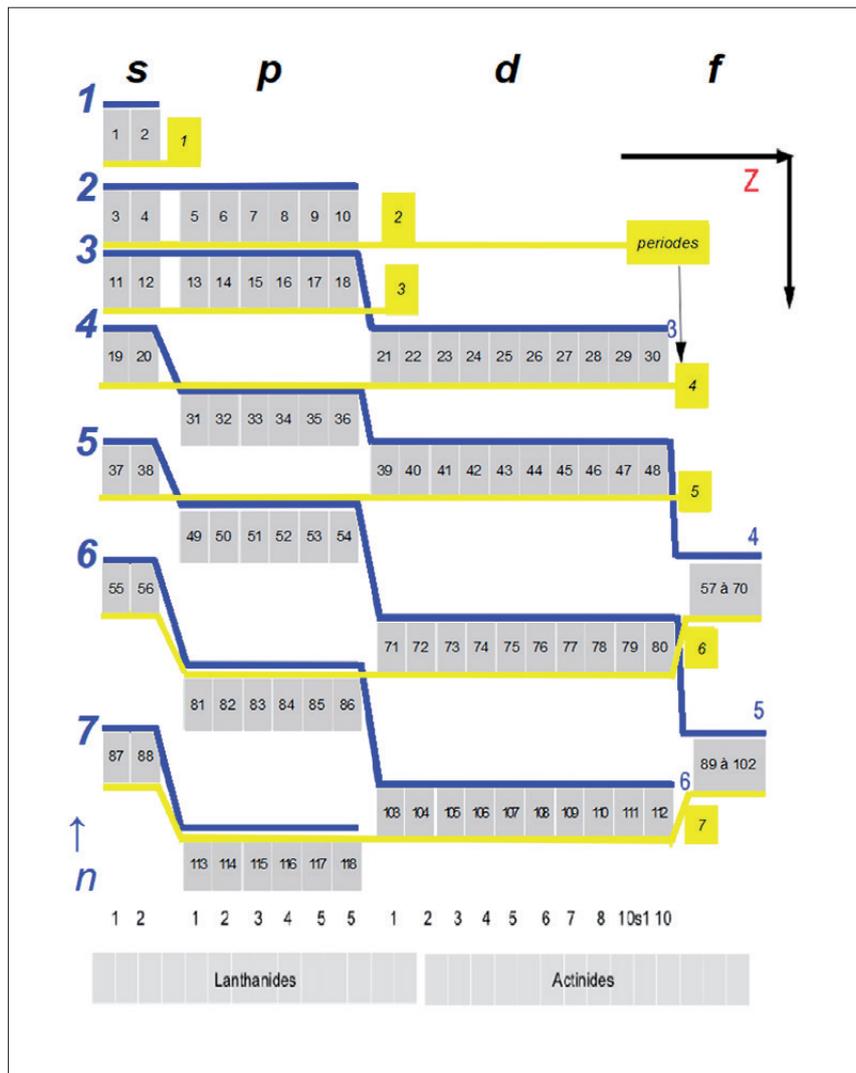


Figure 5. Disposition suivant les niveaux pour n>3

3. Inclure l'apport historique capital des périodes (similitudes)

Un grand bénéfice de cette nouvelle représentation est la mise en évidence facile de ces similitudes. Le nombre d'électrons présents au niveau principal d'énergie n qui se remplit suivant Z est un indicateur des corrélations (similitudes). Pour la facilité de l'exposé, appelons ce nombre : **paramètre de famille F**. On obtient facilement ce paramètre dans cette représentation. En effet, pour chaque nombre quantique principal n (ligne bleue), comme l'ordre des blocs est spdf, le nombre F est simplement le numéro d'ordre de la colonne de l'élément, numéro repris en haut du tableau. Ainsi, le paramètre de famille F du Ga est $3 = 2 + 1$ (colonne 3), celui du W est $12 = 2 + 6 + 4$.

Voyons maintenant comment ce paramètre est un révélateur pédagogique de la périodicité chimique, celle-ci étant une notion vague chez les apprentis chimistes. Mettant en graphique une série exemplaire de propriétés chimiques ou physico-chimiques en fonction de ce nouveau paramètre de famille, (la simple position de la colonne de l'atome) les figures suivantes de 7 à 15 sont éclairantes et nettement plus explicites des corrélations comparées aux graphiques en fonction de Z . Ces derniers ne permettent pas de voir l'existence de corrélation ou de famille. Au vu du seul tableau et sans formation en Chimie, le mot famille n'est qu'un mot.

La périodicité chimique mise en évidence par Mendeleïev est ainsi reliée à un paramètre simple relatif à la configuration électronique des atomes

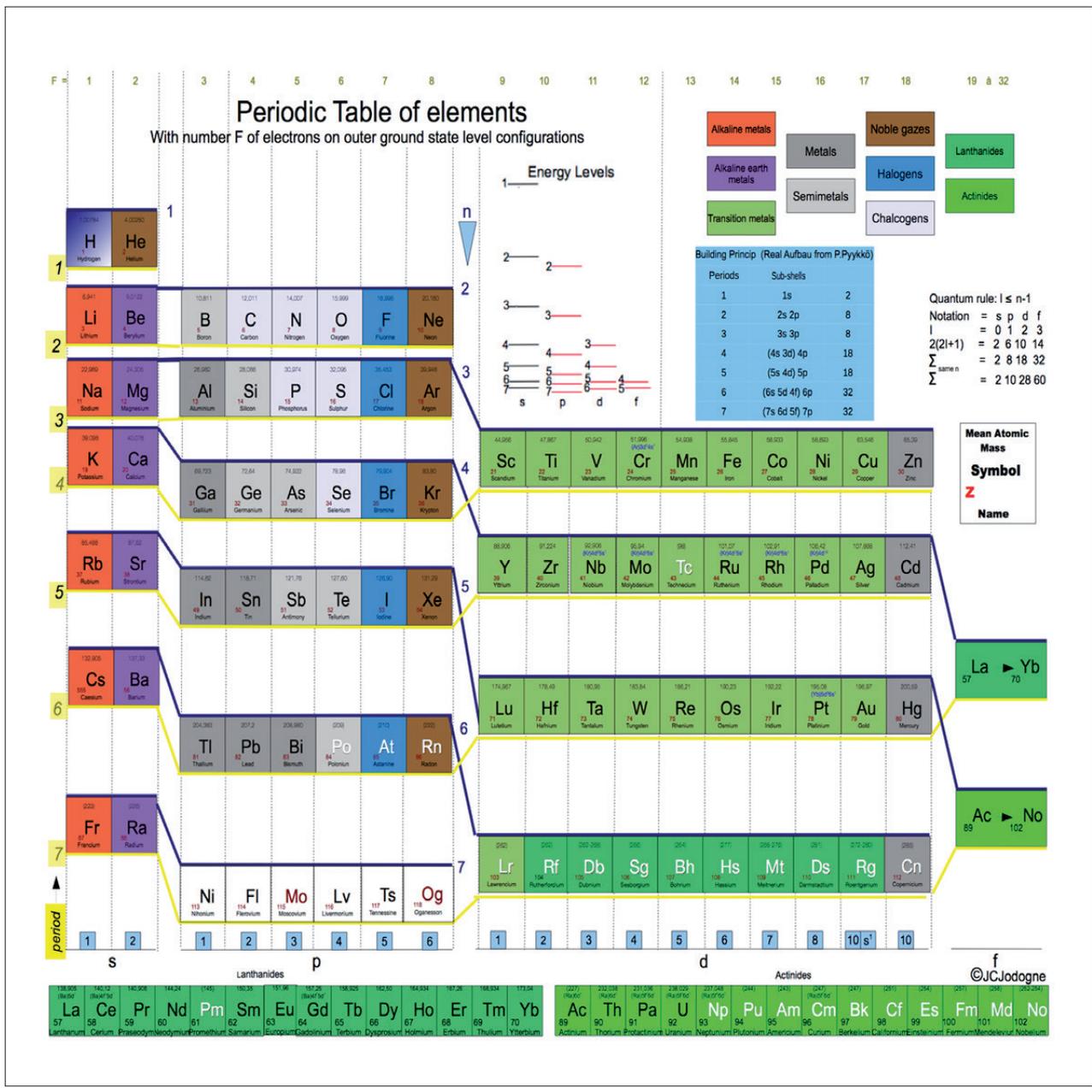


Figure 6. Le nouveau tableau avec l'apport essentiel des couleurs

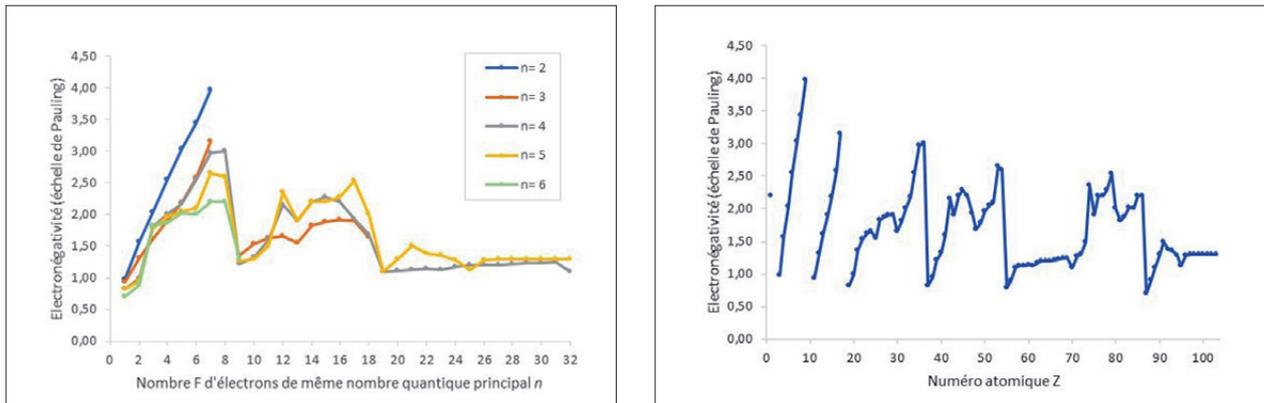


Figure 7. Electronégativités (échelle de Pauling) en fonction de F (gauche) et de Z (droite)

des éléments. Examinons la propriété d'électronégativité (Figure 7). Sur le graphique du haut, on perçoit clairement que, quel que soit le nombre quantique principal (> 1), cette propriété a sensiblement la même valeur pour la famille d'atomes de même valeur du paramètre F.

Essayons une autre propriété, l'énergie de première ionisation (Figure 8). Les valeurs sont presque les mêmes pour un même paramètre F alors que le graphique en Z est de nouveau moins démonstratif. Dans les figures suivantes, nous omettrons les graphiques en Z.

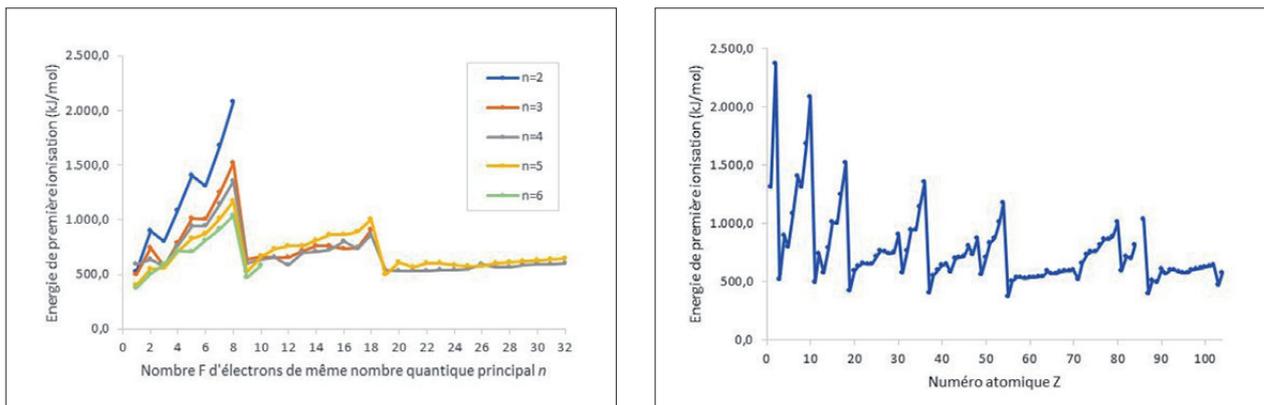


Figure 8. Energies de première ionisation en fonction de F (gauche) et de Z (droite)

Ces similitudes sont peut-être dues au hasard. Voyons des grandeurs liées à la température. Comment se placent les valeurs des températures de fusion (Figure 9) et d'ébullition (Figure 10) ainsi que les enthalpies respectives (Figures 11 et 12).

On retrouve la même allure générale alors que lors de la fusion ou de l'ébullition, il est clair que la configuration électronique n'est pas la seule cause de la valeur de ces propriétés. A l'état solide ou liquide, des liens particuliers

existent. Lorsque le remplissage du sous-niveau est proche de la moitié (par ex. pour $F = 11, \dots, 15$), les valeurs des propriétés sont plus dispersées mais néanmoins, l'évolution pour les atomes avec même F est semblable pour chaque nombre quantique principal. Regardons encore comment se présente une propriété presque ignorée dans la recherche des similitudes, la tension superficielle à 25°C (Figure 13). Une nouvelle fois, il y a un air de famille sauf pour $n = 2$ et $F = 2$ ou 4 !

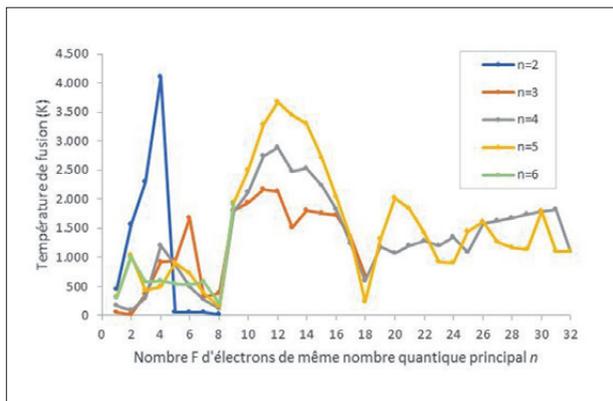


Figure 9. Températures de fusion en fonction de F

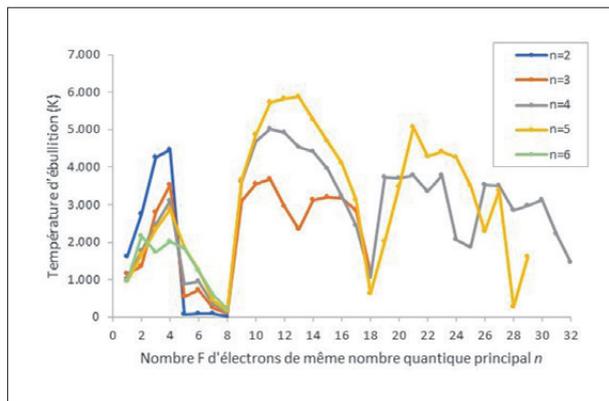


Figure 10. Températures d'ébullition en fonction de F

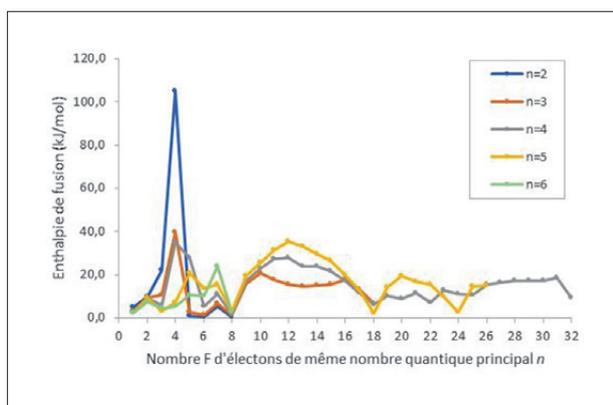


Figure 11. Enthalpies de fusion en fonction de F

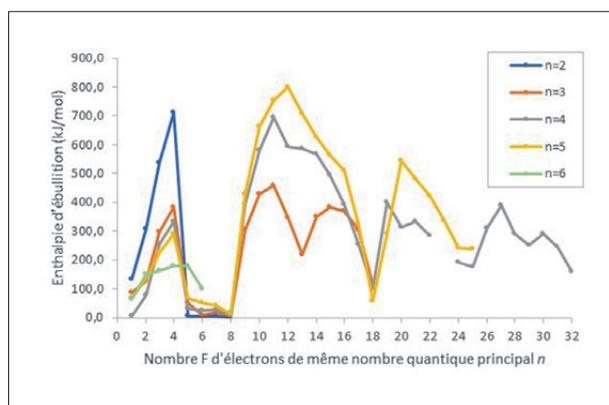


Figure 12. Enthalpies d'ébullition en fonction de F

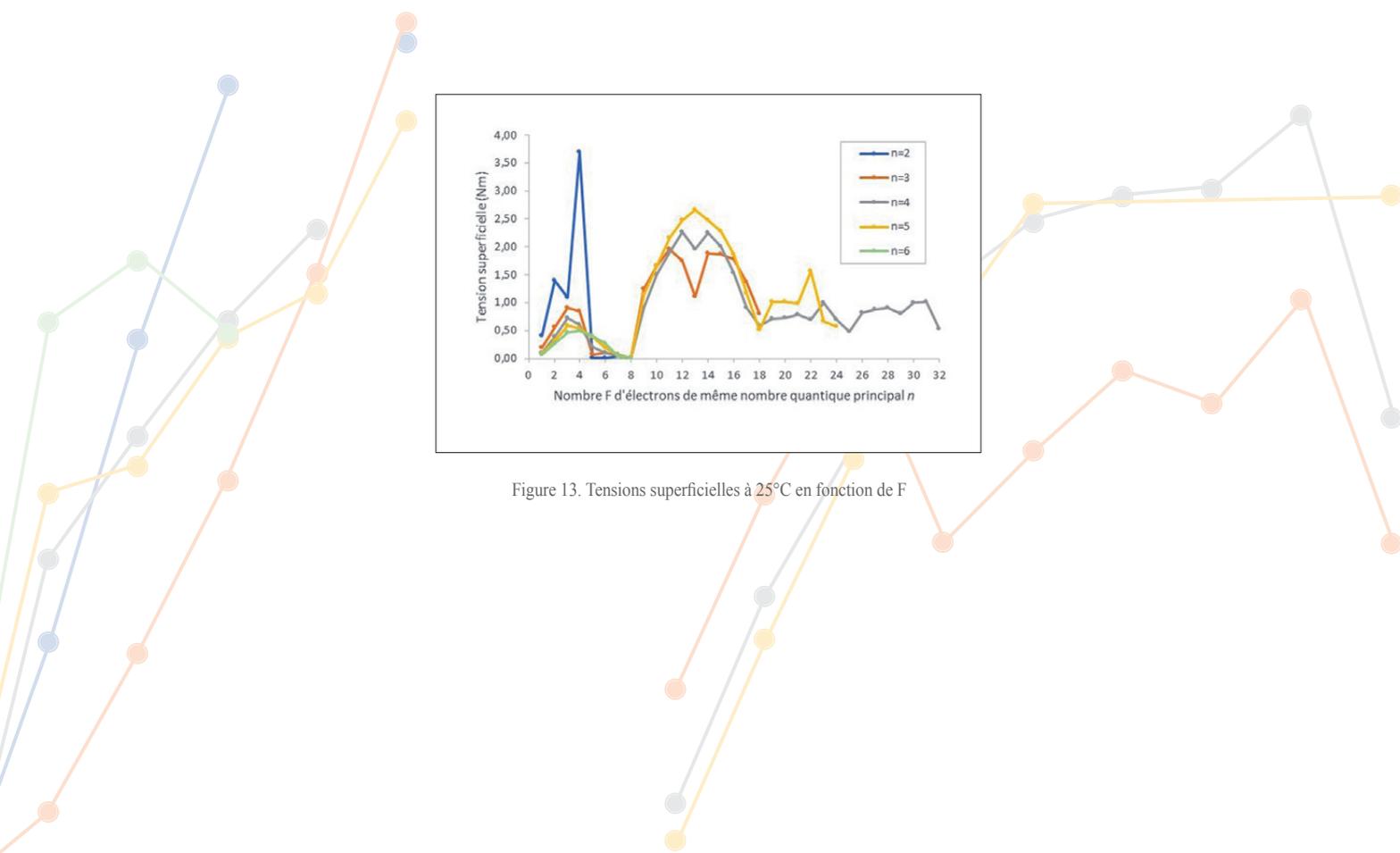


Figure 13. Tensions superficielles à 25°C en fonction de F

Ces similitudes seraient-elles valables pour des grandeurs liées à l'espace comme le volume molaire (Figure 14) ou le rayon atomique mesuré (Figure 15) ?

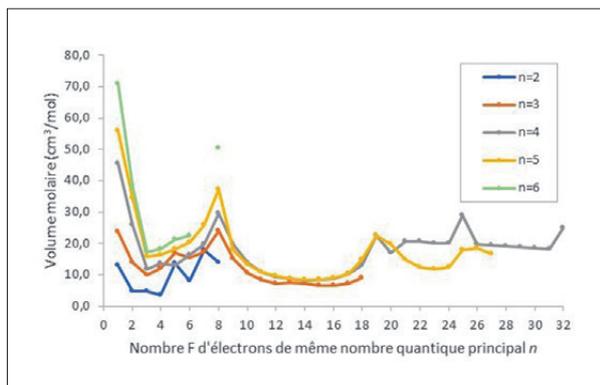


Figure 14. Volumes molaires en fonction de F

Pour les volumes molaires et les rayons atomiques mesurés, la régularité entre les éléments du bloc d est bien marquée. A nouveau, l'évolution de la grandeur examinée, ici le volume molaire (Figure 14) ou le rayon atomique (Figure 15), suit particulièrement bien une évolution périodique au niveau des familles considérées.

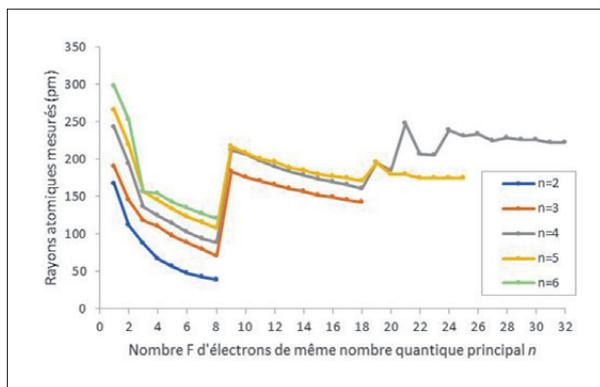


Figure 15. Rayons atomiques mesurés en fonction de F

Considérons à présent l'évolution de l'affinité électronique lorsque le nombre d'électrons de même nombre quantique principal n croît (Figure 16). Ici, on voit bien la difficulté pour attacher un électron supplémentaire (il faut plus d'énergie) lorsque le sous-niveau $\ell = 1$ se remplit car l'espace disponible près du noyau se réduit (orbitales p_x , p_y et p_z). La répulsion des électrons déjà présents semble similaire pour les n différents. C'est moins le cas pour le sous-niveau $\ell = 2$ car la

présence moyenne de l'électron supplémentaire est située plus loin du noyau et donc l'espace disponible est plus important ($dV = 4\pi r^2 dr$).

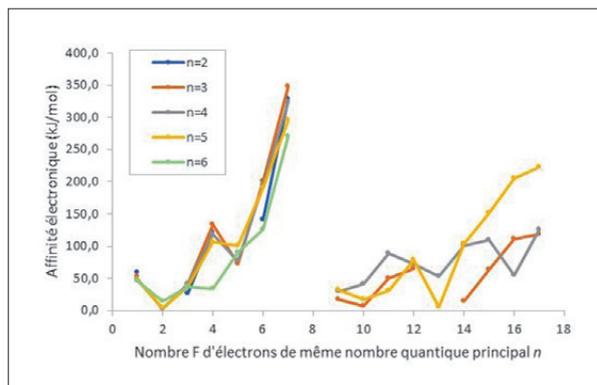


Figure 16. Affinités électroniques en fonction de F

Plus étonnant encore, cette similitude apparaît aussi pour l'énergie de formation de certains composés oxygénés binaires $X_x O_y$ classée par rapport au paramètre F de l'atome X (Figure 17). Le tableau 2 qui donne les composés utilisés, est tiré de la figure 6-4 du remarquable ouvrage de R.T. Sanderson [7]. D'autres similitudes de propriétés (conductibilité thermique, enthalpie d'ébullition des composés oxygénés binaires, propriétés d'autres composés binaires avec le Br, le Cl, ...) peuvent être également montrées.

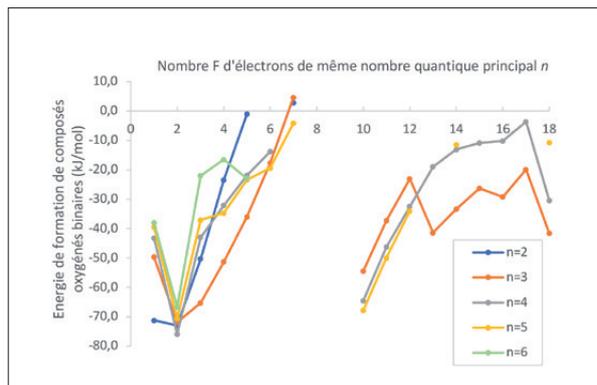


Figure 17. Energies de formation de certains composés oxygénés binaires à 25°C en fonction de F

De l'examen de toutes ces figures, on voit que pour un même F, les différents atomes ont des propriétés dont les valeurs sont très voisines. La notion de famille en découle de façon évidente et justifie le nom du paramètre. Remarquons le

F=	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
n=1	X ₂ O																	
2		XO	X ₂ O ₃	XO ₂	N ₂ O ₅	XO ₂	OF ₂											
3					P ₄ O ₁₀		Cl ₂ O ₇			XO ₂	X ₂ O ₅	CrO ₃	Mn ₃ O ₄	Fe ₃ O ₄	CoO ₄	NiO	CoO ₄	XO
4					As ₂ O ₅		-					MoO ₂	Tc ₂ O ₇	RuO ₂	RhO	PdO	AgO ₂	
5					Sb ₂ O ₅		I ₂ O ₅					WO ₂	-	OsO ₄	-	-	-	
6					Bi ₂ O ₃		-											

Tableau 2. Les composés oxygénés binaires utilisés pour la figure 17

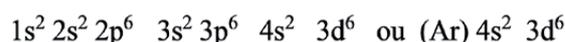
rôle capital des électrons du niveau d'énergie occupé le plus élevé, électrons qui se trouvent généralement le plus souvent dans la périphérie de l'atome et qui correspondent à des électrons de valence.

4. Les configurations électroniques

La recherche des configurations électroniques est simplifiée en reprenant au bas des colonnes le nombre d'électrons du sous-niveau d'énergie le plus élevé de l'état fondamental, sous-niveau qui se remplit ; les autres, d'énergie inférieure, sont normalement complets. La configuration électronique (limitée au nombre quantique principal et orbital) du dernier électron ajouté est très simplement retrouvée par la position : toutes les cases supérieures à la position de la case de l'atome sont remplies et le nombre au bas de la colonne de la case donne le nombre d'électrons sur le sous-niveau. L'indication 10s¹ au bas de la colonne 17 permet de tenir compte du gain d'énergie de la configuration de niveau complet avec un seul électron s par rapport à la situation « régulière » avec un niveau incomplet de 9 électrons pour tout le groupe 17.

Il n'est plus nécessaire de recourir à un tableau séparé des configurations. Ainsi le n et ℓ de l'électron ajouté sont déterminés facilement. Plus besoin d'introduire des règles *ad hoc* ou mnémotechniques pour retrouver ces nombres. On suit la progression en Z vers la droite ou vers le bas. Par ex., la structure du Fe est composée des électrons de nombres quantiques n = 1

et n = 2, ceux avec n = 3, ℓ = 0 ou 1, ceux avec n = 4, ℓ = 0 et enfin six (au bas de la colonne) électrons avec n = 3 et ℓ = 2. En notation spectroscopique, on a pour le Fe :



Les blocs s et p n'ont pas d'exception. Une seule exception avec n = 3 et ℓ = 2 (Cr) et cinq avec n = 4 et ℓ = 2 (Nb, Mo, Rn, Ph, Pd) ; les autres sont dans les lanthanides et actinides. Les quelques exceptions à cette procédure peuvent figurer explicitement dans la case. Dans la case du Mo par ex., on observe la configuration :



5. Bénéfices

Par rapport au tableau usuel, la nouvelle représentation a de nombreux avantages :

- Les éléments suivent un ordre logique en Z sans exception.
- Les nombres d'éléments par période sont bien retrouvés (2 8 8 18 18 32 32) conformément au principe Real Aufbau de la chimie quantique relativiste.
- Les atomes des groupes principaux s et p sont rassemblés.
- L'usage systématique des couleurs pour le fond des cases permet de faire ressortir les comportements chimiques. Ainsi, la place de l'He n'est plus problématique et le comportement multiple de l'H est suggéré.

- La distribution claire des sous-niveaux remplis et ceux qui se remplissent permet de retrouver facilement les configurations électroniques en n et ℓ avec seulement quelques exceptions qui seront écrites explicitement dans le nouveau TP.
- L'allure générale du tableau est très proche de celle du tableau usuel (Figure 18) et conserve les habitudes des praticiens de la chimie.

Grâce à ce tableau (Figure 6), on constate que le facteur d'ordonnement dans les périodes est le nombre F d'électrons sur le niveau occupé de n le plus élevé (paramètre de famille). Il est aisé de trouver sur quel niveau l'électron ajouté à l'élément précédent va se situer pour tous les éléments importants des blocs s , p et même d (niveaux $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$).

Pour la question de la position de l'hélium, il est situé au sommet de la colonne 2 car c'est sa place ! Sa configuration électronique complète comporte deux électrons et non huit. Sa nature chimique différente, liée au premier niveau d'énergie complet, est clairement indiquée par le fond coloré de la case (Figure 6). L'usage systématique des couleurs pour le fond des cases permet de faire ressortir les comportements chimiques.

6. Conclusions

Le tableau usuel a son origine il y a 150 ans et depuis lors, les progrès de la compréhension de la structure électronique ont été considérables. L'apport relativiste de la Chimie Quantique récente change un peu les niveaux d'énergie dans l'atome. Dans un tableau, le placement des cases sur les sous-niveaux selon la hiérarchie énergétique permet d'obtenir une progression en Z cohérente et d'omettre l'idée fautive des couches K , L , M ,... (au lieu de niveaux). Il ne sera pas nécessaire d'utiliser la règle d'édification ($n + \ell$) non justifiée et de l'abandonner par la suite. Il en résulte un tableau logique, beaucoup plus facile à assimiler et à utiliser. L'introduction d'un nouveau paramètre dit de famille permet de montrer les similitudes très nombreuses et même insoupçonnées, indicatrices de la périodicité chimique.

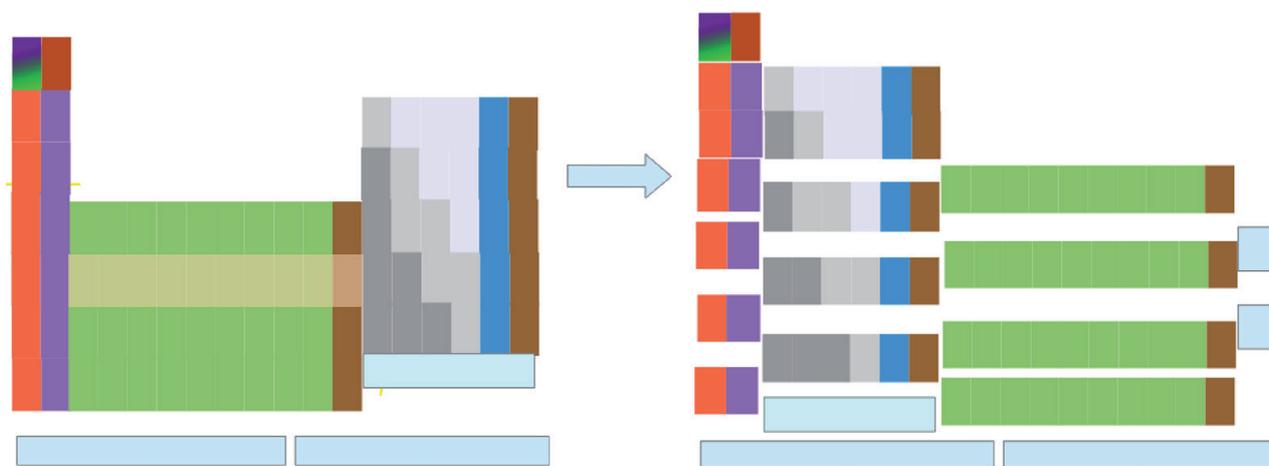


Figure 18. Allures générales de l'ancien et du nouveau tableau

Remerciements

Que le réviseur anonyme reçoive ici toute l'expression de ma gratitude pour l'aide importante qu'il m'a apportée. Tous mes remerciements à Benoît Champagne, Bernard Mahieu, Brigitte Van Tiggelen, Xavier Urbain et Koen Stegen pour leur encouragement et les nombreuses remarques et discussions constructives ainsi qu'aux deux étudiants de l'UNamur (Clémence Coquillart et Maxime Mathieu) pour l'aide à la préparation des versions finales des figures.

Annexe

Le paramètre de famille permet une jolie illustration inattendue du modèle de Bohr. Considérons les énergies d'ionisation des premiers éléments (au moins jusque $Z = 32$) normalisées par rapport à l'énergie d'ionisation de l'hydrogène. Les racines carrées de ces énergies sont portées en graphique en fonction de Z avec l'ordonnement par le paramètre de famille. Dans la Figure 19, la première suite 1 concerne, en commençant par le bas, les énergies d'ionisation de H, He^+ , Li^{++} , Be^{3+} ,... et ainsi de suite c'est-à-dire les ions avec un seul électron $F = 1$; la suite 2 implique $F = 2$ (He , Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} , C^{4+} ,...). La suite 3, celle des ions avec 3 électrons etc. La pente des droites est proportionnelle à $1/n$ en accord avec la théorie de Bohr ($E/E_{\text{H}} = Z^2/n^2$) avec n le nombre quantique principal correspondant au nombre F de l'atome ou de l'ion.

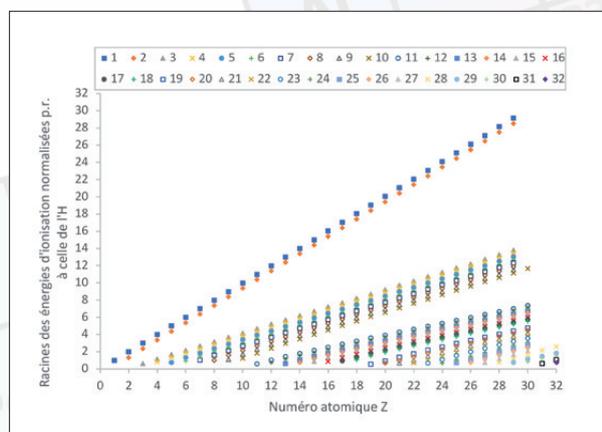


Figure 19. Racines carrées des énergies d'ionisation normalisées en fonction de Z . La couleur indique la valeur de F

- [1] C. Janet, <http://www.meta-synthesis.com> © Web Book © the INTERNET database of PT 1928 Janet and 2014 Jodogne's Janet PT 2^e et puis 14^e
- [2] E.G. Mazurs. Graphic Representation of the Periodic Table during one hundred years, 1975, Univ. Alabama Press, Alabama USA p96.
- [3] M. Dolg, X. Cao, Chem. Rev. *Quantum Chemistry Issue* **2012**, 112, 403-480
- [4] H. Nakatsuji, Acc. Chem. Res. **2012**, 45, 1480-1490
- [5] P. Pyykkö, Chem. Rev., *Quantum Chemistry Issue* **2012**, 112, 371-384
- [6] E.R. Scerri, Int. J. Quantum Chem. **2009**, 109, 959-971
- [7] R.T. Sanderson, Chemical Periodicity, Reinhold N.Y. **1975**, 112