

Благодаря данному выражению можно создавать максимально объективную системно обоснованную оценку любого процесса обучения.

Привлекательным и крайне полезным для общества результатом в этом направлении является идентификация процессов интеллектуальной деятельности для оценки разных сторон интеллекта с перспективой создания экспертной системы формирования соответствующих прогностических оценок, выводов и рекомендаций. Следовательно, возможность адекватной идентификации процессов интеллектуальной деятельности личности можно считать одной из наиболее важных задач современной научно-исследовательской школы.

ВЫВОДЫ. Разработана классификация систем интеллектуальной деятельности личности по базовым функциям

Предложен оценочный критерий идентификации процессов для систем, обеспечивающих интеллектуальную деятельность.

ЛІТЕРАТУРА

1. Веллер, М. Все о жизни / М. Веллер – М.: ООО «Издательство АСТ», 2007. – 751 с.
2. Lutsenko, I. Systems engineering of optimal control I. Synthesis of the structure of the technological product conversion system (part1) / I. Lutsenko // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2014. – Vol. 62(72). – PP. 28-37. DOI: 10.15587/1729-4061.2014.28724
3. Lutsenko, I. Identification of target system operations. Development of global efficiency criterion of target operations / I. Lutsenko // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2015. – Vol. 2, Issue 2 (74). – PP. 35-40. doi: 10.15587/1729-4061.2015.38963.
4. Сердюк О. Ю. Комплексная оценка компьютерного тестирования / О.Ю. Сердюк // Технологический аудит и резервы производства. – № 6/4(20). – 2014. – С. 21-22. DOI: 10.15587/2312-8372.2014.29599

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ УСТОЙЧИВЫХ КОМПЛЕКСОВ В СИСТЕМАХ $M_3CrCl_6+18MCl$

Соловьев В.В., Черненко Л.А.

Полтавский национальный технический университет им. Ю. Кондратюка,
просп. Первомайский, 24, г. Полтава, 36011, Украина. E-mail: Schemenko@mail.ru

Кременецкий В.Г.

ФГБУН Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева КНЦ РАН,
г. Апатиты, Мурманская обл., 184209, Россия.

Проведено квантовохимическое обоснование существования в расплавах галогенидов щелочных металлов устойчивых комплексных частиц, образованных галогенидным комплексом переходного металла и внешнесферной оболочкой. В качестве примера использованы модельные системы $M_3CrCl_6+18MCl$ (M - Na, K). Сделан вывод об образовании в этих системах устойчивых частиц "комплекс + внешнесферная оболочка".

Ключевые слова: расплавы, хлоридный комплекс хрома, устойчивые частицы.

THEORETICAL MODELING OF THE FORMATION OF STABLE COMPLEXES IN SYSTEM $M_3CrCl_6+18MCl$

Solovyev V., Chernenko L.

Poltava National Technical University,
prosp. Pershotravnevyyi 24, Poltava, 36011, Ukraine. E-mail: Schemenko@mail.ru

Kremenetsky V.

Tananaev Institute of Chemistry and Technology of Rare Elements and Mineral Raw Materials, KSC, RAS Apatity,
Murmansk reg., 184209, Russia.

The main purpose of this work is quantum-chemical validation of existence in molten alkali metal halides the stable complex species formed by a complex of transition metal and an outer-sphere shell. As an example such model systems as $M_3CrCl_6+18MCl$ (M - Na, K) are used. Based on these data it was concluded about formation of the stable particles "complex plus outer-sphere shell" in these systems.

Key words: melts, chloride chromium complex, stable particles.

АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ. Известно, что при описании свойств комплексных частиц переходных металлов в расплавах галогенидов щелочных металлов необходимо учитывать влияние внешнего окружения комплексов. При квантовохимических исследованиях такого рода основным подходом является расчет параметров модельных систем, включающих в себя анионный комплекс с внешнесферной (ВС) катионной оболочкой. Однако состав этой сферы выбирается достаточно произвольно. В этой связи возникает задача поиска критериев, позволяющих указать состав доминирующих комплексных частиц в расплаве ГЦМ (по вторую КС включительно). В данной работе наряду с системой традиционного состава $pM^+ \cdot [CrCl_6]^{3-}$ (I) рассмотрена расширенная система $M_3CrCl_6+18MCl$ (II), где M - Na, K; p - число ВС катионов в рассматриваемой системе или фрагменте.

МАТЕРИАЛ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ. На рис. 1а приведена зависимость энергии образования внешнесферной катионной оболочки $E_{os}(I)$ в системе I, рассчитанная по соотношению (1)

$$E_{os}(I) = E(S) - E(com) - nE(M^+) \quad (1)$$