

**SCI-CONF.COM.UA**

**MODERN SCIENTIFIC RESEARCH:  
ACHIEVEMENTS, INNOVATIONS  
AND DEVELOPMENT PROSPECTS**



**PROCEEDINGS OF XVI INTERNATIONAL  
SCIENTIFIC AND PRACTICAL CONFERENCE  
SEPTEMBER 11-13, 2022**

**BERLIN  
2022**

# **MODERN SCIENTIFIC RESEARCH: ACHIEVEMENTS, INNOVATIONS AND DEVELOPMENT PROSPECTS**

Proceedings of XVI International Scientific and Practical Conference

Berlin, Germany

11-13 September 2022

**Berlin, Germany**

**2022**

## UDC 001.1

The 16<sup>th</sup> International scientific and practical conference “Modern scientific research: achievements, innovations and development prospects” (September 11-13, 2022) MDPC Publishing, Berlin, Germany. 2022. 344 p.

**ISBN 978-3-954753-03-1**

The recommended citation for this publication is:

*Ivanov I. Analysis of the phaunistic composition of Ukraine // Modern scientific research: achievements, innovations and development prospects. Proceedings of the 16th International scientific and practical conference. MDPC Publishing. Berlin, Germany. 2022. Pp. 21-27. URL: <https://sci-conf.com.ua/xvi-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-modern-scientific-research-achievements-innovations-and-development-prospects-11-13-09-2022-berlin-nimechchina-arhiv/>.*

**Editor**

**Komarytsky M.L.**

*Ph.D. in Economics, Associate Professor*

Collection of scientific articles published is the scientific and practical publication, which contains scientific articles of students, graduate students, Candidates and Doctors of Sciences, research workers and practitioners from Europe, Ukraine, Russia and from neighbouring countries and beyond. The articles contain the study, reflecting the processes and changes in the structure of modern science. The collection of scientific articles is for students, postgraduate students, doctoral candidates, teachers, researchers, practitioners and people interested in the trends of modern science development.

**e-mail: [berlin@sci-conf.com.ua](mailto:berlin@sci-conf.com.ua)**

**homepage: <https://sci-conf.com.ua>**

©2022 Scientific Publishing Center “Sci-conf.com.ua” ®

©2022 MDPC Publishing ®

©2022 Authors of the articles

13. *Форкерт І. О., Мелеховець О. К., Мелеховець Ю. В.* 57  
ВПЛИВ АУТОІМУННОГО ТИРЕОЇДИТУ НА ЯКІСТЬ ЖИТТЯ  
ПАЦІЄНТІВ

#### CHEMICAL SCIENCES

14. *Zinchenko R., Matvuyeyeva O.* 60  
MAGNETIC ACTIVATORS OF HYDROCARBON FUELS
15. *Козуб П. А., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Сирова Г. О., Козуб С. М.* 63  
МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ ЕЛЕКТРОННОЇ КОНФІГУРАЦІЇ  
ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

#### TECHNICAL SCIENCES

16. *Melnychenko A.* 68  
EVALUATING SNIP PRUNING METHOD ON THE STATE-OF-  
THE-ART FACE DETECTION MODEL
17. *Skakalina E. V.* 73  
SOLUTION OF THE PROBLEM OF SEARCHING THE GLOBAL  
OPTIMUM OF A FUNCTION OF TWO VARIABLES USING THE  
GENETIC ALGORITHM
18. *Бакалов В. Г., Кузьменко В. О., Яриш І. Ю.* 79  
РОЗРОБКА ІНЖЕНЕРНОЇ МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКУ  
ТОВЩИНИ ПЛОСКО ЩІЛИННОЇ ГОЛОВКИ
19. *Денисюк С. П., Белоха Г. С., Лисий В. В., Чернещук І. С.* 84  
ДИНАМІЧНА ТАРИФІКАЦІЯ В ЛОКАЛЬНИХ СИСТЕМАХ  
ЕНЕРГОЗАБЕЗПЕЧЕННЯ
20. *Козуниця С. І., Човнюк Ю. В.* 90  
МЕТОДИ ОПТИМІЗАЦІЇ РЕЗЕРВУ ПАРКУ ПОРТОВИХ  
ПЕРЕВАНТАЖУВАЛЬНИХ МАШИН ДЛЯ ТРАНСПОРТНО-  
ЛОГІСТИЧНИХ ТА ЕКСПЕДИЦІЙНИХ КОМПАНІЙ.
21. *Рогова Н. В., Володько О. В., Бичков Я. М.* 100  
ХАРЧОВА І БІОЛОГІЧНА ЦІННІСТЬ СОКІВ, ЇХ ДІЯ НА  
ОРГАНІЗМ ЛЮДИНИ ТА ЇХ ЗНАЧЕННЯ В ХАРЧУВАННІ

#### ARCHITECTURE

22. *Кучеренко А. А.* 106  
ЭНЕРГИЮ АТОМОВ В СТРОИТЕЛЬНОЕ  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

#### PEDAGOGICAL SCIENCES

23. *Атаманчук В. П., Атаманчук П. С.* 113  
ДИДАКТИКО-ФІЛОСОФСЬКИЙ КОНТЕКСТ УПРАВЛІННЯ  
РЕЗУЛЬТАТИВНІСТЮ ТА ЯКІСТЮ НАВЧАННЯ ІНДИВІДА

УДК 536.632

## МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ ЕЛЕКТРОННОЇ КОНФІГУРАЦІЇ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

**Козуб Павло Анатолійович,**

к.т.н., доцент

Харківський національний університет радіоелектроніки

**Мірошніченко Наталія Миколаївна**

к.т.н., доцент

Національний технічний університет

Харківський політехнічний інститут

**Лук'янова Вікторія Анатоліївна,**

к.пед.н., доцент

Харківський національний університет радіоелектроніки

**Сирова Ганна Олегівна,**

д.фарм.н., професор

Харківський національний медичний університет

**Козуб Світлана Миколаївна,**

к.т.н., доцент

Харківський національний медичний університет

м. Харків, Україна

**Анотація:** Запропоновано 5 основних функцій, які достатні як для розрахунку електронної конфігурації елемента за його порядковим номером, так і визначенням порядкового номеру елемента за його електронною конфігурацією. Показано, що вони можуть бути представлені як у вигляді математичних та логічних операторів, так і у вигляді логічних конструкцій, що є важливим для використання їх у прикладних програмах.

**Ключові слова:** хімічні елементи, порядковий номер, електронна конфігурація.

Одним із основних принципів сучасної хімії є періодичність хімічних та фізичних властивостей хімічних елементів, яка базується на структурі електронної оболонки. В результаті цього стає можливим використання для

прогнозування властивостей будь-якого елемента знати лише його порядковий номер.

Так, наприклад, для розрахунку значення середнього молярного об'єму елемента достатньо невеликого набору простих залежностей [1], які використовують в якості вихідних параметрів тільки дані щодо електронної структури елемента, яка в свою чергу може завжди бути отримана за положенням елемента у періодичній таблиці з використанням стандартного запису зовнішньої електронної оболонки атому.

Методика розрахунку структури зовнішньої оболонки вважається загальновідомою і в загальному вигляді подається майже у всіх підручниках з елементарної хімії, наприклад [2,3]. Але у математичному вигляді, придатному для використання при створенні програм така методика відсутня не тільки у підручниках, але й у більш професійній літературі.

Це призводить до того, що при розробці програмних продуктів доводиться кожен раз розробляти цей алгоритм майже з нуля, що потребує від розробників програмного забезпечення знань як хімії, так і мови програмування.

Основною проблемою при створенні алгоритму визначення структури є специфічна закономірність періодичної системи. Вона не може бути визначена простими алгебраїчними функціями без використання логічних операцій та виразів.

Слід зазначити, що використовуючи особливості будови електронної оболонки елементів можна значно спростити обчислення, використавши всього декілька відносно простих функцій оснований як на використанні логічних виразів так і на використанні логічних операцій.

Для відображення електронної конфігурації було взято стандартне позначення в хімічній літературі електронної структури зовнішньої оболонки атому

$$N s^{e_0} f^{e_4} d^{e_3} p^{e_2}$$

де N - номер періоду у періодичній системі елементів;

s, f, d, p - позначення орбіталі (побічного квантового числа - 0,1,2,3);

$e^i$  - кількість електронів у відповідній орбіталі.

Однією з особливостей структури є фактичне розташування елементів не у відповідності до послідовності зростання номеру орбіталі - (s,p,d,f), а в іншому порядку - (s,f,d,p). Це має своє пояснення з точки зору квантової хімії, але потребує врахування для зручності подальшої практичної роботи.

Саме тому математичному вигляді зручним є представлення електронної конфігурації у вигляді вектору (масиву значень) з кількістю електронів у кожній орбіталі.

$$C = \{e_s, e_f, e_d, e_p\}$$

де C - вектор електронної конфігурації зовнішньої оболонки;

$e_b$  - кількість елементів у b-орбіталі періоду N.

b - побічне квантове число, 0,1,2,3 (відповідно s,p,d,f).

Максимальна кількість електронів у b-орбіталі для N-періоду визначається простою формулою, в якій використання умовного оператора порівняння призводить до того, що для перших періодів кількість електронів f та d орбіталей приймають нульові значення

$$l_b = l(N, b) = 2 \cdot (2 \cdot b + 1) \cdot (N > 2 \cdot b - 1) \quad (1a)$$

де  $l_b$  - кількість електронів у орбіталі N-періоду.

Це також можна зробити і за допомогою використання умовних конструкцій

$$\begin{aligned} l_b &= l(N, b) \\ l_b &= 0 \\ \text{якщо } N > 2 \cdot b - 1 \text{ то } l_b &= 2 \cdot (2 \cdot b + 1) \end{aligned} \quad (1b)$$

Кількість електронів у всіх заповнених електронних оболонках для N-періоду буде сумою всіх електронів для кожної з орбіталей

$$Z_N = Z_N(N) = -2 + \sum_{b=0}^{b=3} 2 \cdot l(N, b) \cdot (N - 2 \cdot b + 1) \quad (2a)$$

де  $Z_N$  - кількість електронів у повністю заповнених електронних оболонках для елементів N-періоду.

або за допомогою використання умовних конструкцій

$$Z_N = Z_N(N)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{якщо } N = 7 \text{ то } Z_N = 118 \\ \text{якщо } N = 6 \text{ то } Z_N = 86 \\ \text{якщо } N = 5 \text{ то } Z_N = 54 \\ \text{якщо } N = 4 \text{ то } Z_N = 36 \\ \text{якщо } N = 3 \text{ то } Z_N = 18 \\ \text{якщо } N = 2 \text{ то } Z_N = 10 \\ \text{якщо } N = 1 \text{ то } Z_N = 2 \end{array} \right. \quad (2b)$$

Це дає можливість визначити період для визначеного атомного номеру елемента ( $Z$ ) або вигляді циклу

$$N = N(Z)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N = N + (Z_N(n) \leq Z), \\ 1 \leq n \leq 7 \end{array} \right. \quad (3a)$$

або за допомогою умовних конструкцій

$$N = N(Z)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{якщо } Z \leq 118 \text{ то } N = 7 \\ \text{якщо } Z \leq 86 \text{ то } N = 6 \\ \text{якщо } Z \leq 54 \text{ то } N = 5 \\ \text{якщо } Z \leq 36 \text{ то } N = 4 \\ \text{якщо } Z \leq 18 \text{ то } N = 3 \\ \text{якщо } Z \leq 10 \text{ то } N = 2 \\ \text{якщо } Z \leq 2 \text{ то } N = 1 \end{array} \right. \quad (3b)$$

де  $Z$  - атомний номер елемента.

Визначені значення  $N$  та  $Z_N$  дозволяють остаточно визначити конфігурацію зовнішньої оболонки, для чого задається початковий вектор значень електронної конфігурації і у вигляді циклу обчислюється кількість електронів у кожній орбіталі

$$Z_o = Z - Z_N$$

$$C = \{e_1, e_2, e_3, e_4\} = \{l(N, s), l(N, f), l(N, d), l(N, p)\} \quad (4a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} e_b = Z_o - (Z_o > e_b) \cdot (Z_o - e_b) \\ Z_o = (Z_o > e_b) \cdot (Z_o - e_b) \\ 1 < b < 4 \end{array} \right.$$

або це можна зробити у через умовні конструкції



$$\begin{aligned}
Z_O &= Z - Z_N \\
C = \{e_1, e_2, e_3, e_4\} &= \{l(N, s), l(N, f), l(N, d), 0\} \\
\left\{ \begin{array}{l}
\text{якщо } Z_N < e_1 \text{ то } e_1 = Z_N, Z_N = 0 \\
\text{якщо } Z_N > e_1 + e_2 + e_3 \text{ то } e_4 = Z_N - (e_1 + e_2 + e_3), Z_N = 0 \\
\text{якщо } Z_N > e_1 + e_2 \text{ то } e_3 = Z_N - (e_1 + e_2), Z_N = 0 \text{ інакше } e_3 = 0 \\
\text{якщо } Z_N > e_1 \text{ то } e_2 = Z_N - (e_1 + e_2) \text{ інакше } e_2 = 0
\end{array} \right.
\end{aligned} \tag{4b}$$

де  $Z_O$  - кількість електронів у зовнішній електронній оболонці.

Зворотній розрахунок порядкового номеру елемента при визначеній електронній конфігурації  $(N, e_s, e_f, e_d, e_p)$  розраховується за допомогою формули з використанням функцій (1) та (2)

$$Z = Z_N + e_1 \cdot l(N, s) + e_2 \cdot l(N, f) + e_3 \cdot l(N, d) + e_4 \cdot l(N, p) \tag{5}$$

Таким чином, в результаті роботи запропоновано 5 основних функцій, які достатні як для розрахунку електронної конфігурації елемента за його порядковим номером, так і визначенням порядкового номеру елемента за його електронною конфігурацією. Показано, що вони можуть бути представлені як у вигляді математичних та логічних операторів, так і у вигляді логічних конструкцій, що є важливим для використання їх у прикладних програмах.

## ВИКОРИСТАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Козуб П. А., Мігунов В. Л., Мірошніченко Н. М., Лук'янова В. А., Козуб С. М. Математична модель середніх мольних об'ємів елементів. Proceedings of the 13th International scientific and practical conference. CPN Publishing Group. Tokyo, Japan. 2022. Pp. 150-155. URL: <https://sci-conf.com.ua/xiii-mizhnarodna-naukovo-praktichna-konferentsiya-science-innovations-and-education-problems-and-prospects-28-30-07-2022-tokio-yaponiya-arhiv/>.
2. Miessler G.L. and Tarr D.A. *Inorganic Chemistry* (2nd ed., Prentice Hall 1999)
3. Ebbing, Darrell D. and Steven D Gammon. *General Chemistry*. 9th ed. Boston, Mass., Houghton Mifflin Co, 2007.