

ISSN (Print) 2616-6771
ISSN (Online) 2617-9962

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov
Eurasian National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ сериясы

CHEMISTRY. GEOGRAPHY. ECOLOGY Series

Серия ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ

№ 1(138)/2022

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2022

Nur-Sultan, 2022

Нур-Султан, 2022

Бас редактор **Копишев Э.Е.**
х.г.к., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Бас редактор **Берденов Ж.Г.**
PhD, қауымдас. проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Бас редактордың орынбасары **Уәли А.С.**
х.г.к., қауымдас. проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Редакция алқасы

Айбульдинов Е.К.	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Амерханова Ш.К.	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Атасой Е.	PhD, проф., Улудаг Университеті, Бурса, Түркия
Байсалова Г.Ж.	к.х.н., доцент., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Бейсенова Р.Р.	б.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Бакибаев А.А.	х.ғ.д., проф., Томск Политехникалық Университеті, Томск, Ресей
Жакупова Ж.Е.	х.ғ.к., доцент., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Джаналеева К.М.	проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Досмагамбетова С.С.	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Дунец А.Н.	проф., Алтай Мемлекеттік Университеті, Барнаул, Ресей
Еркасов Р.Ш.	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Жамангара А.К.	б.ғ.к., доцент., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Жангужина А.А.	PhD, аға оқытушы, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Иргебаева И.С.	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Инкарова Ж.И.	б.ғ.к., доцент., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Илеш А.	PhD, проф., Орадя университеті, Орадя, Румыния
Хуторянский В.В.	PhD, проф., Рендинг Университеті, Беркшир, Ұлыбритания
Масенов Қ.Б.	т.ғ.к., доцент., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Маштаева Ш.И.	г.ғ.д., доцент м.а., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Мустафин Р.И.	PhD, доцент., Қазан Мемлекеттік Медициналық Университеті, Қазан, Ресей
Озгелдинова Ж.	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Рамазанова Н.Е.	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Саипов А.А.	проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Саспугаева Г.Е.	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Сафаров Р.З.	х.ғ.к., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Шапекова Н.Л.	м.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Шатрук М.	PhD, проф., Флорида Мемлекеттік Университеті, Талахасси, АҚШ
Ян А. Вент	Хабилит. докторы, проф. Гдань Университеті, Гдань, Польша

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2,
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 402 б.
Тел: +7 (7172) 709-500 (ішкі 31-428). E-mail: vest_chem@enu.kz

Жауапты хатшы, компьютерде беттеген: А. Бекбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Химия.

География. Экология сериясы

Меншіктенуші: КеАҚ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті"

Мерзімділігі: жылына 4 рет

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 02.02.2021 ж.

№ KZ81VPY00031939 тіркеу куәлігімен тіркелген

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі 13/1

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-428). Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

Editor-in-Chief Kopishev E.E.
Candidate of Chemical Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Editor-in-Chief Berdenov Zh.G.
Ph.D., Associate Professor, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Deputy Editor-in-Chief Uali A.S.
Deputy Editor-in-Chief, Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

Editorial board

Aibuldinov E.K.	Ph.D., L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Amerkhanova Sh. K.	Doctor Chemical Sciences, Prof., L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Atasoy E.	Prof., Uludag University, Bursa, Turkey
Baysalova G.Zh.	Can. of Chemical Sciences, Assoc.Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Beysenova R.R.	Doctor of Biological Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Bakibayev A.A.	Doctor of Chemical Sciences, Prof., Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia
Dzhakupova Zh.E.	Can. of Chemical Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Dzhanaleyeva K.M.	Doctor of Geological Sciences, Professor, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Dosmagambetova S.S.	Doctor of Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Dunetc A.	Doctor of Geographic Sciences, Prof., Altai State University, Barnaul, Russia
Erkassov R.Sh.	Doctor of Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Zhamangara A.K.	Can. of Biological Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Zhanguzhina A.A.	Ph.D., Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan
Irgibayeva I.S.	Doctor Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Inkarova J.I.	Candidate of Biological Sciences, Associate Professor, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Ilesh A.	Ph.D., Professor, University of Oradea, Oradea, Romania
Khutoryanskiy V.V.	PhD, Prof., Universit, of Reading, Berkshire, Great Britain
Massenov K.B.	Can. of Technical Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Mashtaeva Sh.I.	Ph.D., Acting Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan
Mustafin R.I.	PhD, Assoc.Prof., Kazan State Medical University, Kazan, Russia
Ozgeldinova Zh.	PhD, L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Ramazanova N.E.	PhD, L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Saipov A.A.	Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Saspugayeva G.E.	PhD, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Safarov R.Z.	Candidate of Chemical Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Shapekova N.L.	Doctor of Medical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan
Shatruk M.	PhD, Prof., Florida State University, Tallahassee, USA
Jan A. Wendt	Dr.habil., Prof., Gdansk University, Poland

Editorial address: 2, Satpayev str., of. 402, L.N. Gumilyov Eurasian National University,
Nur-Sultan, Kazakhstan, 010008
Tel.: +7 (7172) 709-500 (ext. 31-428), E-mail: vest_chem@enu.kz

Responsible secretary, computer layout: Aliya Bekbayeva

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.

Chemistry. Geography. Ecology Series

Owner: Non-profit joint-stock company «L.N. Gumilyov Eurasian National University»

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan

Registration certificate № KZ81VPY00031939 from 02.02.2021

Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan 010008

Tel: +7 (7172) 709-500 (ext.31-428). Website: <http://bulchmed.enu.kz>

Главный редактор **Копишев Э.Е.**
к.х.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Главный редактор **Берденов Ж.Г.**
PhD, Ассоц. проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Зам. главного редактора **Уали А.С.**
к.х.н., Ассоц. проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Редакционная коллегия

Айбурдыев Е.К.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Амерханова Ш.К.	д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Атасой Е.	PhD, проф., Университет Улудаг, Бурса, Турция
Байсалова Г.Ж.	к.х.н., доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Бейсенова Р.Р.	д.б.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Бакибаев А.А.	д.х.н., проф., Томский Политехнический Университет, Томск, Россия
Джакупова Ж.Е.	к.х.н., доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Джаналеева К.М.	д.г.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Досмагамбетова С.С.	д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Дунец А.Н.	д.г.н., проф., Алтайский Государственный Университет, Барнаул, Россия
Еркасов Р.Ш.	д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Жамангара А.К.	к.б.н., доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Жангужина А.А.	PhD, ст. преподаватель, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Иргибайбаева И.С.	д.х.н., проф., доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Инкарова Ж.И.	к.б.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Илеш А.	PhD, проф., Университет Орадя, Орадя, Румыния
Хугорянский В.В.	PhD, проф. Университет, Рединг Беркшир, Великобритания
Масенов К.Б.	к.т.н., доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Маштаева Ш.И.	к.т.н., и.о. доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Мустафин Р.И.	PhD, доцент., Казанский Государственный Медицинский Университет, Казань, Россия
Озгелдинова Ж.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Рамазанова Н.Е.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Саипов А.А.	д.п.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Саспугаева Г.Е.	PhD, доцент., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Сафаров Р.З.	к.х.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Шапекова Н.Л.	д.м.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Шатрук М.	PhD, проф., Государственный Университет Флорида, Талахасси, США
Ян А.Вент	Хабилит. доктор Гданьский Университет, Гданьск, Польша

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 402
Тел: +7(7172) 709-500 (вн. 31-428). E-mail: vest_chem@enu.kz

Ответственный секретарь, компьютерная верстка: А. Бекбаева

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.

Серия Химия. География. Экология

Собственник: НАО «Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева»

Периодичность: 4 раза в год

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан

Регистрационное свидетельство № KZ81VPY00031939 от 02.02.2021 г.

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажымукана, 13/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-428). Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

МАЗМҰНЫ/ CONTENTS/ СОДЕРЖАНИЕ

ХИМИЯ/ CHEMISTRY

- Өмірзақ Н., Еркасов Р.С.* Протондалған ацетамидтері бар мыс галогендік кешендерінің құрылымдық қасиеттерін кванттық химиялық жолмен зерттеу
Omirzak N., Yerkašov R.S. Quantum chemical study of structural properties for copper halide complexes with protonated acetamides 7
- Өмірзақ Н., Еркасов Р.С.* Квантово-химическое исследование структурных свойств комплексов галогенидов меди с протонированными ацетамидами
- Ирғибаева И.С., Жапақова А.М., Ералинов А.Б.* Полимерлі иондық сұйықтық түзіле отырып трис негізінде CO₂ тұтудың тиімді әдісі
Irigibaeva I.S., Zhapakova A.M., Yeralinov A.B. An effective method of CO₂ capture with a tris-base with the formation of polymer ionic liquid 18
- Ирғибаева И.С., Жапақова А.М., Ералинов А.Б.* Эффективный метод улавливания CO₂ трис-основанием с образованием полимерной ионной жидкости
- Дүйсембиев М.Ж.* Қорытпалы алюмо-никелдік катализатор арқылы фурфуролды сутектендіріп тетрагидрофурфурил спиртін алу
Duisembiyev M.Zh. Production of tetrahydrofurfuryl alcohol by hydrogenation of furfuryl using an aluminum-nickel alloy catalyst 24
- Дүйсембиев М.Ж.* Получение тетрагидрофурфурилового спирта гидрированием фурфуrolа с использованием катализатора из алюминиево-никелевого сплава
- Дурдубаева Р., Бекназаров Х., Асаматдинов А., Юсупова Н.* Болаттың коррозиясын тежеуді қосалқы қалдықтарды пайдалана отырып зерттеу
Durdubaeva R., Beknazarov H., Asamatdinov A., Yusupova N. Study of steel corrosion inhibition with the use of secondary waste 31
- Дурдубаева Р., Бекназаров Х., Асаматдинов А., Юсупова Н.* Исследование ингибирования коррозии стали с использованием вторичных отходов

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ.СЕРИЯ: ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ
BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. CHEMISTRY.
GEOGRAPHY. ECOLOGY
ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. СЕРИЯ: ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ
SERIES
№1(138)/2022

ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ/ GEOGRAPHY. ECOLOGY

- Абубекирова А.Ш., Масенов К.Б.* Теміржол көлігі кәсіпорындарының қоршаған ортаға әсерін экологиялық-экономикалық талдау: («Қазақстан темір жолы» ҰК »АҚ филиалы-«Магистральдық желі дирекциясы мысалында») 37
- Abubekirova A.Sh., Massenov K.B.* Ecological and economic analysis of the impact of railway transport enterprises on the environment: (on the example of the branch of JSC «NC» Kazakhstan Temir Zholy)
- Абубекирова А.Ш., Масенов К.Б.* Эколого-экономический анализ воздействий предприятий железнодорожного транспорта на окружающую среду: (на примере филиала АО «НК «КТЖ»-«Дирекция магистральной сети») 37
- Зуева Н.Б., Жлоба Л.Д., Кунанбаев К.К., Поползухина Н.А.* Солтүстік Қазақстанның әртүрлі топырақ түрлерінде No-till технологиясын қолдану барысында өңделетін қабаттың жағдайын экологиялық бағалау 45
- Zueva N.B., Zhloba L.D., Kunanbayev K.K., Popolzhixinana N.A.* Ecological assessment of the condition of the arable layer with the No-till technology on different types of soils of Northern Kazakhstan
- Зуева Н.Б., Жлоба Л.Д., Кунанбаев К.К., Поползухина Н.А.* Экологическая оценка состояния пахотного слоя разных типов почв Северного Казахстана при использовании технологии No-till 45
- Тюружанова А., Нурмагамбетова А., Берденов Ж.Г.* Рудный қаласының атмосферасына шығарылатын заттарды модельдеу 53
- Turyuzhanova A., Nurmagambetova A., Berdenov Zh.G.* Modeling of emissions of pollutants into the atmosphere of the city of Rudnyy
- Тюружанова А., Нурмагамбетова А., Берденов Ж.Г.* Моделирование выбросов загрязняющих веществ в атмосферу города Рудный 53
- Кизилкаоглу Алааттин, Каплухан Ерол* Елтану пәні педагогика ғылымындағы жаһандық рөлі, мазмұны, мәні және болашағы 62
- Kizilcaoglu Alaattin, Kapluhan Erol* The global role, content, significance, and perspectives of world geography in educational science
- Кизилкаоглу Алааттин, Каплухан Ерол* Глобальная роль, содержание, значение и перспективы географии стран мира в педагогической науке 62

**N. Omirzak, R.S. Yerkasov***L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan
Corresponding author: nurilaumirzak@gmail.com, erkass@mail.ru

Quantum chemical study of structural properties for copper halide complexes with protonated acetamides

Abstract. *The chemistry of copper complexes, which contain organic ligands, is one of the important research areas for modern chemical technology and science. Herein, the copper complexes coordinated with organic ligands are playing an important role in many applications including crop production, animal husbandry, and pharmacology. At this point, the coordination of copper halides with acetamides are good research object for fundamental research. The purpose of the article is to perform quantum chemical calculations, and analysis for the coordination of copper halides (chloride, bromide) with acetamides using HyperChem software and PM3 method. The study helps with the rational design of copper halide complexes with acetamides.*

Keywords: *copper halides, acetamides, quantum chemical calculations, PM3 method, HyperChem.*

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-7-17>

Introduction

The transition metals are chemical elements that are located in the d-block of the periodic table and have the following general structures in their configurations $(n-1)d^{1-10}ns^{1-2}$, where n is the periodic number [1-5]. The transition metals are classified as 3d, 4d, and 5d elements, where copper is a 3d transition metal. Copper has unique properties including good electric conductivity, high density, high strength, high boiling, and melting point strength [5-12]. In addition, multiple coordination of organic ligands with copper metal is forming complexes called "coordination compounds", where coordination bonds are present between organic ligands and copper metal [9-15]. The chemistry of copper halide complexes with the coordination of organic ligands is one of the interesting research areas of scientists.

At the same time, the two-electron donor centers in amide molecules such as carbonyl oxygen, and amine nitrogen provide them with unique chemical and physical properties and become special objects of basic chemical research [12-16]. Moreover, several complex compounds of transition metals coordinated with organic ligands are implemented in organic and inorganic synthesis [14-18]. Herein, the quantum chemical study of copper halide complexes with coordination of organic ligands are important to study by various software such as Gaussian16, HyperChem, Materials Studio, Spartan, and others [15-18]. In addition, the copper halide complexes coordination with the nitrogen and oxygen atoms of acetamide is very important which determine the physical and chemical properties of obtained copper halide complexes [18-22]. In this regard, the quantum chemical parameters such as optimized structures, bond length, bond angles, dihedral angles, molecular electrostatic maps, molecular orbitals for various copper halide complexes coordinated with organic ligands are highly important to study and understand their structural properties in this current research work [19-25].

The article is aimed at determining the physicochemical properties of copper halides (chloride, bromide) coordinated with acetamides via quantum chemical calculations. Consequently, we will

construct various computational models of copper halides coordinating with acetamide as complexes for our computational work. At this stage, copper halides will be coordinated with acetamide via two options such as i) by nitrogen atom of an amine group, and ii) by oxygen of carbonyl group. After that, the quantum chemical properties including optimized structures, bond length, bond angles, charge distributions, molecular orbital distributions, and energies will be studied for copper halides (chloride, bromide) with acetamide structures.

Methods and materials

Calculations were performed using the semi-empirical quantum chemical PM3 method, which is part of the software package MOPAC 7 and HyperChemPro 8.0. The 2D structures of acetamide, protonated acetamide, and copper halides with protonated acetamides were illustrated in Figure 1. The geometry optimizations were performed via HyperchemPro 8.0 software using the PM3 method to obtain optimized structures, bond length, bond angles, charge distributions, molecular orbital distributions, and energies of designed systems.

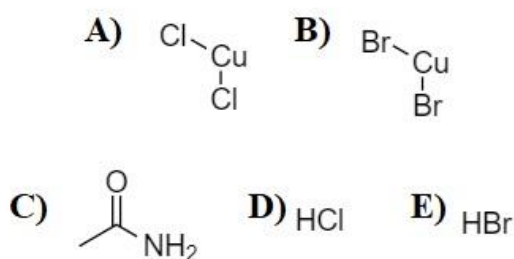


Figure 1. The 2D structures of A) Copper chloride, B) Copper Bromide, C) Acetamide, D) Hydrochloric acid, and E) Hydrobromic acid

The chemical structures of copper chloride, copper bromide, acetamide, hydrochloric acid, and hydrobromic acid were illustrated in Figure 1. Moreover, the designed systems to study the electronic structural properties of copper halide complexes with acetamide were illustrated in Table 1. As can be seen from Table 1, pure acetamide was designed for quantum chemical calculation to understand the structural properties of unprotonated acetamide. Next, acetamide was coordinated with hydrochloric acid to design protonated acetamide with hydrochloric acid. Thirdly, acetamide was coordinated with hydrobromic acid to design protonated acetamide with hydrobromic acid. Fourthly, unprotonated acetamide was coordinated with copper (II) chloride to study the energetic, electronic, and geometrical properties of copper (II) chloride coordinated with unprotonated acetamide. Fifthly, unprotonated acetamide was coordinated with copper (II) bromide to study the energetic, electronic, and geometrical properties of copper (II) bromide coordinated with unprotonated acetamide. After that, protonated acetamide with hydrochloric acid was coordinated with copper (II) chloride to study the energetic, electronic, and geometrical properties of copper (II) chloride coordinated with protonated acetamide with hydrochloric acid. Finally, protonated acetamide with hydrobromic acid was coordinated with copper (II) bromide to study the energetic, electronic, and geometrical properties of copper (II) bromide coordinated with protonated acetamide with hydrobromide acid as can be seen in Table 1.

Table 1

The description of designed systems in our current work

Acetamide	HCl	HBr	$CuCl_2$	$CuBr_2$	Purpose
1	-	-	-	-	Unprotonated Acetamide
1	1	-	-	-	Protonated Acetamide
1	-	1	-	-	Protonated Acetamide
1	-	-	1	-	$CuCl_2$ with unprotonated acetamide
1	-	-	-	1	$CuBr_2$ with unprotonated acetamide
1	1	-	1	-	$CuCl_2$ with protonated acetamide
1	-	1	-	1	$CuBr_2$ with protonated acetamide

Results. Identification of energetic, electronic, and geometrical parameters of unprotonated and protonated acetamide. As mentioned above, the structural properties of unprotonated and protonated acetamide were studied in this section by HyperChem software using the PM3 method. As can be seen from Figure 2, the optimized structures of unprotonated and protonated acetamide were illustrated.

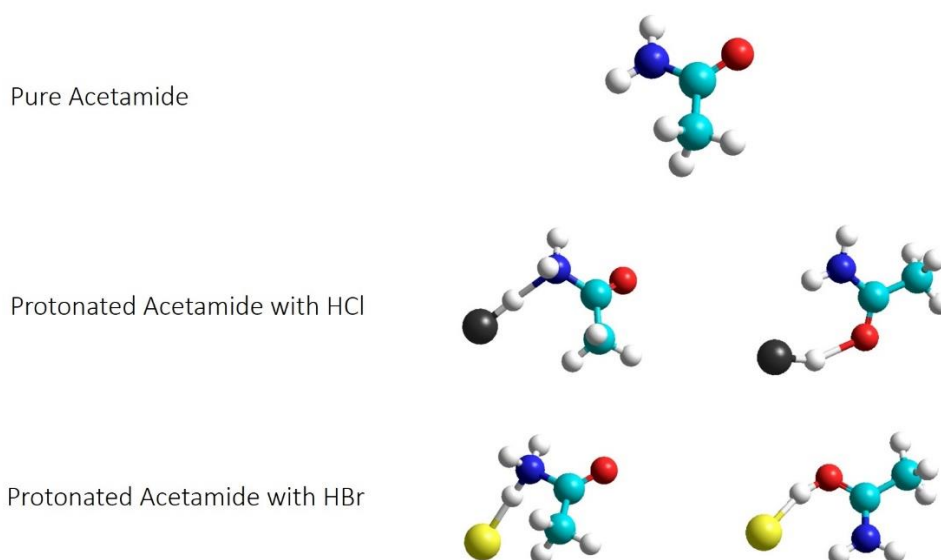


Figure 2. The quantum chemical calculation is based on optimized structures for pure acetamide, protonated acetamide with HCl, and finally protonated acetamide with HBr.

Color keys: nitrogen: blue; gray: hydrogen; violet: carbon; oxygen: red; chloride: black; bromine: yellow.

Moreover, the results of optimization including energies, dipole moments, charges, distances, and angles were illustrated in Table 2. The quantum chemical parameters for acetamide, HCl coordinated with N atom of acetamide, HCl coordinated with O atom of acetamide, HBr coordinated with N atom of acetamide, HBr coordinated with O atom of acetamide were illustrated in Table 2.

Table 2

Parameters of optimization for unprotonated and protonated acetamide

Parameters	Acetamide	Acetamide+HCl by N	Acetamide+HBr by N	Acetamide+HC l by O	Acetamide+ HBr by O
-E (total), kcal/mol	-17769.1	-25446.40	-26288.3	-25448.1	-26285.00
μ, D	3.78	3.78	7.591	5.067	10.79
q (O)	-0.321	-0.321	-0.261	-0.431	-0.260
q (N)	-0.014	-0.014	0.366	0.006	0.181
q (C)	0.219 -0.142	0.219 -0.142	0.203 -0.166	0.238 -0.129	0.193 -0.123
r (C=O), nm	1.2164	1.2164	1.2073	1.2369	1.2921
r (C-C), nm	1.5011	1.5011	1.4927	1.5031	1.5008
r (C-N), nm	1.4516	1.4516	1.5152	1.3874	1.3526
r (O-HX, X is Cl or Br), nm	-	-	-	1.7447	1.0371
r (N-HX, X is Cl or Br), nm	-	1.7505	1.1172	-	-
Angle, O-C-N	117.4859	117.4859	115.5702	117.2532	122.1379
Angle, O-C-C	125.5723	125.5723	128.3617	123.7668	117.0125
Angle, O or N - H-X (X is Cl or Br)	-	170.1912	163.9789	152.7383	161.5919

Identification of energetic, electronic, and geometrical parameters of unprotonated and protonated acetamide coordinated with copper (II) halides. As mentioned above, the quantum chemical calculation results including energies, dipole moments, charges, bond length, and bond angles for copper halide coordination with unprotonated and protonated acetamide were discussed in this part. Herein, the quantum chemical parameters for copper chloride coordinated with hydrochloric acid by nitrogen and oxygen atoms, copper bromide coordinated with hydrobromic acid by nitrogen and oxygen atoms are discussed in detail. The optimized structures for the copper halide (chloride or bromide) coordinated with pure acetamide, copper chloride coordinated with protonated acetamide with HCl, and finally, copper bromide coordinated with protonated acetamide with HBr were illustrated in Figure 3.

The quantum chemical properties for copper halide (chloride or bromide) coordinated with pure acetamide was illustrated in Table 3. The quantum chemical properties for copper chloride coordinated with protonated acetamide with HCl, and finally, copper bromide coordinated with protonated acetamide with HBr were illustrated in Table 4.

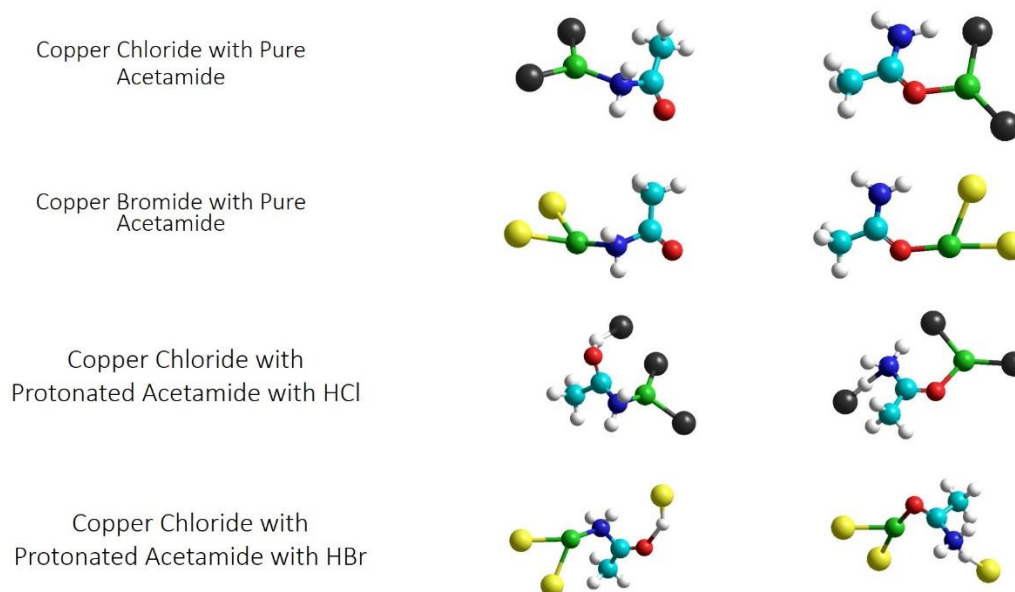


Figure 3. The quantum chemical calculation is based on optimized structures for copper halide (chloride or bromide) coordinated with pure acetamide, copper chloride coordinated with protonated acetamide with HCl, and finally, copper bromide coordinated with protonated acetamide with HBr. Color keys: nitrogen: blue; gray: hydrogen; violet: carbon; oxygen: red; chloride: black; bromine: yellow.

Table 3

Parameters of optimization for copper halide coordination with unprotonated acetamide

Parameters	$CuCl_2$ +Acetamide by N	$CuCl_2$ +Acetamide by O	$CuBr_2$ +Acetamide by N	$CuBr_2$ +Acetamide by O
-E (total), kcal/mol	-59697.8	-59686.6	-61394.3	-61376.2
μ, D	5.48	5.266	6.668	10.14
q (O)	-0.273	-0.200	-0.270	-0.239
q (N)	0.547	-0.019	0.450	0.120
q (C)	0.165	0.181	0.178	0.203
q (Cu)	-0.341	-0.146	-0.161	0.044
r (C=O), nm	1.2108	1.295	1.2099	1.277
r (C-C), nm	1.4954	1.5039	1.4965	1.5045

r (C-N), nm	1.5246	1.3555	1.5177	1.3674
r (Cu-X (X is Cl or Br)), nm	2.1408 2.1704	2.2124 2.1275	2.4238 2.4223	2.4427 2.3980
r (N-Cu), nm	1.9112	-	1.9232	-
r (O-Cu), nm	-	1.8946	-	1.9097
Angle, O-C-N	115.5974	122.9816	116.0607	123.4406
Angle, O-C-C	126.5563	116.0873	126.5579	117.3119
Angle, C-N or O-Cu	124.0378	127.9239	125.5949	133.106
Angle, X-Cu-N or O	125.5848 113.9035	103.5923 125.4748	136.8242 139.2161	117.5904 175.1818

Table 4

Parameters of optimization for copper halide coordination with protonated acetamide

Parameters	$CuCl_2$ +Acetamide+ HCl by O	$CuCl_2$ +Acetamide+ HCl by N	$CuBr_2$ +Acetamide+ HCl by O	$CuBr_2$ +Acetamide +HCl by N
-E (total), kcal/mol	-67362.4	-67357.2	-69903.4	-69902.3
μ, D	6.275	4.766	5.541	7.465
q (O)	-0.300	-0.169	-0.303	-0.134
q (N)	0.692	0.103	0.451	0.426
q (C)	-0.024	0.224	-0.159	0.098
q (Cu)	-0.389	-0.154	-0.157	-0.127
r (C=O), nm	1.4023	1.2777	1.2175	1.3342
r (C-C), nm	1.5288	1.5026	1.4954	1.5265
r (C-N), nm	1.4764	1.3898	1.5124	1.545
r (Cu-X (X is Cl or Br)), nm	2.16 2.1403	2.2085 2.1257	2.4332 2.4129	2.351 2.3678
r (N-Cu), nm	1.8948	-	1.9248	-
r (O-Cu), nm	-	1.9003	-	1.8789
Angle, O-C-N	112.3214	123.1026	116.9329	117.4859

Angle, O-C-C	110.1739	117.1607	125.3114	125.5723
Angle, C-N or O-Cu	75.9901	127.835	122.4702	151.2548
Angle, X-Cu-N or O	144.2997 108.4462	126.0109 103.2195	119.6481 137.2847	141.4844 112.5839

Discussion

The unprotonated and protonated acetamides, and then the copper halides (chloride, and bromide) coordination with unprotonated and protonated acetamides were studied in this research work via HyperChem software package using the PM3 method. As a result, coordination of copper halides with unprotonated and protonated acetamides was leading to important structural change in comparison with pure unprotonated and protonated acetamides. In this regard, quantum chemical parameters including energies, dipole moments, charges, bond length, and bond angles were illustrated in Table 2-3, and Figure 2-3.

Herein, we can obviously note that the highest negative charge belongs to the oxygen atom of the acetamide compound when coordinated with copper halides. The results imply that the charge of oxygen is around -0.273 when copper chloride is coordinated with unprotonated acetamide, and then the charge of oxygen is around -0.300 when copper chloride is coordinated with protonated acetamide. In addition, the charges of nitrogen, in this case, were reaching the highest value around +0.692 for coordination of copper chloride with protonated acetamide, and +0.451 for coordination of copper bromide with protonated acetamide by oxygen atom. It could mean that the proton of acetamide could connect with the oxygen atom of the carbonyl group of acetamide.

Basically, the quantities of total energy obtained by quantum chemical method. The following conclusion can be drawn from the comparison, that is, all the total energy of the calculated models and their qualitative composition depending on the construction and the calculation of the chosen research method.

Conclusion

To sum up, the quantum chemical calculations were performed for the pure acetamide, protonated acetamide with HCl, protonated acetamide with HBr, copper halide (chloride or bromide) coordinated with pure acetamide, copper chloride coordinated with protonated acetamide with HCl, and finally, copper bromide coordinated with protonated acetamide with HBr. The quantum chemical parameters such as energies, dipole moments, charges, bond length, and bond angles were illustrated and discussed in detail.

As a result, we can conclude that the highest charge of oxygen and nitrogen atoms was obtained when copper halides are coordinated by oxygen atoms of protonated acetamide compound. Moreover, we can see that this could mean a proton could connect with the oxygen atom of acetamide.

These quantum chemical calculations results are very important in the future to the rational design of the complexes of copper halides which are coordinated with organic ligands such as unprotonated and protonated acetamides. Copper halide complexes have a wide range of applications including crop production, animal husbandry, and pharmacology.

References

1. Hassan F.E.H., Zaoui A., Sekkal W. Structural properties of copper halides //Materials Science and Engineering: B. – 2001. – Vol. 87(1). – P. 40-47.
2. Ferhat M., Zaoui A., Certier M., Dufour J.P., Khelifa B. Electronic structure of the copper halides CuCl, CuBr and CuI. //Materials Science and Engineering: B. – 1996. – Vol. 39(2). – P. 95-100.
3. Li G., Shi Z., Liu X., Dai Z., Feng S. Low-dimensional hybrid copper halides with novel D6R Cu₆I₆ cores //Inorganic chemistry. – 2004. – Vol. 43(22). – P. 6884-6886.
4. Sekkal W., Zaoui A. Monte Carlo study of transport properties in copper halides //Physica B: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 315(1-3). – P. 201-209.
5. Popov L.D., Shcherbakov I.N., Levchenkov S.I., Tupolova Y.P., Kogan V.A., Lukov V.V. Binuclear copper (II) and oxovanadium (IV) complexes with 2, 6-diformyl-4-tert-butylphenol-bis-(1'-phthalazinylhydrazone). Synthesis, properties and quantum chemical study //Journal of Coordination Chemistry. – 2008. – Vol. 61(3). – P. 392-409.
6. Seo J.H., Lee S.K., Lee I. Quantum chemical calculations of equilibrium copper (I) isotope fractionations in ore-forming fluids //Chemical Geology. – 2007. – Vol. 243(3-4). – P. 225-237.
7. Bower J.K., Cypcar A.D., Henriquez B., Stieber S.C.E., Zhang S. C (sp³)-H fluorination with a copper (II)/(III) redox couple //Journal of the American Chemical Society. – 2020. – Vol. 142(18). – P. 8514-8521.
8. Olshin P.K., Myasnikova O.S., Kashina M.V., Gorbunov A.O., Bogachev N.A., Kompanets V.O., Mereshchenko A.S. The electronic spectra and the structures of the individual copper (II) chloride and bromide complexes in acetonitrile according to steady-state absorption spectroscopy and DFT/TD-DFT calculations //Chemical Physics. – 2018. – Vol. 503. – P. 14-19.
9. Ignaczak A., Gomes J.A.N.F. Quantum calculations on the adsorption of halide ions on the noble metals //Journal of Electroanalytical Chemistry. – 1997. – Vol. 420(1-2). – P. 71-78.
10. Shcherbakov I.N., Popov L.D., Levchenkov S.I., Morozov A.N., Kogan V.A., Vikrishchuk A.D. Specificity of complex formation of benzoin (phthalazin-1-yl) hydrazone with copper (II) and nickel (II): Physicochemical study and quantum-chemical simulation //Russian Journal of General Chemistry. – 2009. – Vol. 79(4). – P. 826-832.
11. Lan Z., Meng J., Zheng K., Castelli I.E. Exploring the Intrinsic Point Defects in Cesium Copper Halides //The Journal of Physical Chemistry C. – 2021. – Vol. 125(2). – P. 1592-1598.
12. Remy-Speckmann I., Bredow T., Lerch M. Two new quaternary copper bismuth sulfide halides: CuBi₂S₃Cl and CuBi₂S₃Br as candidates for copper ion conductivity. Zeitschrift für Physikalische Chemie. – 2021. – Vol. 236 – P. 727-740.
13. Kepp K.P. Halide binding and inhibition of laccase copper clusters: the role of reorganization energy //Inorganic Chemistry. – 2015. – Vol. 54(2). – P. 476-483.
14. Li X. Metallophilic interaction in gold halide: Quantum chemical study of AuX (X= F at) //Journal of Computational Chemistry. – 2014. – Vol. 35(12). – P. 923-931.
15. Hargittai M., Schwerdtfeger P., Réffy B., Brown R. The Molecular Structure of Different Species of Cuprous Chloride from Gas-Phase Electron Diffraction and Quantum Chemical Calculations //Chemistry—A European Journal. – 2003. – Vol. 9(1). – P. 327-333.
16. Shamsieva A.V., Kolesnikov I.E., Strel'nik I.D., Gerasimova T.P., Kalinichev A.A., Katsyuba S.A., Sinyashin O.G. Fresh look on the nature of dual-band emission of octahedral copper-iodide clusters—promising ratiometric luminescent thermometers //The Journal of Physical Chemistry C. – 2019. – Vol. 123(42). – P. 25863-25870.
17. Ignaczak A., Gomes J.N. Interaction of halide ions with copper: the DFT approach //Chemical physics letters. – 1996. – Vol. 257(5-6). – P. 609-615.

18. Gerengi H., Mielniczek M., Gece G., Solomon M.M. Experimental and quantum chemical evaluation of 8-hydroxyquinoline as a corrosion inhibitor for copper in 0.1 M HCl // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2016. – Vol. 55(36). – P. 9614-9624.
19. Shamsieva A.V., Musina E.I., Gerasimova T.P., Strel'nik I.D., Strel'nik A.G., Kolesnikov I.E., Sinyashin O.G. Triple-bridged helical binuclear copper (I) complexes: Head-to-head and head-to-tail isomerism and the solid-state luminescence // *Dalton Transactions*. – 2020. – Vol. 49(34). – P. 11997-12008.
20. Bi C., Wang S., Li Q., Kershaw S.V., Tian J., Rogach A.L. Thermally stable copper (II)-doped cesium lead halide perovskite quantum dots with strong blue emission // *The journal of physical chemistry letters*. – 2019. – Vol. 10(5). – P. 943-952.
21. Huang G., Xia Y. Catalyst-Controlled C–C σ Bond Cleavages in Metal Halide-Catalyzed Cycloisomerization of 3-Acylcyclopropenes via a Formal 1, 1-Halometalation Mechanism: Insights from Quantum Chemical Calculations // *ACS Catalysis*. – 2015. – Vol. 5(2). – P. 859-868.
22. Huang H.Y., Padin J., Yang R.T. Anion and cation effects on olefin adsorption on silver and copper halides: Ab initio effective core potential study of π -complexation // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 1999. – Vol. 103(16). – P. 3206-3212.
23. Kuznetsov A., Reinhold J., Lorenz W. Quantum chemical studies of the chemisorption of water and of unhydrated and hydrated halide ions on mercury // *Journal of electroanalytical chemistry and interfacial electrochemistry*. – 1984. – Vol. 164(1). – P. 167-175.
24. Brewer G.J. Copper in medicine. Current opinion in chemical biology. – 2003. – Vol. 7(2). – P. 207-212.
25. Puig S., Thiele D.J. Molecular mechanisms of copper uptake and distribution. Current opinion in chemical biology. – 2002. – Vol. 6(2). – P. 171-180.

Н. Өмірзақ, Р.С. Еркасов

А.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Протондалған ацетамидтері бар мыс галогендік кешендерінің құрылымдық қасиеттерін кванттық химиялық жолмен зерттеу

Аңдатпа. Құрамында органикалық лигандтары бар мыс кешендерінің химиясы қазіргі заманғы химиялық технология мен ғылым үшін маңызды зерттеу бағыттарының бірі болып табылады. Бұл жерде органикалық лигандтармен үйлестірілген мыс кешендері өсімдік шаруашылығында, мал шаруашылығында, фармакологияда және көптеген қосымшаларда маңызды рөл атқарады. Осы кезде мыс галогенидтерін ацетамидтермен үйлестіру іргелі зерттеулер үшін жақсы зерттеу объектілері болып табылады. Ағымдағы жұмыстың мақсаты – HyperChem бағдарламалық құралын және РМЗ әдісін қолдана отырып, кванттық химиялық есептеулер мен мыс галогенидтерін (хлорид, бромид) ацетамидтермен үйлестіру үшін талдау жасау. Мақала ацетамидтермен мыс галогенді кешендерін ұтымды жобалауға көмектеседі.

Түйін сөздер: мыс галогениді, ацетамид, кванттық-химиялық есептеулер, РМЗ әдісі, HyperChem.

Н. Омирзак, Р.С. Еркасов

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Квантово-химическое исследование структурных свойств комплексов галогенидов меди с протонированными ацетамидами

Аннотация. Химия комплексов меди, содержащих органические лиганды, является одним из важных направлений современной химической технологии и науки. Здесь комплексы меди, скоординированные с органическими лигандами, играют важную роль во многих приложениях, включая растениеводство, животноводство и фармакологию. На данный момент координация галогенидов меди с ацетамидами является хорошим объектом для фундаментальных исследований. Целью данной статьи являются выполнение квантово-химических расчетов и анализ координации галогенидов меди (хлорид, бромид) с ацетамидами с использованием программного обеспечения HyperChem и метода РМЗ. Настоящая работа поможет рационально сконструировать комплексы галогенидов меди с ацетамидами.

Ключевые слова: галогениды меди; ацетамиды; квантово-химические расчеты; РМЗ метод; HyperChem.

References

1. Hassan F.E.H., Zaoui A., Sekkal W. Structural properties of copper halides, *Materials Science and Engineering: B*, 87(1), 40-47 (2001).
2. Ferhat M., Zaoui A., Certier M., Dufour J.P., Khelifa B. Electronic structure of the copper halides CuCl, CuBr and CuI., *Materials Science and Engineering: B*. 39(2), 95-100 (1996).
3. Li G., Shi Z., Liu X., Dai Z., Feng S. Low-dimensional hybrid copper halides with novel D6R Cu₆I₆ cores, *Inorganic chemistry*, 43(22), 6884-6886 (2004).
4. Sekkal W., Zaoui A. Monte Carlo study of transport properties in copper halides, *Physica B: Condensed Matter*, 315(1-3), 201-209 (2002).
5. Popov L.D., Shcherbakov I.N., Levchenkov S.I., Tupolova Y.P., Kogan V.A., Lukov V.V. Binuclear copper (II) and oxovanadium (IV) complexes with 2, 6-diformyl-4-tert-butylphenol-bis-(1'-phthalazinylhydrazone). Synthesis, properties and quantum chemical study, *Journal of Coordination Chemistry*. 61(3), 392-409 (2008).
6. Seo J.H., Lee S.K., Lee I. Quantum chemical calculations of equilibrium copper (I) isotope fractionations in ore-forming fluids, *Chemical Geology*, 243(3-4), 225-237 (2007).
7. Bower J.K., Cypcar A.D., Henriquez B., Stieber S.C.E., Zhang S. C (sp³)-H fluorination with a copper (II)/(III) redox couple, *Journal of the American Chemical Society*, 142(18), 8514-8521 (2020).
8. Olshin P.K., Myasnikova O.S., Kashina M.V., Gorbunov A.O., Bogachev N.A., Kompanets V.O., Mereshchenko A.S. The electronic spectra and the structures of the individual copper (II) chloride and bromide complexes in acetonitrile according to steady-state absorption spectroscopy and DFT/TD-DFT calculations, *Chemical Physics*, 503, 14-19 (2018).
9. Ignaczak A., Gomes J.A.N.F. Quantum calculations on the adsorption of halide ions on the noble metals, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 420(1-2), 71-78 (1997).
10. Shcherbakov I.N., Popov L.D., Levchenkov S.I., Morozov A.N., Kogan V.A., Vikrishchuk A.D. Specificity of complex formation of benzoin (phthalazin-1-yl) hydrazone with copper (II) and nickel (II): Physicochemical study and quantum-chemical simulation, *Russian Journal of General Chemistry*, 79(4), 826-832 (2009).
11. Lan Z., Meng J., Zheng K., Castelli I.E. Exploring the Intrinsic Point Defects in Cesium Copper Halides, *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(2), 1592-1598 (2021).

12. Remy-Speckmann I., Bredow T., Lerch M. Two new quaternary copper bismuth sulfide halides: CuBi₂S₃Cl and CuBi₂S₃Br as candidates for copper ion conductivity, *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 236, 727-740 (2021).
13. Kepp K.P. Halide binding and inhibition of laccase copper clusters: the role of reorganization energy, *Inorganic Chemistry*, 54(2), 476-483 (2015).
14. Li X. Metallophilic interaction in gold halide: Quantum chemical study of AuX (X= F at), *Journal of Computational Chemistry*, 35(12), 923-931 (2014).
15. Hargittai M., Schwerdtfeger P., Réffy B., Brown R. The Molecular Structure of Different Species of Cuprous Chloride from Gas-Phase Electron Diffraction and Quantum Chemical Calculations, *Chemistry—A European Journal*, 9(1), 327-333 (2003).
16. Shamsieva A.V., Kolesnikov I.E., Strel'nik I.D., Gerasimova T.P., Kalinichev A.A., Katsyuba S.A., Sinyashin O.G. Fresh look on the nature of dual-band emission of octahedral copper-iodide clusters—promising ratiometric luminescent thermometers, *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(42), 25863-25870 (2019).
17. Ignaczak A., Gomes J.N. Interaction of halide ions with copper: the DFT approach, *Chemical physics letters*, 257(5-6), 609-615 (1996).
18. Gerengi H., Mielniczek M., Gece G., Solomon M.M. Experimental and quantum chemical evaluation of 8-hydroxyquinoline as a corrosion inhibitor for copper in 0.1 M HCl, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(36), 9614-9624 (2016).
19. Shamsieva A.V., Musina E.I., Gerasimova T.P., Strel'nik I.D., Strel'nik A.G., Kolesnikov I.E., Sinyashin O.G. Triple-bridged helical binuclear copper (I) complexes: Head-to-head and head-to-tail isomerism and the solid-state luminescence, *Dalton Transactions*, 49(34), 11997-12008 (2020).
20. Bi C., Wang S., Li Q., Kershaw S.V., Tian J., Rogach A.L. Thermally stable copper (II)-doped cesium lead halide perovskite quantum dots with strong blue emission, *The journal of physical chemistry letters*, 10(5), 943-952 (2019).
21. Huang G., Xia Y. Catalyst-Controlled C–C σ Bond Cleavages in Metal Halide-Catalyzed Cycloisomerization of 3-Acylcyclopropenes via a Formal 1, 1-Halometalation Mechanism: Insights from Quantum Chemical Calculations, *ACS Catalysis*, 5(2), 859-868 (2015).
22. Huang H.Y., Padin J., Yang R.T. Anion and cation effects on olefin adsorption on silver and copper halides: Ab initio effective core potential study of π -complexation, *The Journal of Physical Chemistry B*, 103(16), 3206-3212 (1999).
23. Kuznetsov A., Reinhold J., Lorenz W. Quantum chemical studies of the chemisorption of water and of unhydrated and hydrated halide ions on mercury, *Journal of electroanalytical chemistry and interfacial electrochemistry*, 164(1), 167-175 (1984).
24. Brewer G.J. Copper in medicine. Current opinion in chemical biology, 7(2), 207-212 (2003).
25. Puig S., Thiele D.J. Molecular mechanisms of copper uptake and distribution. Current opinion in chemical biology, 6(2), 171-180 (2002).

Information about authors:

Omirzak N. – Master student in Chemistry, Department of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Yerkasov R.S. – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Department of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Өмірзақ Н. – химия факультетінің магистранты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Ерқасов Р.С. – х.ғ.д., химия кафедрасының профессоры, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

И.С. Иргибаетова*, ¹А.М. Жапакова, ²А.Б. Ералинов

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

*Автор для корреспонденции: irgsm@mail.ru

(e-mail: ¹asel.aitumbetova@gmail.com, ²alibek_06.kzr@mail.ru)

Эффективный метод улавливания CO₂ трис-основанием с образованием полимерной ионной жидкости

Аннотация. Все большее внимание уделяется изменению климата из-за возникновения парникового эффекта, это породило развивающуюся область исследований по поиску решений данной проблемы. В этой статье основное внимание уделяется разработке эффективного метода по улавливанию углекислого газа с образованием полимерной ионной жидкости без использования растворителей, согласно концепции «зеленой» химии. Для исследования был взят трис-амидин. Данные эксперименты используются в лабораторных масштабах.

Ключевые слова: улавливание CO₂, ионная жидкость, амидин.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-18-23>

Введение

С каждым годом увеличивается концентрация углекислого газа в атмосфере, это способствует глобальному потеплению, которое приводит к экологическим проблемам. 86% парниковых газов составляет выбросы углекислого газа при сжигании твердого топлива [1]. На сегодняшний день разработка эффективного метода улавливания CO₂ газа является актуальной темой для исследования. Хорошо изучены процессы по фиксации углекислого газа, такие как химически обратимое улавливание CO₂ первичными аминами в полярном апротонном растворителе с образованием карбаминовых кислот [2]. Однако эти процессы используют амины в два раза больше, а температура для высвобождения CO₂ довольно высокая.

Перспективная технология улавливания и использования углерода (CCS) заключается в преобразовании CO₂ в ценный продукт после первичного улавливания.

В последнее время углекислый газ рассматривают в качестве ископаемого источника. Поэтому перспективны переработка CO₂ и разработка новых технологий использования в энергетическом и химическом направлениях. Пищевая, химическая, электронная и многие другие промышленности используют CO₂ [3,4]. Так, в качестве альтернативного топлива и/или промежуточного продукта при производстве бензина, олефина возможно CO₂ преобразовать в диметиловый эфир [5]. Проекты CCS занимаются улавливанием углекислого газа непосредственно на промышленных предприятиях и дальнейшее хранение их в пластах-хранилищах под землей. По технологии CCS-EOR при утилизации углекислого газа в пласте увеличивается приток нефти к скважине, в результате понижается вязкость и увеличивается подвижность нефти. До 15% запасов нефти извлекается из пласта [6].

Альтернативой являются ионные жидкости, обладающие такими уникальными свойствами, как экологичность, стабильность, негорючесть и возможность повторного использования. Они широко используются в различных областях.

В нескольких исследованиях рассматривалось использование метода FTIR для мониторинга реакции CO₂ с производными амидина и гуанидина. В частности, образование бикарбоната при реакции амидина с CO₂ приводит к наличию полос при 1651 и 1602 см⁻¹, соответствующих валентным колебаниям протонированного группа C=N и бикарбонат соответственно.

В настоящем исследовании мы исследовали реакцию между диметилацеталем N, N-диметилформамида и алифатическим амином, содержащим три гидроксигруппы, такие как трис (гидроксиэтил) аминометан (ТРИС) с диметилацеталем N,N-диметилформамида. Продуктом этой реакции является гидроксисодержащее производное амидина. Его взаимодействие с диоксидом углерода, приводящее к образованию полимерной ионной жидкости, исследовано методами ИК-Фурье и измерением вязкости.

Материалы и методы исследования

Общая методика исследования по синтезу трис-амидинов выглядит следующим образом: трис-амин добавляют к N, N – диметилформамид диметилацеталь при перемешивании в колбу при температуре 40-50°C в течение 3-х часов. Барботирование CO₂-газа через раствор приготовленного трис-амидина проводили при комнатной температуре, в результате образуется очень вязкая полимерная ионная жидкость (Рисунок 1).

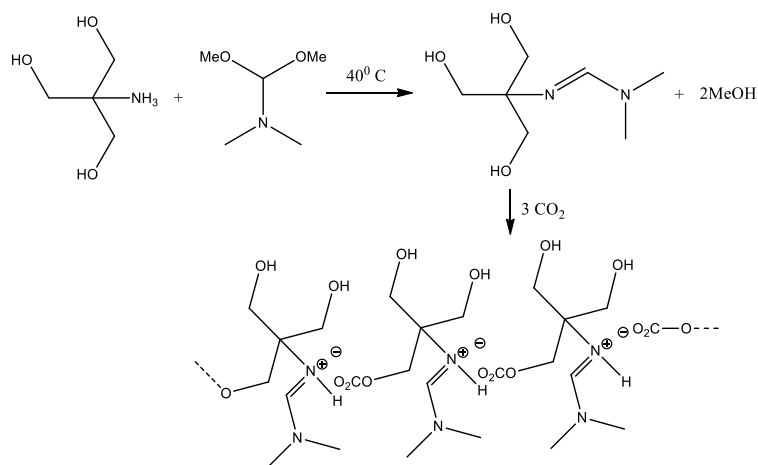


Рисунок 1. Приготовление амидинового производного реакцией трис-основания с диметоксиацеталем диметилформамидом

Вязкость измеряли капиллярным вискозиметром ВПЖ-4 (Рис.1). Для этого брали 0,5 г амидина и 15 мл растворителя и измеряли относительную вязкость с использованием времени истечения раствора t и времени истечения растворителя t_0 ($\eta_{\text{отн}} = t / t_0$)



Рисунок 2. Вискозиметр ВПЖ-4 для измерения относительной вязкости

Результаты

В ходе продувания CO₂-газом раствора трис-амидина при 80 минут увеличилась вязкость, что характеризует полимерную ионную жидкость.

Согласно литературным данным [7, 8, 9], в ИК-спектрах продукта взаимодействия амидинов с CO₂ наблюдается сильный пик с центром при 1652 см⁻¹. в диапазоне 1700–1550 см⁻¹, что соответствует поглощению C=N⁺ амидинового фрагмента, поглощению C=N свободного амидинового фрагмента. На рис.3 показаны FTIR-спектры гидроксилсодержащего амидина до барботирования CO₂.

Наиболее важные колебания, описывающие структуру, представлены на Рис. 3 и 4. Результаты показывают, что по мере поглощения CO₂ увеличивается карбонильная группа, а нитрильная уменьшается.

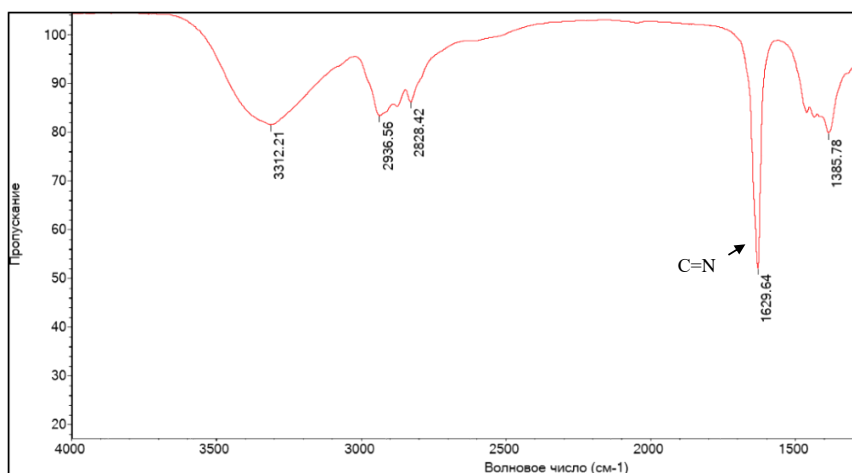


Рисунок 3. ИК-спектр трис-амидина

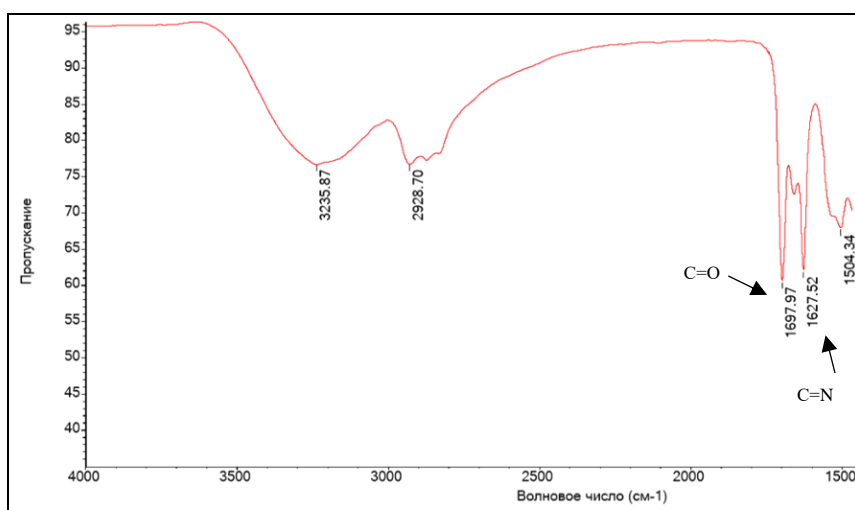


Рисунок 4. ИК-спектр поглощения CO₂ при 80 мин

По результатам вязкости (Рис.5.) можно сказать, что взаимодействие между амидином и CO₂ в растворе является обратимым и находится в равновесии быстрее, чем проведено измерение. Исходя из этого было рассмотрено барботирование при 120 мин.

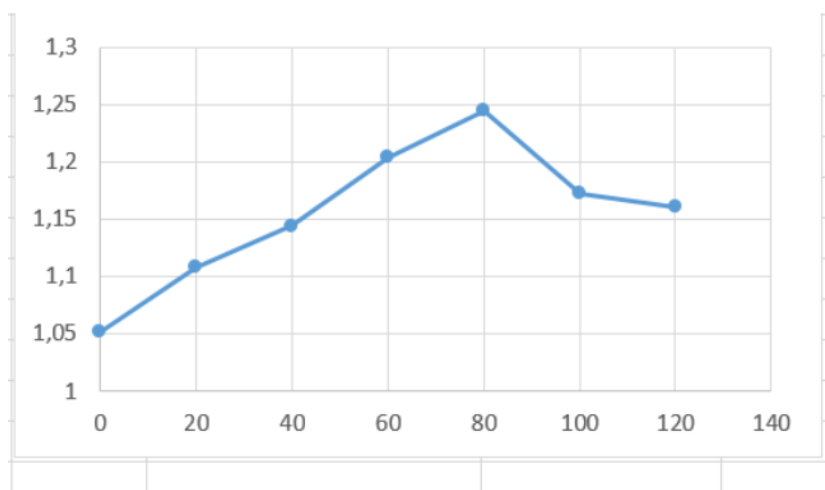


Рисунок 5. Зависимость относительного увеличения вязкости от времени реакции амида с CO_2

Заключение

Как видно из результатов исследования, синтезированный трис-амидин эффективно поглощает диоксид углерода. При этом вязкость вещества с повышением времени реакции с CO_2 начинает увеличиваться. Это свидетельствует о синтезе полимерной ионной жидкости и эффективном поглощении углекислого газа трис-амидином. Разработанный на основе трис-амидаина метод улавливания диоксида углерода ресурсо- и энергосберегающая технология не требует лишних затрат. Метод прост в использовании, безопасен и экономически рентабелен.

Список литературы

1. Metz B. et al. IPCC special report on carbon dioxide capture and storage, prepared by working group III of the intergovernmental panel on climate change // Cambridge University Press. – New York, 2005. – P. 3-15.
2. Hampe E.M., Rudkevich D.M. Exploring reversible reactions between CO_2 and amines // Tetrahedron. – 2003. – №59. – P.9619-9625.
3. Park S.E., Chang J.S., Lee K.W. Carbon Dioxide Utilization For Global Sustainability // Proceedings of 7th the International Conference on Carbon Dioxide Utilization. – 2004. – Vol. 153. – P. 17, 91, 303.
4. Omae I. Aspects of carbon dioxide utilization // Catalysis today. – 2006. – Vol. 115, № 1-4. – P. 33-52.
5. Тумина Т.С. Переработка углекислого газа // Молодой ученый. – 2018. – № 20 (206). – С. 117-119.
6. Малов А. За дымовой завесой. Как утилизация углекислого газа изменит мир. [Электронный ресурс] – URL: <https://www.forbes.ru/biznes/352641-za-dymovoy-zavesoy-kak-utilizaciya-uglekislogo-gaza-izmenit-mir> (дата обращения: 15.04.2022).
7. Mun J.H., Shin B.J., Kim S.M., You J.K., Park Y.C., Chun D.H., Lee J.S., Min B.M., Lee U., Kim K.M., Moon J.H. Optimal MEA/DIPA/water blending ratio for minimizing regeneration energy in absorption-based carbon capture process: Experimental CO_2 solubility and thermodynamic modeling // Chemical Engineering Journal. – 2022. – Vol. 444. – P. 136523.
8. Liu F., Jing G., Lv B., Zhou Z. High regeneration efficiency and low viscosity of CO_2 capture in a switchable ionic liquid activated by 2-amino-2-methyl-1-propanol // International Journal of Greenhouse Gas Control. – 2017. – Vol. 60. – P. 162-171.

9. Shohrat A., Zhang M., Hu H., Yang X., Liu L., Huang H. Mechanism study on CO₂ capture by ionic liquids made from TFA blended with MEA and MDEA // International Journal of Greenhouse Gas Control. – 2022. – Vol. 119. – P. 103709.

И.С. Иргибаетова, А.М. Жапакова, А.Б. Ералинов

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Полимерлі иондық сұйықтық түзіле отырып трис негізінде CO₂ тұтудың тиімді әдісі

Аңдатпа. Парниктік эффект пайда болғалы климаттың өзгеруіне үлкен назар бөлінгелі, осы мәселенің шешімін табуға бағытталған зерттеу саласының кеңейуі байқалуда. Берілген мақалада негізгі назар «жасыл» химия концепциясы бойынша еріткіштерді қолданбай, полимерлі иондық сұйықтық түзу арқылы көмірқышқыл газын алудың тиімді әдісін жасауға бағытталған. Зерттеу үшін трис-амидин қарастырылды. Берілген тәжірибелер зертханалық масштабта қолданысқа ие.

Түйін сөздер: CO₂ тұту, иондық сұйықтық, амидин.

I.S. Irgibaeva, A.M. Zhapakova, A.B. Yeralinov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

An effective method of CO₂ capture with a tris-base with the formation of polymer ionic liquid

Abstract. Increased attention to climate change due to the emergence of the greenhouse effect has led to an expansion of the field of research aimed at finding solutions to this problem. The article is devoted to the development of an effective method for capturing carbon dioxide with the formation of a polymeric ionic liquid without the use of solvents, according to the concept of "green" chemistry. The authors considered Tris-amidine in the study. These experiments would be used on a laboratory scale.

Keywords: CO₂ capture, ionic liquid, amidine.

References

1. Metz B. et al. IPCC special report on carbon dioxide capture and storage, prepared by working group III of the intergovernmental panel on climate change, Cambridge University Press. (New York, 2005, 3-15).
2. Hampe E.M., Rudkevich D.M. Exploring reversible reactions between CO₂ and amines, Tetrahedron, 59, 9619-9625 (2003).
3. Park S.E., Chang J.S., Lee K.W. Carbon Dioxide Utilization For Global Sustainability, Proceedings of 7th the International Conference on Carbon Dioxide Utilization, 153, 17, 91, 303 (2004).
4. Omae I. Aspects of carbon dioxide utilization, Catalysis today, 115(1-4), 33-52 (2006).
5. Tumina T.S. Pererabotka uglekislogo gaza, Molodoj uchenyj [Carbon Dioxide Processing, Young Scientist], 20(206), 117-119 (2018). [in Russian]
6. Malov A. Za dymovoj zavesoj. Kak utilizaciya uglekislogo gaza izmenit mir [Behind the smoke screen. How carbon dioxide recycling will change the world]. [Electronic resource] – Available at: <https://www.forbes.ru/biznes/352641-za-dymovoy-zavesoy-kak-utilizaciya-uglekislogo-gaza-izmenit-mir> (Accessed: 15.04.2022).
7. Mun J.H., Shin B.J., Kim S.M., You J.K., Park Y.C., Chun D.H., Lee J.S., Min B.M., Lee U., Kim K.M., Moon J.H. Optimal MEA/DIPA/water blending ratio for minimizing regeneration energy in absorption-based carbon capture process: Experimental CO₂ solubility and thermodynamic modeling, Chemical Engineering Journal, 444, 136523 (2022).

8. Liu F., Jing G., Lv B., Zhou Z. High regeneration efficiency and low viscosity of CO₂ capture in a switchable ionic liquid activated by 2-amino-2-methyl-1-propanol, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 60, 162-171 (2017).

9. Shohrat A., Zhang M., Hu H., Yang X., Liu L., Huang H. Mechanism study on CO₂ capture by ionic liquids made from TFA blended with MEA and MDEA, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 119, 103709 (2022).

Сведения об авторах:

Иргибаетова И.С. – доктор химических наук, профессор, кафедра «Химии», Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Жапакова А.М. – магистрант 2-го курса образовательной программы «7М05301 – «Прикладная химия», Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Ералинов А.Б. – магистрант 2-го курса образовательной программы «7М05301 – «Прикладная химия», Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Irigibaeva I.S. – Doctor of Chemical Sciences, Professor, Department of "Chemistry", L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Zhapakova A.M. – The 2nd year Master student in Applied Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Yeralinov A.B. – The 2nd year Master student in Applied Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Қорытпалы алюмо-никелдік катализатор арқылы фурфуролды сутектендіріп тетрагидрофурфурил спиртіні алу

Аңдатпа. Бұл жұмыста рентгенографиялық зерттеулердің жиынтығы бойынша сілтілендірілген катализаторлар өз беттерінше негізінен фурфуролды сутектендіруде катализаторлардың белсенділігіне ықпалын елеулі түрде көрсетеді. Қаңқалы никельді катализатор және қорытпалы алюмо-никелдік катализаторы қоспалардың оксидтерінен, сілтіден толықтай айырылмаған интерметаллидтерден тұратын күрделі көп компонентті жүйелер екендігін көрсетеді. Сонымен Ni-Al катализаторларға цирконий, ниобий, молибден, хром, мыс қорытпаларына металдарды енгізу барысында қаңқалы никельді катализаторлардың фазалық құрамына, құрылымы және үлестік сыртына айтарлықтай әсерін береді. Қорытпалы алюмо-никелдік катализаторында әдеттегі Ni-Al (50-50) – NiAl₃, Ni₂Al₃ фазаларынан және эвтектикадан (NiAl₃ +Al) басқа қосындылар жаңа, әлі мағынасы ашылмаған Фх фазаларын құрайды. Қаңқалы никель катализаторларынан басқа катализаторлар Y-Al₂O₃, Ni₂Al₃ және Фх қосымша қосындыларынан тұрады. Қорытпалы алюмо-никелдік қосындылар никельдің кристалдық торларының параметрлеріне ықпалын тигізбейді, алайда катализаторлардың кристалдарын (L) едәуір ұсатып, 95,0-128,5 м²/г шамасында катализатордың үлестік сыртының ұлғайтылады.

Түйін сөздер: фурфурол, тетрагидрофурфурил спирті, алюмо-никелді катализатор, гидрлеу үрдісі.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-24-30>

Кіріспе

Фурфуролды тетрагидрофурфурилдік спиртке дейін сутектендірудің көпкомпоненттік жүйесі ұсынылып, никельдік Реней катализаторлары өңделіп жұмыстар жасалынды. Катализаторлардың қолданысы ретінде - молибден, мыс, хромның (немесе феррохром) қосындыларымен жаңартылған, сутекпен сілтісіздендірілгеннен кейін алдын-ала құрғатылған қаңқалы никель өршіткілері алынды. Өңделіп сарапталып берілген катализаторлар бізге белгілі болып жүрген катализаторларға қарағанда 10-12% белсенділік танытты, олардың тұрақтылығы 20-25% және одан жоғары жағдайды көрсете білді [1].

Циркониймен, ниобиймен, молибденмен жаңартылған қорытпалы никель-алюминийлік катализаторларда 40-120⁰ С мен 4-12 Мпа сутек қысымында фурфуролды тетрагидрофурфурил спиртіне дейінгі сутектендіру үрдісі зерттелінді. Катализаторлардың құрамы өзгертілгендіктен, жаңартылған қосындылар енгізілгендіктен катализаторлардың белсенділігі енгізілетін қосындылар табиғатына байланысты максимуммен өтеді. Белсенділіктері бойынша катализаторлар келесі қатармен келеді: Ni-Al < Ni-Zr-Al < Ni-Nb-Al < Ni-Cu-Al

Молибден мен мысты; молибден, мыс пен хромды; молибден, мыс пен феррохромды 80-160⁰ С-де, 2-6 Мпа сутек қысымында, 100-180 сағ⁻¹ артық сутектің барботажында бір мезетте енгізумен жаңартылған қорытпалы никель-алюминийлі катализаторларда фурфуролды және фурфуролды конденсатты үздіксіз сутектендіру үрдісі зерттелінді. Зерттелінген катализаторлар белсенділігі мен тұрақтылығы бойынша мына қатармен орналасқан: Ni-Mo-Cu-Cr* -Al > Ni-Mo-Cu-Cr-Al > Ni-Mo-Cu-Al

Атомды-адсорбциялық спектроскопия, рентгено және электронография, жарыққа түсіретін және қоздыратын электронды микроскопия, төмен температуралы адсорбция мен азоттың капиллярлы конденсаты, рентгенофотоэлектрлі спектроскопия, температуралы-бағдарламаланған сутектің десорбциясы тәсілімен шығарылатын және сілтісіздендірілген қорытпалы алюмо-никелдік қорытпалардың химиялық және фазалық құрамдары, сырттағы элементтердің құрамы мен валенттілік қалпы, адсорбциялық қасиеттері анықталынды [2].

Нәтижелер

Молибденмен, хроммен, мыспен, ниобиймен, циркониймен жаңартылған ерітіп қорытпалы алюмо-никелдік катализаторларының фазалық құрамы мен құрылымын рентгендік құрылымдық және рентгендік спектрлік сараптау тәсілдерінің көмегімен зерттеді. Нәтижелері 1 кестеде көрсетілген. 1 кесте деректерінде шығыс қорытпалар мен катализаторлардың құрамы мен құрылымдарына жаңартылған металдардың сапалық және сандық елеулі әсер көрсететіні көрініп тұр. Қорытпаға әдеттегі Ni-Al (50-50) – NiAl₃, Ni₂Al₃ фазаларынан және эвтетикадан (NiAl₃+Al) басқа қосындылар жаңа, әлі мағынасы ашылмаған Ф_x фазаларын құрады. Қаңқалы никель катализаторынан басқа катализаторлар Y-Al₂O₃, Ni₂Al₃ және Ф_x қосымша қосындыларынан тұрады. Қорытпалы алюмо-никелдік қосындылар никельдің кристалдық торларының параметрлеріне ықпалын тигізбейді, алайда катализаторлардың кристалдарын (L) едәуір ұсатып, 95,0-128,5 м²/г шамасында катализатордың үлестік сыртының ұлғайтады. Қима тәсілі арқылы 1 кестеде жеке фазалармен орын алған кеңістіктер көлемі анықталды. NiAl₃ және Ni₂Al₃ фазаларының көлемі 35-63 және 30-42% шамасында ауытқып отырады, және де олар қорытпалардағы металдар шоғырлануының өсімімен кемиді [3]. Қорытпада қосындылар санының өсімімен эвтетикалық қоспа (Al+NiAl₃) мен белгісіз Ф_x құрамы 17-20 және 12-13% дейін айтарлықтай ұлғайды. NiAl₃/Ni₂Al₃ байланыс промотирленген қорытпаларда 1,27-1,38 қосындысыз қорытпаға қарағанда жоғарылау, қосындылары бар металдар шоғырлануының өсімімен кемиді немесе цирконийі бар қорытпаларынан молибдені бар қорытпаларға қарай ұлғаяды. Рентгенографиялық зерттеулердің жиынтығы сілтіден айырылған катализаторлар өзді-өзі негізінен фурфуролды сутектендіруде катализаторлардың белсенділігіне ықпалын елеулі түрде көрсететін қаңқалы никельден және жаңартылған қорытпалы алюмо-никелдік қоспалардың оксидтерінен, сілтіден толықтай айырылмаған интерметаллидтерден тұратын күрделі көп компонентті жүйелер екендігін көрсетеді. Сөйтіп, Ni-Al ға цирконий, ниобий, молибден, хром, мыс қорытпаларына металдарды енгізу қаңқалы никельді катализаторлардың фазалық құрамына, құрылымы және үлестік сыртына айтарлықтай әсерін береді. Ауыспалы металдармен жаңартылған қорытпалы алюмо-никелдік катализаторлардың химиялық сараптамасының қорытындылары барлық жаңартылған металдар сілтіден айырылған катализаторлар құрамына кіретінін көрсетеді. Катализаторлардағы металл қосындыларының шоғырлануы сілтіде олардың еру дәрежесіне және қорытпа шахталарына қарағанда 0,4-1,4% төмен болатынына байланысты. Сілтісіздендірілген катализаторлардың химиялық құрамы табиғатқа және шығын қорытпаларының компоненттеріне айтарлықтай байланысты. Сөйтіп, барлық қорытпалы алюмо-никелдік катализаторы қосындылар тікелей қандай да бір қалыпта сілтіден тазартылған катализаторларға енеді, ол өз алдына олардың адсорбцияланған және катализикалық қасиетке ықпалын тигізеді. Оптикалық микроскопия құрылғы көмегімен түйіршікті зерттейтін арнайы қондырғыны пайдалана отырып құрам зерттеулерінің нәтижелері алынды, ол жерде жалпы шоғырлануы 75-89% құрайтын зерттеудегі катализаторлардың ұсақ бөлшектермен молайғандығын көрсетеді.

Алюмо-никельдік қорытпалар мен метал қосылған катализаторлардың сипаттамасы

Қорытпалы катализатор	Қорытпа					Катализатор		
	Фаза ауданы			Φ_x	NiAl ₃ Ni ₂ Al ₃	Кристалл араметрі	Кристал өлшемі	Бетінің нақты ауданы
	NiAl ₃	Ni ₂ Al ₃	Al+NiAl ₃					
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ni-Al 50-50	50	40	10	-	1,24	0,353	5,4	105
Ni-Zr-Al 47,0-3,0-50,0	53	42	8	-	1,30	0,353	5,0	95
45,0-5,0-50,0	51	39	7	3	1,28	0,353	4,7	112
40,0-10,0-50,0	48	37	9	5	1,26	0,353	4,4	105
Ni-Nb-Al 47,0-3,0-50,0	48	36	15	-	1,33	0,353	4,2	120
45,0-5,0-50,0	43	33	17	8	1,30	0,353	4,0	123,5
40,0-10,0-50,0	36	30	21	12	1,28	0,353	3,7	128,5
Ni-Mo-Al 47,0-3,0-50,0	47	35	10	-	1,38	0,353	3,6	100,0
45,0-5,0-50,0	45	33	11	10	1,36	0,353	3,4	111,5
40,0-10,0-50,0	39	30	18	13	1,30	0,353	3,2	119,8
Ni-Mo-Cu-Al 43,0-5,0-2,0-3,0-50,0	46	34	13	6	1,35	0,353	3,1	123,6
Ni-Mo-Cu-Al 40,0-5,0-2,0-3,0-50,0	38	30	19	12	1,27	0,353	2,0	116,4

Катализаторлардағы өте ұсақ бөлшектердің бөлінуі үрдісі электронды микроскопия құрылғысы арқылы тексерілді. Сонымен қатар протирленген алюмо-никельдік катализаторлар бөлшектерінің сыртқы мөлшерлері шамамен алғанда 0,33-0,47 мкм, қосындысы жоқ қаңқалы никельге қарағанда 1,6-4,0 есе жоғары екендігі көрсетілген [3].

Біз метал қосылған қаңқалы никель катализаторларының кеуек құрылымы зерттедік. Аргон сорбциясының изотермдері гистерезистік ілмектердің формалары көптеген жаңартылған никельдік катализаторлар үшін салыстырмалық қысымдардың орта аймақтарындағы адсорбциялық және десорбциялық параллельдік орналасуымен және де топтастыруы бойынша А-типіне жататыны сипатталады, ол цилиндрлік қуыстықтардың басым болғандығы туралы мәлімдейді. Қуыстық таралудың көптігі айқындалмаса да, жақын аймақта екендігін байқауға болады.

Талқылау

Фурфурол сутектендірілуінің алюмо-никельдік қорытпадағы металл қосындыларының құрамына қарай жылдамдық тәуелділігін көрсетеді. Одан барлық зерттелетін катализаторлардағы фурфурол сутектендірудің жылдамдығы қорытпадағы жаңартылған металдардың 1,0 мас. дейін жылдам өсетіні, содан кейін сутектендірудің жылдамдықтарының баяу өсімі болатыны көрініп тұр. Жаңартылған қорытпалы алюмо-никельдік катализаторлар белсеңділігі 90° С мен 4 МПа-да артады, қорытпалы алюмо-никельдік катализатор салыстырмалы ретінде қосындысыз қорытпадағы қаңқалық никельге қарағанда 2,1-3,0 есе жоғары. Ең көп белсеңділікті Ni-Nb-Al және Ni-Mo-Al катализаторлары көрсетеді. Фурфуролды сутектендіру үшін құрамында мыс, молибден, цирконий, ниобий, хром және келесі құрамы бар никель-алюминий қорытпалары негізіндегі ерітіп қорытылған катализаторлар қолданылды:

1. Ni-Al (50,0-50,0)
2. Ni-Zr-Al (47,0-3,0-50,0)
3. Ni-Zr-Al (45,0-5,0-50,0)
4. Ni-Zr-Al (43,0-7,0-50,0)
5. Ni-Zr-Al (40,0-10,0-50,0)
6. Ni-Nb-Al (49,0-1,0-50,0)
7. Ni-Nb-Al (47,0-3,0-50,0)
8. Ni-Nb-Al (45,0-5,0-50,0)
9. Ni-Nb-Al (40,0-10,0-50,0)
10. Ni-Mo-Al (49,0-1,0-50,0)
11. Ni-Mo-Al (47,0-3,0-50,0)
12. Ni-Mo-Al (45,0-5,0-50,0)
13. Ni-Mo-Al (43,0-7,0-50,0)
14. Ni-Mo-Al (40,0-10,0-50,0)
15. Ni-Ti-Al (47,2-2,8-50,0)
16. Ni-Mo-Cu-Al (44,0-5,0-1,0-50,0)
17. Ni-Mo-Cu-Al (43,0-5,0-2,0-50,0)
18. Ni-Mo-Cu-Al (42,0-5,0-3,0-50,0)

Cr* - феррохром (құрамында Cr 69,1 %, Fe 28,04%, Si, P, S 0,96% қоспағы бар). Катализаторлар ШП-1 пешінде металдар қорытумен жасалынған. Балқыту графит стакандарында келесідегідей өткізілді: ең алдымен алюминийді балқытып, қорытылуға никельді кіргізеді. Температураның жылдам жоғарылауымен келетін алюмотермикалық үдеріс басталуынан кейін баяу балқытын металдардан бастап, қосындыланған металдарды қосады. Қосындыны кварц таяқшасымен араластырып, шойын құйма қалыпқа құяды. Суығаннан кейін қосындыны үгітіп, фракциялайды. 2 кестеде цирконий, ниобий, молибден, мыс, хром металдары қосылған қаңқалы никельдік катализаторлардың қуыстық құрылымдарының параметрлері көрсетілген. 2 кесте деректері жаңартылған металдар негізінен қорытпалы өршіткінің көбейтетіні білінеді, салыстырмалы түрде алынғанда 100-138 м және 80-90 м²/г дейін; салыстырмалы жоғары тиімді радиустық қуыстық көлем, сірә, жаңартылған металдармен катализаторлардың никельдік фаза шашырайтына қарай өтеді [4]. Екі не үш металды бірге енгізуде бәрі ауысады. Абсорбцияның изотермі Е-типіне (2 кесте) ауысып, қуыстық көлем мен олардың радиусы кеміп, цилиндрлік қуыстықтар шөлмек тәрізді болып қалады.

Металл қосылған қаңқалы алюмо-никельдік катализаторлардың қуыстық құрылым параметрлері

Қорытпалы катализатор, %	SBэт, м ² /г	Сқум, м ² /г	SBэт, м ² /г Сқум, м ² /г	Vпор см ² /г	Рэфф, А ⁰	Изотерма типі
Ni-Al (50,0-50,0)	105	75	28,5	0,102	30	A
Ni-Zr-Al (45,0-5,0-50,0)	100	80	27,3	0,122	30	A
40-10-50	120	90	25,0	0,129	32	A
Ni-Nb-Al (45,0-5,0-50,0)	115	93	19,1	0,135	35	A
40-10-50	120	85	29,2	0,128	33	A
Ni-Mo-Al (45,0-5,0-50,0)	138,4	110	20,5	0,142	38	A
40-10-50	120,8	100	17,2	0,152	42	A
Ni-Mo-Cu-Al (43,0-5,0-2,0-50,0)	115	90	21,7	0,097	22	E
Ni-Mo-Cu-Al (43,0-5,0-2,0-50,0)	132	88	33,3	0,081	20	E

Қорытынды

Қорытпалы алюмо-никелдік катализаторлар құрамына қосылған металдар үштік қорытпаларда қаңқалы никель катализаторының термодесорбциялық ирек сипатына айтарлықтай әсер етпейді, бірақ толық көлемін өзгертіп отырады. Термодесорбциялық иректерде сутектің екі формасы айқын көрсетілген, олардың десорбциясы 0-210⁰ С және 210-600⁰ С аймақтарында жүзеге асады. Бірінші форма біріншінің теңестірілуі бойынша, ал екінші форма – екінші тәртіппен десорбцияланады. Сутегі бойынша ең көп сыйымдылықты қаңқалы Ni-Mo-катализаторлары көрсетеді, десорбцияланған сутегінің жалпы көлемі 600⁰ С-ге 51,0-55,0 см³ /г дейін көрсетеді. Зерттелетін алюмо-никельдік катализаторлардың сорбциялық қабілеттері, сірә, жаңартылған қорытпалы алюмо-никелдік катализаторлар қосындылардың құрамы 5,0% сәйкес максимум арқылы жасалатын болады. Қосындысы болатын металдар бірінші әлсіз адсорбция ұшырайтын форманы көбейтіп, сутегі берік адсорбцияланған формаға қатысты шоғырлануын ерекше кемітетін айта кеткен жөн. Металды 1,1-1,5 есеге қосу адсорбцияланған сутек формасын ұлғайтады. Бұдан басқа, адсорбцияланған сутегінің бірінші және екінші формалары салыстырмалы төмен температурада (бірінші форма – 100-140⁰ С, екінші форма – 150-240⁰ С) және ең кем көлемінде (бірінші форма 24-30 КДж/моль, екінші форма 50,5-65,0 КДж/моль) десорбцияланады. Сутектің әлсіз адсорбцияланған формалар саны промотирленген катализаторларда десорбцияланған сутегінің жалпы санынан 50-60% жетеді. Сутегінің барлық

формалары қатысына сияқты ең көп сорбциялық қабілеттілік қаңқалы Ni-Mo катализаторлары білдіреді. Молибден мен мысты бірге енгізгенде еш өзгеріс болмайды. Никель-алюминий қатысындағы қорытпаға молибден, мыс, хромды бірге енгізілгеннен алынған бес компоненттік катализатордың термосорбциялық ирегінде 195⁰С-де температурада пен сутектің бір ғана шыңы байқалады. Сутектің жалпы құрамы да 61 см³/г дейін өсетіндігі байқалады. Жаңартылған катализаторлар белсенділігі қосындысыз Ni-Al скелетті катализаторына қарағанда 1,5-1,8 есеге жоғары немесе өндірістік Ni-Ti-Al байланысқа қарағанда 1,8-2,0 есеге жоғары нәтижені көрсетті. Ең көп белсенділікті қорытылған Ni-Mo-Al катализаторлары көрсетеді. Зерттелетін катализаторлар белсенділігінің өсуі бойынша қатармен келеді: Ni-Zr-Al < Ni-Nb-Al < Ni-Mo-Al.

Әдебиеттер тізімі

1. Бейсеков Т.Б., Ержанова М.С. и др. // Хим. пром. – 1980. – № 9. – 525 б.
2. Duisembiyev M.Zh. “Hydrogenation furfurily in furfural alcohol in presence of floatable catalyst” The materials of international conference “The development of science in modern era”. – Kyiv, 2012. – P. 17-20.
3. Дүйсембиев М.Ж. Подбор и разработка катализаторов гидрогенизации фурфурола. Наука и современность-2012: тезисы международной научно-практической конференций. – Новосибирск, 2012. – С. 171-175.
4. Попова Г.Я., Андрушкевич Т.В., Захаров И.И., Чесалов Ю.А. // Кинетика и катализ. – 2015. – Т. 46. – С. 233.

М.Ж. Дүйсембиев

Южно-Казахстанский государственный педагогический университет, Шымкент, Казахстан

Получение тетрагидрофурфурилового спирта гидрированием фурфурола с использованием катализатора из алюминиево-никелевого сплава

Аннотация. В данной работе, основанной на комплексе рентгеноструктурных исследований, алкализованные катализаторы существенно влияют на активность катализаторов гидрирования фурфурола. Показано, что скелетный никелевый катализатор и катализатор из алюминиево-никелевого сплава представляют собой сложные многокомпонентные системы, состоящие из оксидов примесей, интерметаллидов. Таким образом, при введении металлов в Ni-Al катализаторы сплавы циркония, ниобия, молибдена, хрома и меди оказывают существенное влияние на фазовый состав, структуру и аспектное соотношение скелетных никелевых катализаторов. В катализаторе из алюминиево-никелевого сплава добавки, отличные от обычных фаз Ni-Al (50-50) - NiAl₃, Ni₂Al₃ и эвтектик (NiAl₃ + Al), образуют новые, пока неизвестные Fx-фазы. Помимо скелетных никелевых катализаторов, катализаторы состоят из добавок γ-Al₂O₃, Ni₂Al₃ и Fx. Легированные алюминиево-никелевые соединения не влияют на параметры кристаллических решеток никеля, однако значительно дробят кристаллы катализатора (L) и увеличивают удельную площадь катализатора на 95,0-128, 5 м²/г.

Ключевые слова: фурфурол, тетрагидрофурфуриловый спирт, алюмо-никелевый катализатор, гидрирование.

M.Zh. Duisembiyev

South Kazakhstan State Pedagogical University, Shymkent, Kazakhstan

Production of tetrahydrofurfuryl alcohol by hydrogenation of furfuryl using an aluminum-nickel alloy catalyst

Abstract. Alkalized catalysts significantly affect the activity of furfural hydrogenation catalysts based on a complex of X-ray diffraction studies based on a complex of X-ray diffraction studies. The skeletal nickel catalyst and the aluminum-nickel alloy catalyst are complex multicomponent systems consisting of impurity oxides and intermetallic compounds. Thus, when metals are introduced into Ni-Al catalysts, zirconium, niobium, molybdenum, chromium, and copper alloys have a significant effect on the phase composition, structure, and aspect ratio of skeletal nickel catalysts. In an aluminum-nickel alloy catalyst, additives other than the usual Ni-Al (50-50) - NiAl₃, Ni₂Al₃ and eutectic (NiAl₃ + Al) phases form new, yet unknown Fx-phases. In addition to skeletal nickel catalysts, the catalysts consist of additives Y-Al₂O₃, Ni₂Al₃ and Fx. Doped aluminum-nickel compounds do not affect the parameters of the nickel crystal lattices, however, they significantly crush the catalyst crystals (L) and increase the specific area of the catalyst by 95.0-128.5 m²/g.

Keywords: furfurol, tetrahydrofurfuryl alcohol, aluminum-nickel catalyst, hydrogenization.

References

1. Bejsekov T.B., Erzhanova M.S. i dr. Him. prom. [Khim. prom.], 9, 525 (1980). [in Russian]
2. Duisembiyev M.Zh. "Hydrogenation furfurily in furfural alcohol in presence of floatable catalyst" The materials of international conference "The development of science in modern era", Kyiv, 17-20 (2012).
3. Dujsembiev M.ZH. Podbor i razrabotka katalizatorov gidrogenizacii furfurola. Nauka i sovremennost'-2012: tezisy mezhdunarodnoj nauchno-prakticheskoy konferencij, Novosibirsk [Selection and development of catalysts for the hydrogenation of furfural. Science and modernity-2012: abstracts of the international scientific-practical conference, Novosibirsk], 171-175 (2012). [in Russian]
4. Popova G.YA., Andrushkevich T.V., Zaharov I.I., Chesalov YU.A., Kinetika i kataliz [Kinetics and catalysis], 46, 233 (2015). [in Russian]

Авторлар жайлы мәлімет:

Дүйсембиев М.Ж. – химия ғылымдарының кандидаты, химия кафедрасы доценті, Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Байтұрсынова көшесі 13, Шымкент қ., Қазақстан.

Duisembiyev M.Zh. – Candidate of Chemistry, Associate Professor, Department of Chemistry, South Kazakhstan State Pedagogical University, 13 Baitursynov str., Shymkent, Kazakhstan.

R. Durdubaeva^{1*}, H. Beknazarov², A. Asamatdinov³, N. Yusupova⁴

^{1,3,4}Karakalpak State University, Nukus, Uzbekistan

²Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan

(e-mail: ³asamatdinov_a@edu.uz, ⁴Yusupova_n@edu.uz, ²beknazarov@mail.ru)

*Corresponding author: durdubaevaroza@gmail.com

Study of steel corrosion inhibition with the use of secondary waste

Abstract. The article investigates the inhibition of steel corrosion by phosphorus-containing oligomeric inhibitors. In the experiment, samples of carbon steel of the following chemical composition (mass %) were tested: 0.19 carbon, 0.075 manganese, 0.055 phosphorus, 0.625 iron, 0.047 sulfur, and 0.008 others. Tafel graphs were compiled to provide a deeper understanding of the kinetics of cathodic and anodic corrosion reactions. It was found that the polarization data at 500 mg/l of the phosphorus-containing oligomer PSK-1 in 1M HCl have a significantly higher inhibition efficiency of 97.76%, respectively.

Keywords: corrosion inhibitors, metal corrosion, phosphorus (V)-chloride, cyanuric acid.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-31-36>

Introduction

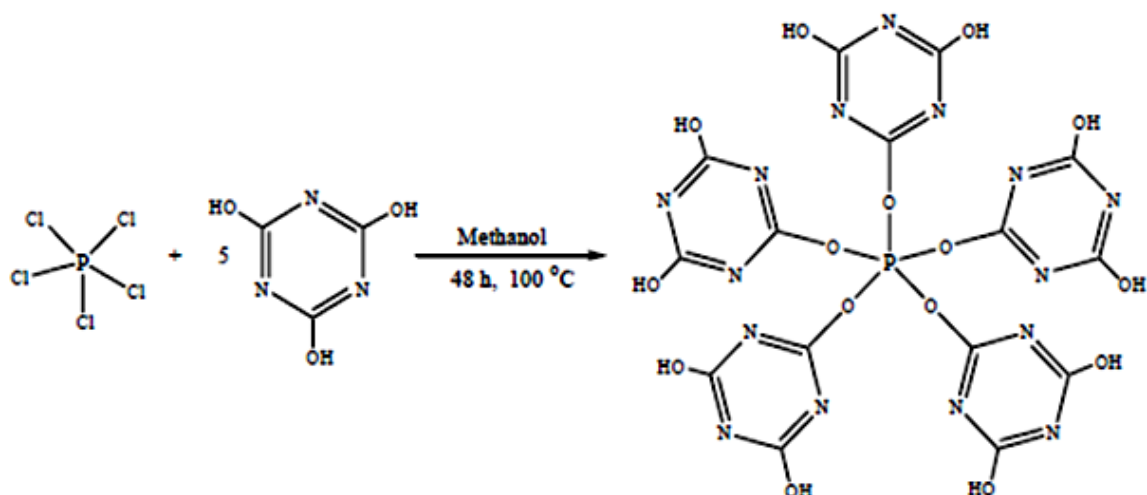
Carbon steel is one of the most widely used materials in the industry due to its high availability, physical and chemical characteristics, and relatively low cost [1]. These characteristics guarantee the widespread use of carbon steel in several areas such as chemical processing, spatial construction, metal processing, seawater, and oil refining [2] or minimize it by introducing compounds of phosphorus-containing polymers and oligomers into a corrosive environment [3].

The addition of polymeric chemical compounds to a corrosion solution to reduce corrosion (HCl, H₂SO₄, H₃PO₄, and HNO₃) is referred to as a corrosion inhibitor by forming a protective layer on the surface of the steel, and this form of corrosion protection is called inhibition [4]. In addition, phosphorus-containing polymers are adsorbed on the steel surface due to physical, chemisorption, and/or physicochemical adsorption [5]. Chemical adsorption distributes or transfers the load from the phosphorus-containing polymer to the surface of the metal, which leads to the development of a covalent bond of a coordinated type. However, physical adsorption is a van der Waals and electrostatic interaction between loaded phosphorus-containing polymers and the metal surface of the contaminated metal. Phosphorus-containing polymers having active sites (especially heteroatoms such as O, N, and S), aromatic rings, epoxy groups, phosphorus atoms, and π -electrons can be used as steel corrosion inhibitors [6].

The purpose of this article is to study a phosphorus-containing oligomer as a carbon steel corrosion inhibitor in an aggressive solution (1M HCl). The influence of a phosphorus-containing oligomer based on phosphorus (V)-chloride with cyanuric acid (PSK-1) at various concentrations was evaluated using potentiodynamic polarization.

Experimental part

In the experiment, samples of carbon steel of the following chemical composition (mass %) were tested: 0.19 carbon, 0.075 manganese, 0.055 phosphorus, 0.625 iron, 0.047 sulfur, and 0.008 others. The used solution (1M HCl) was analyzed based on 37% HCl using a dilution with bidistilled water. The concentration range from 100mg/l to 500mg/l is realized, and the surface of carbon steel used is 1 cm². The structure of the studied phosphorus-containing oligomeric PSK-1 inhibitor is shown in scheme-1.



Synthesis of a phosphorus-containing oligomer PSK-1

The device for electrochemical measurements consists of three-electrode cells, namely the counter electrode (platinum), the reference electrode (Ag/AgCl), and the working electrode (carbon steel), respectively. The electrochemical measurement is connected to the SP-200 with a signal amplitude (10 mV) [6].

The obtained results and their discussion. Tafel graphs were compiled to provide a deeper understanding of the kinetics of cathodic and anodic corrosion reactions. Graphs of potentiodynamic polarization of the carbon steel sample in an aggressive solution (1M HCl) without inhibitor and with different concentrations of phosphorus-containing oligomer after 30 minutes of immersion at 298 K are shown in Fig. 1. Corresponding electrochemical corrosion variables, such as corrosion current density (i_{corr}), corrosion potential (E_{corr}), inhibition efficiency ($\eta_{Tafel}(\%)$), cathode (β_s) and anode 30 minutes of immersion at 298 K are shown in Fig. 1. Corresponding electrochemical corrosion variables, such as corrosion current density (i_{corr}), corrosion potential (E_{corr}), inhibition efficiency ($\eta_{Tafel}(\%)$), cathode (β_s), and anode (β_a) The Tafel constants are determined by the Tafel slope and are shown in Table 1.

It is known that the electrochemical reaction of carbon steel in 1M HCl solution without an inhibitor is a cathodic reaction associated with proton reduction (reduction) 1 reduction (1 reduction). The corrosion inhibition efficiency ($\eta_{tafel}(\%)$) was calculated by formula 3.



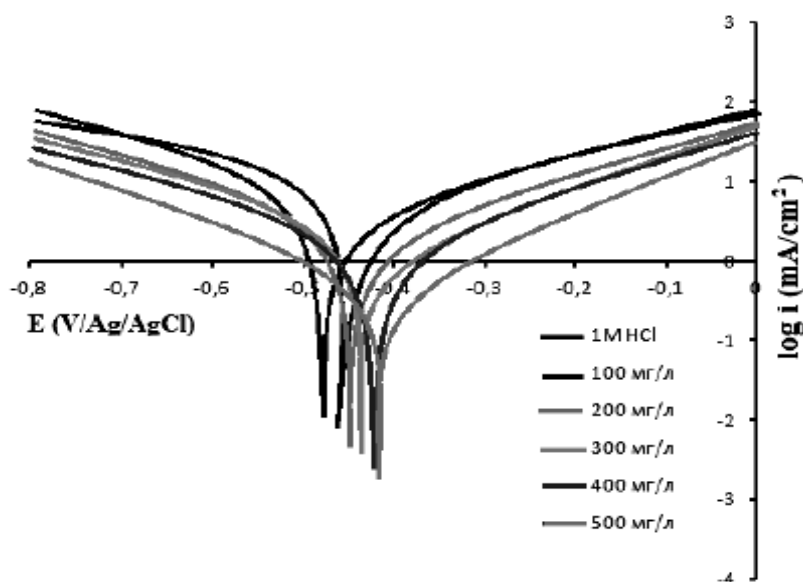
$$\eta_{tafel}(\%) = (1 - i_{inh} / i_0) \times 100 \quad (3)$$

where i_0 and i_{inh} are the corrosion current density not inhibited and the corrosion current density suppressed by different PSK-1 concentrations, respectively.

Table 1

Different polarization parameters for carbon steel are not inhibited and are not inhibited by different concentrations of PSK-1 at 298 K.

Inhibitor	Concentration, mg / l	$-E_{\text{corr}}$ (mB)	i_{corr} (A/cm ²)	TiltSlopes (mB dec ⁻¹)		η (%)
				$-\beta_s$	β_a	
Noinhibitor (1M HCl)	0	439,7	397,3	193,1	94	-
PSK-1	100	451.7	83.1	68.7	59.2	79.08
	200	412.1	41.5	57.9	41.1	89.55
	300	423.3	31.7	60.3	44.9	92.02
	400	416.2	23.1	69	41.3	94.18
	500	421.4	22.3	69.4	42.6	97.76



Picture 1. Polarization curves of carbon steel in 1M HCl, uninhibited and inhibited by various concentrations of PSK-1 at 298 K

Electrochemical parameters can be calculated based on Tafel plots [3]. The current densities of cathodic and anodic corrosion decreased significantly with increasing concentration of PSK-1 in 1M HCl, indicating that the phosphorus-containing oligomeric inhibitor may also affect cathodic and anodic reactions (equations 1 and 2). As shown in Table 1, corrosion current densities indicate a significant decrease with increasing PSK-1 concentration. As a result, it is assumed that the increase in PSK-1 minimizes the dissolution of iron. Corrosion potential shift (E_{corr}) was evaluated according to formula 4, values (E_{corr}) are negligible or equal to zero. In addition, the likelihood of corrosion is caused by a geometrical obstacle on the surface of carbon steel when using a phosphorus-containing oligomer. If E_{corr} values are below 85 mV, the inhibitor can be considered a mixed type of inhibitor [4].

In the case where the E_{corr} value was negative below -85 mV, the phosphorus-containing oligomer can be attributed to the cathodic inhibitor type, while a positive value above $+85$ mV could be assumed to be the anodic inhibitor type [4]. In this article, the E_{corr} value of the polymer was -451.7 mV, so it is classified as a mixed-type inhibitor. The addition of PSK-1 phosphorus-containing oligomer to the 1M HCl solution significantly affected the slope of the cathode leg, the decrease in the corrosion current density of the cathode leg, the decrease in the corrosion current density of the cathode leg may indicate that the mechanism of hydrogen generation was changed due to the adsorption of PSK-1 on the metal surface.

$$\Delta E_{\text{corr}} = E_{\text{corr}} - E_0 \quad (4)$$

where E_0 and E_{inh} mean that the corrosion potential is not inhibited and the corrosion potential is inhibited by different concentrations of PSK-1, respectively.

Conclusion

Thus, the corrosion inhibition efficiency of a phosphorus-containing oligomer (PSK-1) on carbon steel was investigated in an aggressive solution using potentiodynamic polarization. The polarization parameters at 500mg/l of PSK-1 phosphorus oligomer in 1M HCl have a significantly higher inhibition efficiency of 97.76%, respectively, and the inhibition efficiency of PSK-1 phosphorus oligomer increases with inhibitor concentration.

References

1. Nurilloev Z.I., Beknazarov Kh.S., Jalilov A.T. Investigation of corrosion inhibition of steel 20 in 1M H_2SO_4 solutions, investigated by atomic absorption spectrometry // Universum: Technical sciences: electron. – 2019. – Vol. 2. - № 59. – P.35-39.
2. Hsissou R., Benassaoui H., Benhiba F., Hajjaji N., Elharfi A. Application of a new trifunctional epoxy prepolymer: triglycidyl Ether Ethylen of BisphenolA (TGEEBA) in the coating of E24 steel in NaCl 3.5%. J. Chem. Tech. Metall. – 2017. – Vol. 52. – P. 431-8.
3. Mohagheghi A., Arefinia R. Corrosion inhibition of carbon steel by dipotassium hydrogen phosphate in alkaline solutions with low chloride contamination. Constr Build Master. – 2018. – Vol. 187. – P. 760-72.
4. Kiyomov Sh.N. Jalilov A.T. Beknazarov Kh.S. Narzullaev A.Kh. Razhabova M.F. Corrosion inhibitors AIK-1 and AIK-2 in aggressive environments // Universum: technical sciences: electron. – 2019. – №7. – P. 51-56.
5. Narzullaev A.Kh. Sirojiddinov I.L. Mukhsinova N.E. Beknazarov Kh.S. Synthesis and use of new types of corrosion inhibitors based on cortonaldehyde// Universum: technical sciences: electron. – 2021. – Vol .2. – №83. – P.21-25.
6. Athira R., Poongothai N., Neena P.K., Babu T.G.S., Stanley J. Study of corrosion protection effect of low cost bio extractpolymer coating material for mild steel in acidic and marine Environments- a cost effective approach. Int J EngTechnol. – 2018. – Vol. 7. – P. 315-21.
7. Khurmamatov A.M., Yusupova N.K. The results of determining the fractional composition and physicochemical properties of oil sludge // Journal "Chemical Industry". – 2019. – Vol. 1. – P. 38-43.

Р. Дурдубаева¹, Х. Бекназаров², А. Асаматдинов¹, Н. Юсупова¹

¹Қарақалпақ мемлекеттік университеті, Нүкіс, Өзбекстан

²Ташкент химия-технологиялық ғылыми-зерттеу институты, Ташкент, Өзбекстан

Болаттың коррозиясын тежеуді қосалқы қалдықтарды пайдалана отырып зерттеу

Аңдатпа. Мақалада фосфоры бар олигомерлі ингибиторлар болатының коррозиясын тежелуі зерттеледі. Экспериментте келесі химиялық құрамдағы көміртекті болаттың үлгілері сыналды (мас. %): 0,19 көміртегі, 0,075 марганец, 0,055 фосфор, 0,625 темір, 0,047 күкірт және 0,008 т.б. Катодты және анодты коррозия реакцияларының кинетикасын тереңірек түсіну үшін Тафель графикасы жасалды. 500 мг/л фосфоры бар PSK-1 олигомерінің 1 м HCL-де поляризация деректері сәйкесінше 97,76% ингибирлеу тиімділігіне ие екендігі анықталды.

Түйін сөздер: коррозия ингибиторлары, металл коррозиясы, фосфор (V) - хлорид, цианур қышқылы.

Р. Дурдубаева¹, Х. Бекназаров², А. Асаматдинов¹, Н. Юсупова¹

¹Қарақалпақский государственный университет, Нукус, Узбекистан

²Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии, Ташкент, Узбекистан

Исследование ингибирования коррозии стали с использованием вторичных отходов

Аннотация. В статье исследовано ингибирование коррозии стали фосфорсодержащими олигомерными ингибиторами. В эксперименте были испытаны образцы углеродистой стали следующего химического состава (мас. %): 0,19 углерода, 0,075 марганца, 0,055 фосфора, 0,625 железа, 0,047 серы и 0,008 прочих. Для более глубокого понимания кинетики катодной и анодной реакций коррозии были построены графики Тафеля. Было установлено, что данные поляризации при 500 мг/л фосфорсодержащего олигомера PSK-1 в 1М HCl имеют значительно более высокую эффективность ингибирования - 97,76% соответственно.

Ключевые слова: ингибиторы коррозии, коррозия металлов, фосфор (V)-хлорид, циануровая кислота.

References

1. Nurilloev Z.I., Beknazarov Kh.S., Jalilov A.T. Investigation of corrosion inhibition of steel 20 in 1M H₂SO₄ solutions, investigated by atomic absorption spectrometry, *Universum: Technical sciences: electron*, 2(59), P.35-39 (2019).
2. Hsissou R., Benassaoui H., Benhiba F., Hajjaji N., Elharfi A. Application of a new trifunctional epoxy prepolymer: triglycidyl Ether Ethylen of BisphenolA (TGEEBA) in the coating of E24 steel in NaCl 3.5%. *J. Chem. Tech. Metall.*, 52, 431-8 (2017).
3. Mohagheghi A., Arefinia R. Corrosion inhibition of carbon steel by dipotassium hydrogen phosphate in alkaline solutions with low chloride contamination. *Constr Build Master*, 187, 760-72 (2018).
4. Kiyomov Sh.N., Jalilov A.T., Beknazarov Kh.S., Narzullaev A.Kh., Razhabova M.F. Corrosion inhibitors AIK-1 and AIK-2 in aggressive environments, *Universum: technical sciences: electron.*, 7, 51-56 (2019).
5. Narzullaev A.Kh., Sirojiddinov I.L., Mukhsinova N.E., Beknazarov Kh.S. Synthesis and use of new types of corrosion inhibitors based on crotonaldehyde, *Universum: technical sciences: electron.*, 2(83), 21-25 (2021).

6. Athira R., Poongothai N., Neena P.K., Babu T.G.S., Stanley J. Study of corrosion protection effect of low cost bio extractpolymer coating material for mild steel in acidic and marine Environments- a cost effective approach. Int J EngTechnol, 7, 315-21 (2018).

7. Khurmamatov A.M., Yusupova N.K. The results of determining the fractional composition and physicochemical properties of oil sludge, Journal "Chemical Industry", 1, 38-43 (2019).

Information about authors:

Durdubaeva R. – Karakalpak State University, Nukus, Uzbekistan.

Beknazarov H. – Tashkent Research Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan.

Asamatdinov A. – Karakalpak State University, Nukus, Uzbekistan.

Yusupova N. – Karakalpak State University, Nukus, Uzbekistan.

Дурдубаева Р. – Қарақалпақ мемлекеттік университеті, Нүкіс, Өзбекстан.

Бекназаров Х. – Ташкент химия-технологиялық ғылыми-зерттеу институты, Ташкент, Өзбекстан.

Асаматдинов А. – Қарақалпақ мемлекеттік университеті, Нүкіс, Өзбекстан.

Юсупова Н. – Қарақалпақ мемлекеттік университеті, Нүкіс, Өзбекстан.



Ecological and economic analysis of the impact of railway transport enterprises on the environment: (on the example of the branch of JSC «NC» Kazakhstan Temir Zholy)

Abstract. *The impact of rail transport on the environment is one of the major problems in the Republic of Kazakhstan. It is well known that railway transport causes enormous harm to the environment, destroying natural relief during the construction of railways, pollution of water and air objects also creates physical pollution for people, and the operation of wagons and the transport of hazardous substances can lead to a high degree of pollution and land degradation. This study was aimed at identifying the ecological and economic problems of railway transport in the territory of the Republic of Kazakhstan. For the analysis, materials and data on environmental protection were collected. The results showed that reducing the impact on the environment was achieved through measures of environmental legislation. This concerned the reduction of the use of liquid and solid fuels, the equipping of emission sources with the necessary purification equipment, the reconstruction of environmental protection facilities, and the development of regulatory and environmental documentation. Based on this, it is shown that the use of environmental technologies for practical purposes can ensure the effective functioning and operation of a natural resource user enterprise from an environmental and economic point of view.*

Keywords: *railways, ecosystem destruction, economic damage, emission charges, asset values, environmental protection measures.*

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-37-44>

Introduction

Environmental protection is one of the most urgent problems facing humanity in connection with the increasing intensity of industrial and agricultural production, which leads to global changes with difficult predictable consequences.

In any socio-economic formation, the economy cannot be considered effective if labor potential is destroyed, resources are inefficiently used, obsolete technology, and air, water bodies, and soil are polluted. It leads to ecological and economic contradictions between the production growth of material goods, anthropogenic impact on the environment the natural environment, the value of environmental costs, the introduction of waste-free technologies, etc.

At this stage of development of the productive forces, economic interests dominate the environment, which leads to negative consequences in the relationship between society and nature. Needed a systematic approach in which the interaction of three groups of factors - natural, production, and social, provides a permissible anthropogenic load on the biosphere. The natural environment is a combination of ecological systems - extremely complex dynamic formations, for a long time in a state of internal balance. However, the development of industrial production and transport has such a significant human impact on environmental systems, which the latter increasingly becomes incapable

neutralize this impact, which leads to the emergence of a global ecological crisis.

The main indicators characterizing the impact of economic activities on the natural environment and use of natural resources include:

- emission of harmful substances into the atmospheric air from stationary and mobile sources;
- excessive abstraction of water from surface and underground sources;
- discharge of contaminated wastewater not only into treatment structures, but also directly into water bodies and on the terrain;
- land pollution due to their non-agricultural use, waste generation during mining, enrichment of useful minerals, and industrial production [1].

Additional costs of society for environmental protection of the natural environment from its production activities are associated with:

- direct costs for nature protection, cleaning air and water basins, disposal and disposal of solid waste;
- losses associated with the need for redundancy in order to nature protection of those facilities that could be operated and bring real economic results;
- additional costs in connection with the development of natural resources in the worst mining and geological conditions and more remote places;
- increased costs for recycling and low high-quality raw materials (waste);
- costs for fundamental and applied scientific research and development work related to security, rational use and restoration of renewable natural resources, and mastering new technological processes.

Economic damage from environmental pollution environment is due to additional costs for:

- healthcare - medical services, sick pay sheets, loss of products (services) due to an increase in the incidence in zones of increased environmental hazard;
- agriculture - losses in crop production, animal husbandry, and forestry due to the withdrawal from agricultural turnover of land for industrial and transport construction;
- industry - due to staff turnover, repair costs, and restoration of fixed assets;
- diversion of financial resources to environmental protection of the natural environment from other spheres of economic and social activities [2].

All this aggravates the ecological situation in Kazakhstan, which is experiencing excess man-made impact due to the nature of existing industrial enterprises and betrays the problem of researching the possibilities of management improvement of the natural environment of particular relevance.

Increasing volumes of transportation of raw materials, semi-finished products, and finished products require additional development of vehicles, from which the leading place is and will be for a long-time railway (mainline and industrial) transport.

Materials and research method

The length of the main railway lines is more than 14 thousand km, the main part (97.5%) of the railway network is located in the territory of Kazakhstan, 2.5% - in the territory of the border regions of Russia and Kyrgyzstan. There are 720 stations and passing points along the road [3]. The freight car fleet is more than 120,000 units, the locomotive fleet is more than 1,200 units, 609 of which are updated and modernized [4]. Traction rolling stock includes diesel locomotives, electric locomotives, electric trains, diesel trains, railcars, railcars, and other self-propelled equipment. Non-traction rolling stock - various cars (passenger, freight, tank cars).

Provides 70% of freight and 60% of passenger traffic annually [3].

The unfavorable environmental situation is aggravated by the work of railway transport enterprises - locomotive and carriage depots, stations, track distances, subdivisions of water supply and sewerage, and fronts of the production of loading and unloading operations.

Due to more accurate accounting, the number of sources of emissions of harmful substances into the atmosphere on the railway increased from 8710 in 2018 to 9254 in 2019, or by 61.3%. The volume of emissions themselves decreased from 8624 tons/year in 2017 to 7960 tons/year in 2016 - by 13.4%.

Reducing the impact on the environment was achieved through the implementation of measures to comply with environmental legislation. They related to reducing the use of liquid and solid fuels, equipping emission sources with the necessary purification equipment, reconstruction of environmental protection facilities, and developing regulatory and environmental documentation.

So, at the boiler houses of Temir Zholy Kostanay LLP, dust and gas cleaning equipment was installed, in Lokomotiv JSC, oil-containing soils are cleaned with a special biological solution, at Akzhaiyk station, the drainage system of buildings in the city was overhauled with a road administration and a machine counting station. In addition, the station "Kazievka" of the East Kazakhstan branch of the road was transferred to electric heating, and at the locomotive repair of the station "Kostanay" the sewerage was adjusted, and an oil collector was installed.

As a result, the amount of fines and excess payments imposed over the past year has been reduced by 46% compared to 2019.

A similar situation takes place with wastewater discharges into water bodies and waste generation. The most environmentally hazardous facilities for railway transport are washing and steaming points for liquid rolling stock, disinfection points for cars for transporting animals and biologically hazardous substances, sleepers and crushed stone plants, rolling stock, transporting oil products, etc.[5]

Environmental safety is also violated by physical factors from the functioning of railway transport facilities: noise, vibration, electric and electromagnetic fields, explosions, fires, insufficient strength of the ballast of the railway track, etc.[6]

All of this determined the purpose of the study - the analysis of the actual environmental hazard of railway transport facilities and the development of recommendations for its reduction.

Environmental safety is understood as the conditions under which there are no factors leading to a violation of the environmental equilibrium in the natural environment, causing a stress state in the relationship between society and nature, and influencing the habitat of living organisms.

To achieve this with the current level of technology and technology almost impossible. For a combination of economic and environmental interests of the enterprise and society use environmental standards - maximum permissible concentration (MPC) of harmful substances and emissions (MPE), norms of green areas that define the boundaries of permissible anthropogenic loads on the natural environment.

Results

The main share of emissions of harmful substances into the atmosphere from stationary sources of railway transport accounted for boiler houses operating on solid fuel - 25% and civil service enterprises - 36.7%, the locomotive - 25.3%, and wagons depot - 9.8%.

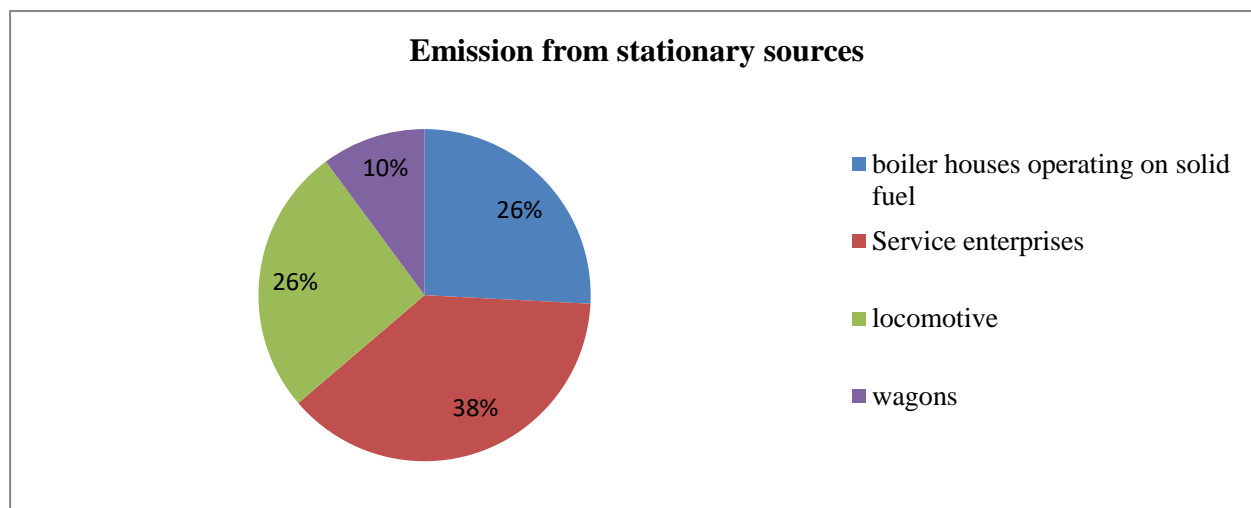


Figure 1. The types of emission from stationary sources

The volumes of emissions of harmful substances into various environments, the cost of fixed production assets for environmental protection, the costs of their operation, payments for emissions, discharges, and disposal of solid waste are shown in Table 1. They show that since 2017 Kazakhstan railway began to pay more attention to the implementation of measures for the protection of the natural environment. This was reflected, first of all, in a decrease in air emissions in 2018 compared to 2017 by 18.9%, incl. gaseous and liquid hazardous substances by 44.7%. A significant reduction in solid waste is due to a change in the method of accounting. The cost of fixed assets for environmental protection increased by 15.3%, and the cost of capital repairs and current maintenance increased 5, 1 time due to the slow pace of their renewal.

Environmental charges sharply increased both within the limit and above it, which led to an increase in costs for this item in 2019 by 7.5 times compared to 2018 and 5.2 times compared to 2017 of the total environmental charges, 49.5% fall on mobile sources (diesel locomotives, cars) and 46.2% on stationary ones, and this ratio remains stable throughout the period under consideration.

Table 1
Main indicators of work on environmental protection on the Kazakhstan railway

Indicator names	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019
Air emissions, <i>t.</i>	6689	7989	7340	7960	8624	8710	9254
of which solids	2267	2461	2803	2680	3100	3565	3905
gaseous and liquid	4401	6590	6637	6100	4902	4245	3530
Wastewater discharges, <i>thousand m.</i>	5236	3570	3302	3155	4237	3785	3578
incl. down the drain	2535	1766	1639	1470	2364	2222	1968
into water bodies	2729	1824	1672	1649	1891	1474	1401
Solid waste generation, <i>t.</i>	50500	42500	31000	36700	29100	6994*	7808*
The average annual cost of fixed assets for environmental protection, <i>million tenge</i>	5405	10467	11543	12567	13445	14569	14580

Overhaul costs, <i>million tenge</i>	4	5	6	7	8	-	3
Operating costs for environmental protection measures, <i>million tenge</i>	3633	5902	6000	6438	6905	7120	7230
Fee for emissions, discharges, waste disposal, <i>million tenge</i>	6	7	7.5	8	9**	9.8**	10.3**
incl. into the atmosphere from stationary sources	246	252	292	320	482	507	1102
into the atmosphere from mobile sources	158	303	296	375	587	529	1098
into water bodies	15	17	18	19	21	21	41
placing waste on the ground	53	60	69	80	85	105	165

* - solid waste

** - a sharp increase in payments for environmental discharges is due to the indexation of collection rates and the inflation index

Discussion

JSC NC "KTZh" carries out long-term and current planning in the field of environmental protection. Within the framework of long-term planning, investment projects "Ensuring environmental safety", and "Implementation of resource-saving technologies in railway transport", as well as there were developed investment projects of individual departments, offices, branches of JSC NC "KTZh".

The need for such a program and project are due to the diversity sources of pollution, the physical and chemical composition of harmful substances emitted into the atmosphere, water bodies, and land, limited resources, and prioritization of using them to protect the environment as much as a possible natural environment.

The aim of the program is to establish a sequence and scope of work for the implementation of a set of activities, which will ensure the reduction of emissions of harmful substances into the environment and the natural environment and bring their concentrations to acceptable values.

It includes the following organizational and technical measures:

- the creation of an environmental management system aimed at centralized provision of road enterprises with legislative and regulatory documents on environmental protection and control over their implementation;

- ensuring the effective functioning of regional laboratories and their re-equipment with modern complexes measuring equipment for monitoring the composition of the atmosphere, pollution wastewater, soil, electromagnetic, noise, vibration pollution;

- protection of atmospheric air by equipping dust collectors and cyclones for solid fuel boilers, creation of ecological diagnostic laboratories in locomotive depots roads, the use of gas analyzers for vehicle exhaust gases, transfer to electric heating of passenger cars;

- protection and rational use of water resources by construction and reconstruction of biological treatment facilities, recycling water supply systems, storm sewers, sample analysis water, etc.;

- land protection and rational use of natural plant resources through the inventory of waste and obtaining permits for their location, development of passports for oil sludge sites, purchase of a plant

for processing lubrication, improvement and landscaping of the railway, maintenance forest plantations;

- training and professional development of specialists in the field of environmental protection for the railway industry.

The implementation of the planned set of measures requires the performance of research works incl. development of technological processes and equipment samples to reduce emissions of harmful substances and their neutralization, ways to reduce pollution of the natural environment in case of transport accidents, technologies industrial waste processing, and modern system environmental monitoring at railway enterprises.

Conclusion

The research carried out allows us to formulate the following directions for preserving and improving the state of the surrounding natural:

- rail transport contributes to the deterioration the state of the natural environment, which economically affects on the financial indicators of his work. However, one should expect a more significant increase in environmental charges when legislative acts on this issue will fully work;

- it is necessary to carry out automatic monitoring for emissions of harmful substances into the atmosphere from permanent sources;

- more cost effective use of the mechanism environmental control and management at enterprises railway transport;

- develop and implement technological processes and production equipment that has minimal harmful impact on the natural environment, saving natural resources;

- create closed systems for water use, recuperation air, rational schemes for collection, storage and disposal toxic waste

- continue the implementation of the planned set of measures for environmental protection, providing them with planned financial, labor and material resources.

The practical implementation of these activities will contribute to improving the environmental situation in the Republic Kazakhstan due to reduction of harmful emissions by railway enterprises transport.

References

1. Panov B.S. Actual problems of ecology of Donbass // Materials of the IV International scientific-practical conference. – Donetsk: DITB, 2002. – P. 74-85.
2. Antipov B.V. Environmental activities // Popular science production and technical magazine "Way and track economy". – 2004. – Vol. 1. – P. 21.
3. Passport of hazardous waste of the branch of JSC "KTZh – Freight Transportation", – 2016.
4. Report Joint Stock Company "National company" Kazakhstan temir zholy", – 2019.
5. Carpenter T.G. The Environmental Impact of Railways. - New York: John Wiley & Sons, 1994. – P. 285-301.
6. Maslov N.N., Korobov Yu.I. Environmental Protection in Rail Transport: A Textbook for High Schools. – Moscow: Transport, 2004. – P. 238-240.

А.Ш. Абубекирова, К.Б. Масенов

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Теміржол көлігі кәсіпорындарының қоршаған ортаға әсерін экологиялық-экономикалық талдау: («Қазақстан темір жолы» ҰК»АҚ филиалы-«Магистральдық желі дирекциясы мысалында»)

Аңдатпа. Темір жол көлігінің қоршаған ортаға әсері Қазақстан Республикасындағы негізгі мәселелердің бірі болып табылады. Темір жол көлігі қоршаған ортаға орасан зор зиян келтіріп, темір жол құрылысы кезінде табиғи рельефті бұзып, су және ауа объектілерін ластайды, сонымен қатар адамдардың физикалық ластану әсерін тигізеді, ал вагондарды пайдалану және зиянды заттарды тасымалдау кезінде топырақтың ластануына және жердің деградациясына әкеп соғады. Бұл зерттеу Қазақстан Республикасы аумағындағы темір жол көлігінің экологиялық және экономикалық мәселелерін анықтауға бағытталған. Талдау үшін қоршаған ортаны қорғау бойынша керекті материалдар мен деректер жинақталды. Нәтижелер бойынша қоршаған ортаға әсерді азайтуға экологиялық заңнамалық шаралар арқылы қол жеткізілгенін көрсетті. Бұл сұйық және қатты отынды пайдалануды азайтуға, шығарындылар көздерін қажетті тазарту жабдықтарымен жабдықтауға, қоршаған ортаны қорғау объектілерін қайта құруға, нормативтік және экологиялық құжаттамаларды әзірлеуге қатысты. Осының негізінде экологиялық технологияларды практикалық мақсатта пайдалану экологиялық-экономикалық тұрғыдан табиғат пайдаланушы кәсіпорындарының тиімді жұмыс істеуі мен қызметін қамтамасыз ете алатыны көрсетілген.

Түйін сөздер: темір жолдар, экожүйені бұзу, экономикалық зиян, эмиссия төлемдері, активтердің құны, қоршаған ортаны қорғау шаралары.

А.Ш. Абубекирова, К.Б. Масенов

Евразийский национальный университет Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Эколого-экономический анализ воздействий предприятий железнодорожного транспорта на окружающую среду: (на примере филиала АО «НК «КТЖ»-«Дирекция магистральной сети»)

Аннотация. Воздействие железнодорожного транспорта на окружающую среду является одной из основных проблем в Республике Казахстан. Известно, что железнодорожный транспорт наносит огромный вред окружающей среде: при строительстве железных дорог разрушается природный рельеф, загрязняются водные и воздушные объекты, происходит физическое загрязнение людей, а эксплуатация вагонов и перевозка вредных веществ могут привести к высокой степени загрязнения и деградации земель. Данное исследование было направлено на выявление эколого-экономических проблем железнодорожного транспорта на территории Республики Казахстан. Для анализа были собраны материалы и данные по охране окружающей среды. Результаты показали, что снижение воздействия на окружающую среду было достигнуто за счет мер природоохранного законодательства. Это касалось сокращения использования жидкого и твердого топлива, оснащения источников выбросов необходимым очистным оборудованием, реконструкции природоохранных объектов, разработки нормативной и природоохранной документации. На основании этого показано, что использование природоохранных технологий в практических целях может обеспечить эффективное функционирование и деятельность предприятия-природопользователя с эколого-экономической точки зрения.

Ключевые слова: железные дороги, разрушение экосистем, экономический ущерб, плата за выбросы, стоимость активов, меры по охране окружающей среды.

References

1. Panov B.S. Actual problems of ecology of Donbass, Materials of the IV International scientific-practical conference, Donetsk: DITB, 74-85 (2002).
2. Antipov B.V. Environmental activities, Popular science production and technical magazine "Way and track economy", 1, 21 (2004).
3. Passport of hazardous waste of the branch of JSC "KTZh – Freight Transportation", 2016.
4. Report Joint Stock Company "National company" Kazakhstan temir zholy", 2019.
5. Carpenter T.G. The Environmental Impact of Railways. (New York, John Wiley & Sons, 1994, P. 285-301).
6. Maslov N.N., Korobov Yu.I. Environmental Protection in Rail Transport: A Textbook for High Schools. (Moscow, Transport, 2004, 238-240).

Information about author:

Abubekirova A.Sh. – The 2nd year master's student course, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Massenov K.B. – Ph.D. in Engineering, Professor Department of Management and Engineering in the field of environmental protection, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Абубекирова А.Ш. – 2 курс магистранты, жаратылыстану ғылымдары факультеті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Масенов К.Б. – техника ғылымдарының кандидаты, Қоршаған ортаны қорғау саласындағы басқару және инжиниринг кафедрасының профессоры, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Н.Б. Зуева^{1*}, Л.Д. Жлоба³, К.К. Кунанбаев⁴, Н.А. Поползухина⁵

^{1,3,4}ТОО «Научно-производственный центр зернового хозяйства им. А.И. Бараева», п. Научный, Казахстан

²ФГБУ «Омский государственный аграрный университет имени П.А. Столыпина», г.Омск, Россия

(Email ³zhl_ld@mail.ru, ⁴kunanbayeva@gmail.com, ⁵poplzuch_na@mail.ru)

^{1*}Автор для корреспонденции: kotvic@bk.ru

Экологическая оценка состояния пахотного слоя разных типов почв Северного Казахстана при использовании технологии No-till

Аннотация. В статье представлены результаты оценки пахотного горизонта разных типов почв Северного Казахстана по содержанию валовых форм меди, цинка и кадмия. Проведен расчёт экологического показателя суммарного загрязнения и дана экологическая оценка состояния почв.

Исследования проводились на черноземе обыкновенном, южно-карбонатном и каштановых почвах при многолетнем применении технологии No-till. По извлекаемым 5М раствором азотной кислоты валовым формам тяжелых металлов производили расчет суммарного загрязнения почв. Проведенная экологическая оценка состояния пахотного слоя при использовании технологии No-till показала допустимую оценку показателя загрязнённости почв для сельскохозяйственного использования на обыкновенном и южно-карбонатном черноземе. Исследования, проведенные на каштановых почвах, выявили I и II степени загрязнённости. Необходимы периодический мониторинг и учет поступления тяжелых металлов в эти почвы.

Ключевые слова: почва, медь, кадмий, цинк, показатель Саета, суммарный показатель загрязнения.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-45-52>

Введение

Сельскохозяйственные системы должны снабжать едой растущее население мира, одновременно способствуя уменьшению выбросов парниковых газов. Почвенное земледелие с минимальным нарушением почвенного покрова, особенно нулевая технология, постоянный (бессменный) посев культур (сельскохозяйственных или покровных) и использование в севообороте диверсифицированных культур - все это эффективный способ уменьшения риска эрозии почвы и улучшения ее качества при обеспечении продовольственной безопасности [1].

В последнее время серьезную озабоченность вызывает загрязнение поверхностных отложений в результате различных видов антропогенной деятельности. Эти тяжелые металлы имеют типичные характеристики стойкости и таким образом не ухудшаются и не разлагаются со временем, что делает их токсичными, когда концентрации превышают допустимые пределы [2].

Загрязнение почв тяжелыми металлами вызывает большую озабоченность в связи с их биодоступностью, биоаккумуляцией, токсичностью и неспособностью к деградации. Исследования показали, что чрезмерное воздействие загрязненных почв может вызвать токсическое воздействие на биологические организмы, такие как растения и животные, особенно там, где отсутствует строгое применение законодательства об охране окружающей среды. Неблагоприятные последствия для здоровья человека, связанные с воздействием этих отдельных токсичных металлов или их смесей, включают рак, проблемы с печенью, неврологические, гематологические, эндокринные и репродуктивные расстройства и почечную недостаточность [3,4].

Цель исследования - изучить влияние технологии No-till на валовое содержание меди, цинка и кадмия на разных почвах Северного Казахстана и рассчитать экологический показатель суммарного загрязнения.

Методика исследования

Исследования по экологической оценке почвы проводились в 2019 г. на производственных полях ТОО «Central Feedlot», ТОО «TreeA-ТриА» и ТОО «НПЦ ЗХ им А.И. Бараева» при многолетнем применении технологии No-Till. Отбор почвенных проб проведен в слое 0-20 см.

Исходная агрохимическая характеристика полей ТОО «Central Feedlot»: почвенный покров представлен каштановыми почвами (Карагандинская область), содержание органического вещества – 1,33-4,95 %, нитратов 7,1-22,1 мг/кг, подвижных форм фосфора (по Мачигину) – 62,3-288,2 мг/кг и обменного калия – 145 – 541 мг/кг.

Исходная агрохимическая характеристика полей ТОО «TreeA-ТриА»: чернозем обыкновенный (Акмолинская область, Аккольский район) содержание органического вещества – 1,95-3,24 %, нитратов 6,7- 16,4 мг/кг, подвижных форм фосфора (по Мачигину) – 5,2 - 24,8 мг/кг и обменного калия – 271 – 509 мг/кг.

Исходная агрохимическая характеристика полей ТОО «НПЦ ЗХ им А.И. Бараева»: чернозем южно-карбонатный (Акмолинская область, Шортандинский район) содержание органического вещества – 3,45 – 3,67 %, нитратов 17,5 – 77,4 мг/кг, подвижных форм фосфора (по Мачигину) – 32,6 - 44,9мг/кг и обменного калия – 646 - 693 мг/кг.

Исследования выполнены на базе лаборатории почвенно-агрохимических исследований ТОО «НПЦ ЗХ им А.И. Бараева». Определение валовых форм меди, цинка и кадмия (экстрагент 5М раствор азотной кислоты) осуществляли атомно-абсорбционным методом на спектрофотометре Varian AA-140. В качестве исходных показателей использовали значение кларка почвы.

Практически все рассматриваемые формулы основаны на коэффициенте концентрации K_k каждого из элементов относительно фона. Во многих случаях геохимии применяют показатель Саета (Z_c) (1), величина которого отличается по классам опасности, по мнению Саега Ю.Е. и др., и в нем считается количество участвующих элементов-поллютантов (n) [5,6].

$$Z_c = \sum K_{ki} - (n - 1) \quad (1)$$

Критические значения, дающие характеристику почв для сельскохозяйственного использования с суммарным загрязнением Z_c по степени опасности [7], представлены в таблице 1.

Таблица 1

Принципиальная схема оценки почв сельскохозяйственного использования по степени загрязнения химическими веществами

Вид почв по степени загрязнения		Суммарный показатель загрязнения, Z_c	Потенциальное применение почв
I	Допустимая	Менее 16,0	Можно использовать под любыми культурами.
II	Умеренно опасная	16,1 – 32,0	Можно использовать под любыми культурами, если проводить контроль качества растениеводческой продукции.

III	Высоко опасная	32,1 – 128,0	Можно использовать под культурами без производства из них продуктов питания и кормов, в которых могут содержаться химические вещества выше ПДК. Не использовать растения-концентраторы вредных веществ.
IV	Чрезвычайно опасная	Более 128,1	Вывести из сельскохозяйственной эксплуатации.

Внеся поправочный коэффициент на токсичность, рассчитывали экологический показатель суммарного загрязнения (Z_{ct}) по формуле (2):

$$Z_{ct} = \sum(K_{ki} * K_{ti}) - (n - 1) \quad (2)$$

где K_{ti} - коэффициент токсичности i -того элемента. Значение коэффициентов токсичности элементов и классы опасности представлены в таблице 2.

Предназначение коэффициента K_{ti} заключается в необходимости сохранить шкалу критических суммарных показателей Z_c , предложенную Ю.Е.

Таблица 2

Классы опасности тяжелых металлов и коэффициенты токсичности K_t

Класс опасности	K_t	Химические элементы
1	1,5	As, Cd, Hg, Pb, Zn, Cr
2	1,0	Co, Ni, Mo, Cu, Sb
3	0,5	Ba, V, W, Mn, Sr

Математическая обработка данных проводилась методами дисперсионного анализа, корреляции и регрессии по Б.А. Доспехову (1985) на персональном компьютере.

Результаты исследования

Результаты анализа по определению содержания меди, кадмия и цинка в исследуемых почвах с применением No-till представлены в таблице 3.

Таблица 3

Содержание валовых форм тяжелых металлов на разных типах почв, коэффициенты концентрации, показатель Саета и экологический показатель суммарного загрязнения с учетом токсичности при использовании технологии No-till, 2021 г., в слое 0-20 см, мг/кг

Поле, №	Cu	Cd	Zn	Kk_{Cu}	Kk_{Cd}	Kk_{Zn}	Zc	Zct
ТОО «Central Feedlot» (каштановые почвы)								
027-210	14,16	2,02	49,34	0,71	12,6	0,91	12,3	19,0
118-216	16,54	2,18	68,02	0,83	13,5	1,26	13,6	21,0
118-217	17,28	2,33	59,32	0,86	14,6	1,10	14,6	22,4
118-045	14,43	2,35	27,81	0,72	14,7	0,52	13,9	21,8
118-046	19,06	2,16	49,74	0,95	13,5	0,92	13,4	20,6
166-494	7,78	0,72	111,46	0,27	5,31	1,78	5,36	8,91
027-213	5,38	0,85	95,95	0,66	4,19	1,88	4,73	7,77
027-211	13,10	0,67	101,78	0,42	5,56	3,09	7,07	11,4
027-209	8,38	0,89	167,10	0,32	4,13	1,27	3,72	6,43
<i>Klark</i>	20,0	0,16	54,0	-	-	-	-	-
ТОО «TreeA-ТриА» (чернозем обыкновенный)								
1	6,33	0,78	105,45	0,25	3,25	1,55	3,05	5,46
2	7,43	0,85	107,60	0,30	3,54	1,58	3,42	5,98
3	10,48	0,83	78,48	0,42	3,46	1,15	3,03	5,33
4	10,93	0,77	86,89	0,44	3,21	1,28	2,93	5,17
5	10,53	0,85	90,58	0,42	3,54	1,33	3,29	5,73
6	8,78	0,83	117,95	0,35	3,46	1,73	3,54	6,14
7	10,58	1,04	99,63	0,42	4,33	1,47	4,22	7,13
8	9,13	0,43	107,38	0,37	1,79	1,58	1,74	3,43
ТОО «НПЦ ЗХ им А.И. Бараева» (чернозем южно-карбонатный)								
11 пшеница	17,97	1,55	75,83	0,72	6,46	1,12	6,30	10,09
8 ячмень	12,42	1,27	38,54	0,50	5,17	0,57	4,24	7,12
<i>Klark</i>	18,0	0,24	37,0				-	-

Содержание металлов, особенно Cd и Zn, превышало значения кларка этих металлов в почве. Содержание меди на всех исследуемых почвах было меньше значения кларка и для каштановых почв составило 20 мг/кг, для черноземов - 18,0 мг/кг. Необходимо отметить, что на поле № 11 ТОО «НПЦ ЗХ им. А.И. Бараева» содержание меди (17,97 мг/кг) приближалось к его фоновому значению.

По результатам экологической оценки почвы было установлено, что на полях 027-210, 118-045 и 118-046 ТОО «Central Feedlot» содержание валовых форм цинка составило 27,81-49,74 мг/кг и не превышало значения кларка, характерного для каштановых почв (54,0 мг/к). Отметим, что на полях 166-494, 118-216, 118-217, 027-209, 027-211 и 027-213 этого же хозяйства содержание Zn превысило фоновое значение и составило 95,95-167,10 мг/кг. Наибольшее содержание цинка было отмечено на поле 027-211, которое составило 167,10 мг/кг, превысив фоновое значение в 3 раза.

Исследование показало, что на черноземе южно-карбонатном содержание цинка на полях ТОО «НПЦ ЗХ им. А.И. Бараева» было равным 75,83 и 38,54 мг/кг, что было выше уровня кларка, характерного для черноземов (37,0 мг/кг); на поле №11 - в 2 раза, и на поле №8 - в 1,5 раза. На черноземе обыкновенном (поля ТОО «TreeA-ТриА») при многолетнем применении технологии No-till содержание цинка в почве составило 78,4-117,95, что было выше фоновое значения в 2-3 раза.

Одним из наиболее токсичных тяжёлых металлов для живого организма в почве является кадмий [8]. Даже в ничтожно малых количествах он не участвует ни в одном из известных биохимических процессов в организме животных и растений [9].

На черноземе обыкновенном содержание кадмия в почве превышало фоновое значение (0,24 мг/кг), но по валовому содержанию элемента в пахотном слое почвы изученные поля мало различались. Отметим наименьшее содержания элемента на поле №8 ТОО «TreeA-ТриА», которое составило 0,43 мг/кг, и наибольшее его содержание - на поле №7 (1,04 мг/кг). На черноземе южно-карбонатном выявлено накопление кадмия в почве в сравнении с фоновым содержанием на поле №11 и №8 ТОО «НПЦ ЗХ им. А.И. Бараева». Так как черноземы южно-карбонатные характеризуются слабощелочной средой, соединения меди, кадмия и цинка, согласно системе Глазовской (1997), в этой среде слабоподвижные, но активно накапливаются. Превышение значения кларка по содержанию кадмия (0,66-2,35 мг/кг) было отмечено на каштановых почвах (поля ТОО «Central Feedlot»).

Расчет показателя суммарной загрязненности почв с учетом токсичности (менее 16,0) выявил допустимый уровень загрязнения (для почв сельскохозяйственного использования) на южных и обыкновенных черноземах при использовании технологии No-Till.

Показатель Саета на поле №11 под посевами пшеницы (ТОО «НПЦ ЗХ Им. А.И. Бараева») составил 6,30, что было обусловлено превышением содержания кадмия и цинка выше значения кларка, а также повышенным значением коэффициентов концентрации, которые составили 6,46 и 1,12 соответственно. На поле № 8 экологический показатель суммарного загрязнения почвы с учетом токсичности элемента составил 7,12, что было связано как с превышением содержания валовых соединений кадмия выше уровня кларка, так и с высоким коэффициентом токсичности ($K_t=1,5$).

Результаты расчетов показали, что на полях ТОО «TreeA-ТриА» экологический показатель суммарного загрязнения почв составил 3,43-7,13, что соответствует I категории по степени загрязненности и является допустимым. Максимальное значение показателя Саета - 4,22 было отмечено на поле №7.

На каштановых почвах (поля 027-210, 118-216, 118-217, 118 – 045 и 118-046) ТОО «Central Feedlot» показатели Саета составили 9,66-11,54, что позволяет отнести их к I категории по степени загрязненности. Значение экологического показателя суммарного загрязнения с учетом токсичности элемента составило 19,0-22,4, что характеризует почвы как умеренно опасные (II категория), в этой ситуации необходимо осуществление постоянного контроля за содержанием доступных для растений форм кадмия и цинка.

Заключение

Таким образом, проведенная экологическая оценка состояния пахотного слоя при использовании технологии No-till показала допустимую оценку показателя загрязненности почв для сельскохозяйственного использования на обыкновенном и южно-карбонатном черноземе. Исследования, проведенные на каштановых почвах, выявили I и II степени их загрязненности. Необходим периодический мониторинг и учет поступления тяжелых металлов в эти почвы.

Список литературы

1. Fan J. et al. Rotational benefit of pulse crop with no-till increase over time in a semiarid climate // *European Journal of Agronomy*. – 2020. – Vol. 121(126155). – P. 1-11.
2. Dash S. et al. Heavy metal pollution and potential ecological risk assessment for surficial sediments of Deepor Beel, India // *Ecological Indicators*. – 2021. – Vol. 122(107265). – P.1-15.

3. Adedej O.H. et al. Assessing spatial distribution, potential ecological and human health risks of soil heavy metals contamination around a Trailer Park in Nigeria// Scientific African. – 2020. – Vol. 10 (e00650). – P.1-14.
4. Унканжинов Г.Д. Эколого-токсикологическая оценка состояния пахотных почв Республики Калмыкия //Агрехимический вестник. – 2012. – №6. – С. 10-12.
5. Саев Ю.Е. Геохимия окружающей среды. – Москва: Недра, 1990. – 335 с.
6. Саев Ю.Е. Геохимические принципы выявления зон воздействия промышленных выбросов в городских агломерациях // Ландшафтно-геохимическое районирование и охрана среды. – Москва: Мысль, 1983. – 97 с.
7. Кузнецов А.В. Методические указания по определению тяжелых металлов в почвах сельхозугодий и продукции растениеводства. – Москва: ЦИНАО, 1992. – 27-28 с.
8. Лукин С.В. Накопление кадмия в сельскохозяйственных культурах в зависимости от уровня загрязнения почвы // Агрехимия. – 2000. – № 2. – С. 73.
9. Минеев В.Г. Агрехимия. – Москва: МГУ, 1990. – 486 с.

Н.Б. Зуева^{1,2}, Л.Д. Жлоба¹, К.К. Кунанбаев¹, Н.А. Поползухина²

¹ЖШС «А.И. Бараев атындағы астық шаруашылығы ғылыми-өндірістік орталығы», Нұр-Сұлтан, Қазақстан

²ФГБУ «П.А. Столыпин атындағы Омбы мемлекеттік аграрлық университеті», Омбы, Ресей

Солтүстік Қазақстанның әртүрлі топырақ түрлерінде No-till технологиясын қолдану барысында өңделетін қабаттың жағдайын экологиялық бағалау

Аңдатпа. Мақалада Солтүстік Қазақстанның әр түрлі топырақ түрлерінің өңделетін горизонтында мыс, мырыш және кадмийдің жалпы мөлшері бойынша баға беру нәтижелері берілген. Жалпы ластанудың экологиялық көрсеткіші есептелді және топырақтың жағдайына экологиялық баға берілді.

No-till технологиясын көп жылдары қолданып жатқан кәдімгі қара, оңтүстік карбонатты қара және қоныр топырақтарда зерттеулер жүргізілді. 5М азот қышқылы ерітіндісімен бөлініп алынатын ауыр металдардың жалпы формалары бойынша топырақтың жиынтық ластануын есептедік. No-till технологиясын қолдану барысында өңделетін қабаттың жағдайы бойынша жүргізілген экологиялық бағалау ауыл шаруашылығында пайдалану үшін кәдімгі қара топырақта және оңтүстік карбонатты қара топырақта топырақтың ластану көрсеткішінің рұқсат етілген бағасын көрсетті. Қоныр топырақтарда жүргізілген зерттеулер ластанудың I және II дәрежесін анықтады. Осы топырақтарға ауыр металдардың түсуін мерзімді бақылау және есеп жасау керек.

Түйін сөздер: топырақ, мыс, кадмий, мырыш, Саев көрсеткіші, ластанудың жиынтық көрсеткіші.

N.B. Zueva^{1,2}, L.D. Zhloba¹, K.K. Kunanbayev¹, N.A. Popolzuxinana²

¹A.I. Barayev research and production center for grain farming, Nauchnyj, Kazakhstan

²Omsk State Agrarian University named after P.A. Stolypin, Omsk, Russia

Ecological assessment of the condition of the arable layer with the No-till technology on different types of soils of Northern Kazakhstan

Abstract. The article presents the results of the assessment of the arable horizon of different types of soils of Northern Kazakhstan on the content of gross forms of copper, zinc, and cadmium. The authors carried out a calculation of the ecological indicator of total pollution. The article considers an ecological assessment of the soil condition.

The studies were carried out on ordinary chernozem, southern carbonate, and chestnut soils with the long-term use of No-till technology. According to the gross forms of heavy metals extracted with a 5 M solution of nitric acid, there was calculated the total soil pollution. The conducted ecological assessment of the state of the arable layer using No-till technology showed an acceptable assessment of the soil contamination index for agricultural use on ordinary and southern carbonate chernozem. Studies conducted on chestnut soils revealed I and II degrees of contamination. Periodic monitoring and accounting of the intake of heavy metals into these soils would be required.

Keywords: soils, total form, copper, cadmium, zinc, Sayetha's indicator, total pollution indicator.

References

1. Fan J. et al. Rotational benefit of pulse crop with no-till increase over time in a semiarid climate, *European Journal of Agronomy*, 121(126155), 1-11 (2020).
2. Dash S. et al. Heavy metal pollution and potential ecological risk assessment for surficial sediments of Deepor Beel, India, *Ecological Indicators*, 122(107265), 1-15 (2021).
3. Adedej O.H. et al. Assessing spatial distribution, potential ecological and human health risks of soil heavy metals contamination around a Trailer Park in Nigeria, *Scientific African*, 10 (e00650), 1-14 (2020).
4. Unkanzhinov G.D. Ekologo-toksilogicheskaya ocenka sostoyaniya pahotnyh pochv Respubliki Kalmykiya, *Agrohimicheskij vestnik* [Ecological and toxicological assessment of arable soil of the Republic of Kalmykia, *Agrochemical Bulletin*], 6, 10-12 (2012). [in Russian]
5. Saet YU.E. Geohimiya okruzhayushchej sredy [Environmental Geochemistry]. (Moskva, Nedra, 1990, 335 s.) [Moscow, Nedra, 1990, 335 p.]. [in Russian]
6. Saet YU.E. Geohimicheskie principy vyyavleniya zon vozdeystviya promyshlennyh vybrosov v gorodskih aglomeracijah, *Landshaftno-geohimicheskoe rajonirovanie i ohrana sredy* [] (Moskva, Mysl', 1983, 97 s.) [Moscow, Mysl', 1983, 97 p.]. [in Russian]
7. Kuznecov A.V. Metodicheskie ukazaniya po opredeleniyu tyazhellyh metallov v pochvah sel'hozogodij i produkcii rastenievodstva [Guidelines for the determination of heavy metals in farmland soils and crop production] (Moskva, CINAО, 1992, 27-28 s.) [Moscow, CINAО, 1992, 27-28 p.]. [in Russian]
8. Lukin S.V. Nakoplenie kadmiya v sel'skohozyajstvennyh kul'turah v zavisimosti ot urovnya zagryazneniya pochvy, *Agrohimiya* [The accumulation of cadmium in crops, depending on the level of soil contamination, *Agrochemistry*], 2, 73 (2000). [in Russian]
9. Mineev V.G. *Agrohimiya* [Agrochemistry] (Moskva, MGU, 1990, 486 s.) [Moscow, MGU, 1990, 486 p.]. [in Russian]

Сведения об авторах:

Зуева Н.Б. – научный сотрудник ТОО «Научно-производственный центр им А.И. Бараева», аспирант ФГБУ «Омский государственный аграрный университет имени П.А. Столыпина», ул. Бараева 15, п. Научный, Казахстан.

Жлоба Л.Д. – научный сотрудник ТОО «Научно-производственный центр им А.И. Бараева», ул. Бараева 15, п. Научный, Казахстан.

Кунанбаев К.К. – заведующий отделом ТОО «Научно-производственный центр им А.И. Бараева», ул. Бараева 15, п. Научный, Казахстан.

Поползухина Н.А. – профессор кафедры экологии, природопользования и биологии ФГБОУ ВО «Омский государственный аграрный университет им. П.А. Столыпина», Институтская площадь 1, г. Омск, Россия.

Zueva N.B. – Research associate of A.I. Barayev research and production center for grain farming, postgraduate student of Omsk State Agrarian University named after P.A. Stolypin, 15 Barayev str., Nauchnyj village, Kazakhstan.

Zhloba L.D. – Researcher at A.I. Barayev research and production center for grain farming, 15 Barayev str., Nauchnyj village, Kazakhstan.

Kunanbayev K.K. – Head of the Department of A.I. Barayev research and production center for grain farming, 15 Barayev str., Nauchnyj village, Kazakhstan.

Popolzukhina N.A. – Head of the Department of Ecology, Nature Management and Biology of the Omsk State Agrarian University named after P.A. Stolypin, Institutskaya Square 1, Omsk, Russia.

¹А. Тюржанова, ²А. Нурмагамбетова, Ж.Г. Берденов*

Казахстан Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
(email aliyatyuruzhanova@gmail.com, ²nurmagambetova99@inbox.ru)

*Автор для корреспонденции: berdenov-z@mail.ru

**Моделирование выбросов загрязняющих веществ
в атмосферу города Рудный**

Аннотация. Научная работа основана на современных методах математического моделирования атмосферных процессов, которые позволяют рассчитать, на основе статистических данных, объемы выбросов загрязняющих веществ в отдельных (контрольных) точках и строить изолинейные карты распределения концентраций загрязняющих веществ. В данной научной статье картирование уровня загрязнения атмосферы г. Рудный проводилось с учетом выбросов с территории промышленных предприятий по методике В.А. Петрухина и В.А. Вишенского, позволяющей рассчитать средние значения концентраций загрязняющих веществ по слою перемешивания. Рассмотрен вклад природных факторов в загрязнение атмосферы. Выявлены основные источники загрязнения атмосферы, приведены объемы выбросов согласно данным стационарных постов. В работе составлены модели рассеивания загрязняющих веществ по 4 показателям.

Ключевые слова: моделирование, атмосфера, выбросы, загрязняющие вещества, стационарные источники.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-53-61>

Введение

Проблема загрязнения окружающей среды является одной из актуальных проблем человечества. Особенно эта проблема касается промышленных городов любого государства. Наиболее подвержен изменению атмосферный воздух, который выполняет жизнеобеспечивающие, защитные и другие функции. Повышенное загрязнение атмосферного воздуха приводит к негативному влиянию на здоровье населения [1, 2].

Наиболее эффективным способом картографического представления данных о состоянии атмосферного воздуха является изолинейная модель. При ограниченности данных мониторинга они используются преимущественно для верификации, тогда как основным методом картографирования является моделирование процессов рассеивания выбросов от источников с учетом статистических данных и климатических характеристик [3]. Современные методы математического моделирования атмосферных процессов позволяют рассчитать на основе статистических данных об объемах выбросов загрязняющих веществ в отдельных (контрольных) точках и строить изолинейные карты распределения концентраций загрязняющих веществ [4]. Основной областью применения расчетных методов является нормирование выбросов на уровне предприятий, но это не исключает их применения и при решении научных задач, связанных с оценкой экологической обстановки в пределах больших территорий.

Объект и методы исследования

Из методов расчетов рассеивания загрязняющих веществ над большими территориями, не имеющих официального статуса, используются более простые модели, учитывающие мощность выбросов от крупных источников (городов, отдельных предприятий), высоту слоя перемешивания атмосферы, повторяемость и скорость ветров различных направлений. Так, для

оценки загрязнения атмосферного воздуха над территорией г. Рудный нами был использован методический подход, разработанный В.А.Петрухиным и В.А.Вишенским [5], для количественной оценки состояния атмосферного воздуха при распространении загрязняющих веществ на значительные расстояния использовались фондовый материал филиала РГП «Казгидромет» в городе Рудный [6-8], а также повторяемость и скорость ветров различных направлений по данным метеорологических служб [9].

Вопрос применения экологического картографирования городских территорий в целях проведения эффективного анализа и прогноза изменения экологической ситуации рассматривается в [10] коллективом авторов – Н.С. Касимовым, А.С. Курбатовой, В.Н. Башкиным. Картографический материал выступает как средство наглядного отображения пространственно-временных аспектов взаимоотношения природы и человека и служит инструментом для представления результатов комплексной оценки состояния окружающей среды городов.

Объектом исследования является приземный слой атмосферы г. Рудный. Рудный является городом областного значения, расположен в 45 км к юго-западу от областного центра на левом берегу реки Тобол на автомагистрали республиканского значения Костанай – Житикара, образован в 1957 году.

Город Рудный входит в состав Костанайской области, занимает площадь 193,13 км² [11]. Данный район характеризуется степным ландшафтом. Основные природные особенности Костанайской области определяются ее внутриматериковым положением на стыке Урала, Западной Сибири и Центрального Казахстана. Город расположен в северной части Торгайского плато, на берегу реки Тобол (рисунок 1). Рельеф в основном равнинный. Высота над уровнем моря 200 – 220 м [12].

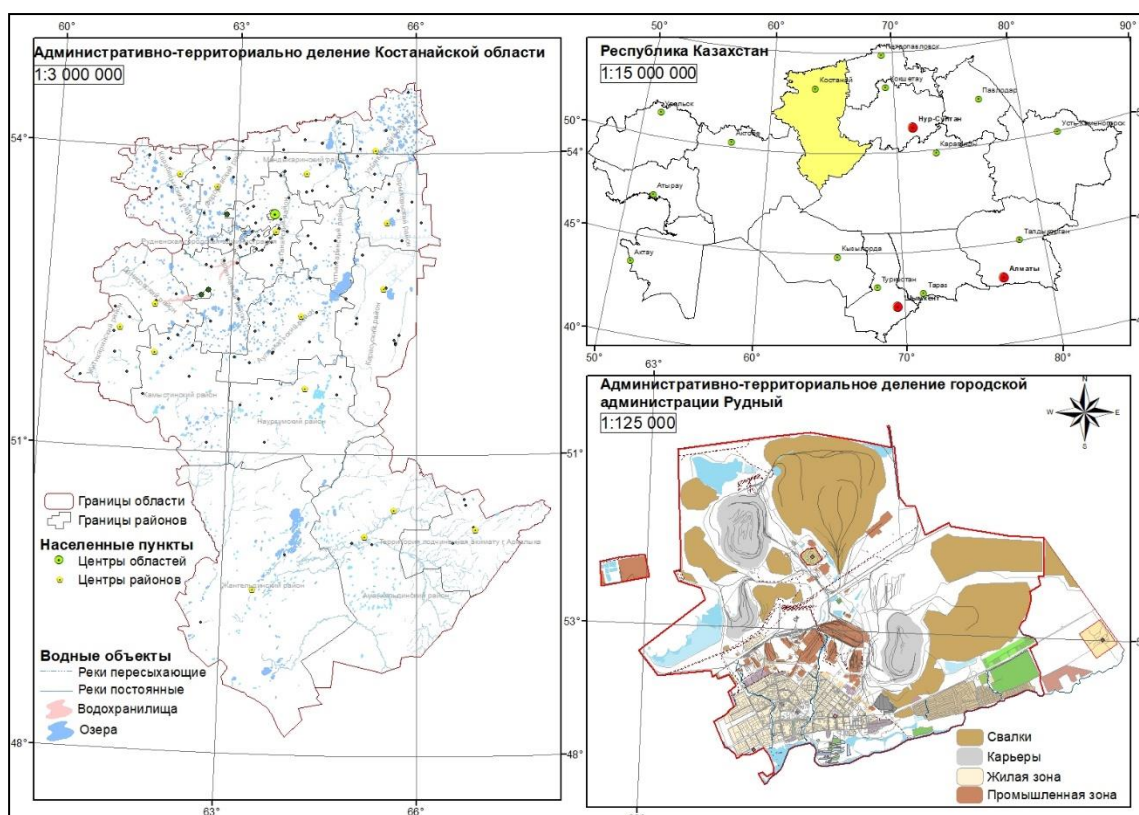


Рисунок 1. Карта расположения города Рудный

Примечание – составлено авторами на основе системы ArcGis 10.1

В состав городской администрации входят 1 город областного значения, 2 городских посёлка и 1 село.

В объеме промышленного производства Костанайской области г. Рудный занимает 37,8%.

Анализ и обсуждение

Город является одним из промышленно-развитых регионов Костанайской области. В городе функционируют предприятия горнодобывающей (АО «ССГПО»), обрабатывающей промышленности (ТОО «Лидер-2010», Рудненский филиал ТОО «Арасан» (производство пива), ТОО «Казогнеупор 2015», ТОО «Рудненский завод металлоконструкций - Имсталькон», ТОО «Злак+», ТОО «Раумена»), предприятия по производству и распределению электроэнергии (Филиал «Сарбайские МЭС» АО «KEGOK», ТОО «ЭПК Atica», ТОО «Рудненская ЭнергоКомпания), газа (Рудненское газовое хозяйство Костанайского производственного филиала АО «КазТрансГазАймак») и воды (ТОО «Рудненский водоканал»).

Все вышеперечисленные градообразующие предприятия обеспечивают 91% всего объема промышленного производства города. Так как Рудный является городом с промышленной направленностью, то данный сектор играет ключевую роль в экономике города. Ведущая роль горнодобывающей промышленности обуславливает негативное воздействие на состояние атмосферного воздуха в городе. В структуре экономики города удельный вес промышленности составляет 85 %.

Основными источниками загрязнения воздушного бассейна в г. Рудный являются предприятия горнодобывающей и теплоэнергетической промышленности, автомобильный транспорт.

К предприятиям горнодобывающей промышленности относится АО «ССГПО». Обрабатывающая промышленность представлена: ТОО «Лидер-2010», Рудненский филиал ТОО «Арасан», ТОО «Казогнеупор 2015», ТОО «Рудненский завод металлоконструкций - Имсталькон», ТОО «Злак+», ТОО «Раумена».

На долю самого крупного горнодобывающего предприятия Костанайской области - АО «ССГПО» («Соколовско-Сарбайское горно-обогатительное производственное объединение») приходится около 79% выбросов от общего объема промышленных выбросов предприятий области.

Результаты

По данным Комитета по статистике РК, общий объем выбросов в 2021 году составил 130,5 тыс. т. За 2019-2021 годы наблюдается увеличение объемов выбросов (рисунок 2).

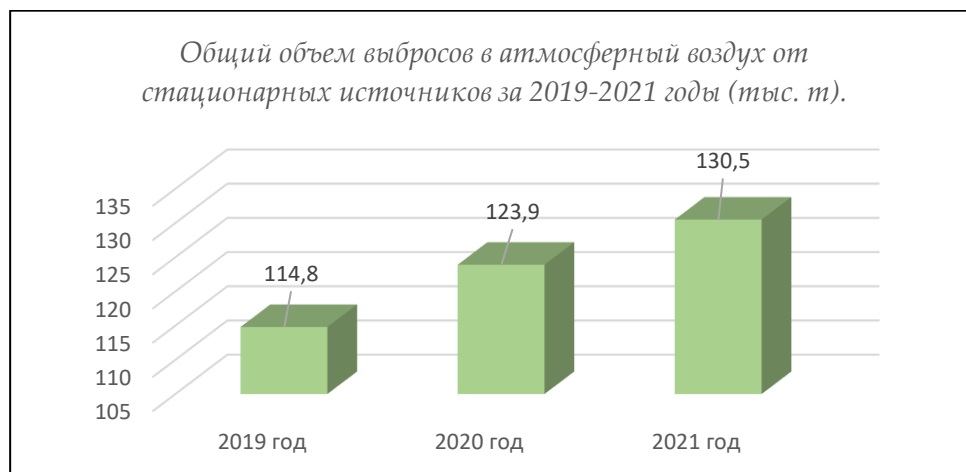


Рисунок 2. Схема объемов выбросов в атмосферный воздух [42]

Примечание – составлено на основе данных Комитета статистики РК

Объем общих выбросов по Костанайской области за 2021 год составил 130,5 тыс. тонн, из них объем промышленных выбросов составляет около 21%, доля выбросов от сжигания автомобильного топлива - около 79% (таблица 1), (рисунок 3) [13].

Таблица 1

Объемы выбросов основных загрязняющих веществ в атмосферный воздух за 2020-2021 годы (тыс. т) [13]

Наименование основных ЗВ	2020 год (тонн в год)	2021 год (тонн в год)
Сернистый ангидрид	22,6	25,1
Оксиды азота	3,7	6,9
Твердые вещества	52,0	55,5
Оксид углерода	18,1	19,7
<i>Примечание – составлено на основе данных Комитета статистики РК</i>		

Наблюдения за состоянием атмосферного воздуха на территории города Рудный проводятся на 2 автоматических станциях.

В целом по городу определяется 6 показателей: 1) взвешенные частицы (пыль); 2) диоксид серы; 3) оксид углерода; 4) диоксид азота; 5) оксид азота; 6) сероводород.

Мониторинг состояния атмосферного воздуха в городе проводится специальными подразделениями РГП «Казгидромет» по проведению экологического мониторинга за состоянием окружающей среды на наблюдательной сети национальной гидрометеорологической службы. Наблюдения ведутся на двух стационарных постах (таблица 2).

Таблица 2

Расположение постов наблюдений по городу Рудный

№ поста	Отбор проб	Адрес поста	Определяемые примеси
1	В непрерывном режиме - каждые 20 минут	ул. Молодой Гвардии, 4-ый переулок	взвешенные частицы РМ-10, диоксид серы, оксид углерода, диоксид и оксид азота, сероводород, мощность эквивалентной дозы гамма-излучения
2		р-н Мечети	взвешенные частицы РМ-10, диоксид серы, оксид углерода, диоксид и оксид азота, мощность эквивалентной дозы гамма-излучения
<i>Примечание – составлено на основе данных Казгидромета</i>			

Результаты мониторинга качества атмосферного воздуха г. Рудный за 2021 год по данным стационарной сети наблюдений: уровень загрязнения атмосферного воздуха оценивался низкий (ИЗА=2), определялся значениями СИ равным 4 (повышенный уровень) и НП = 4% (повышенный уровень) по диоксиду азота в районе поста ПНЗ №6 (рядом с мечетью).

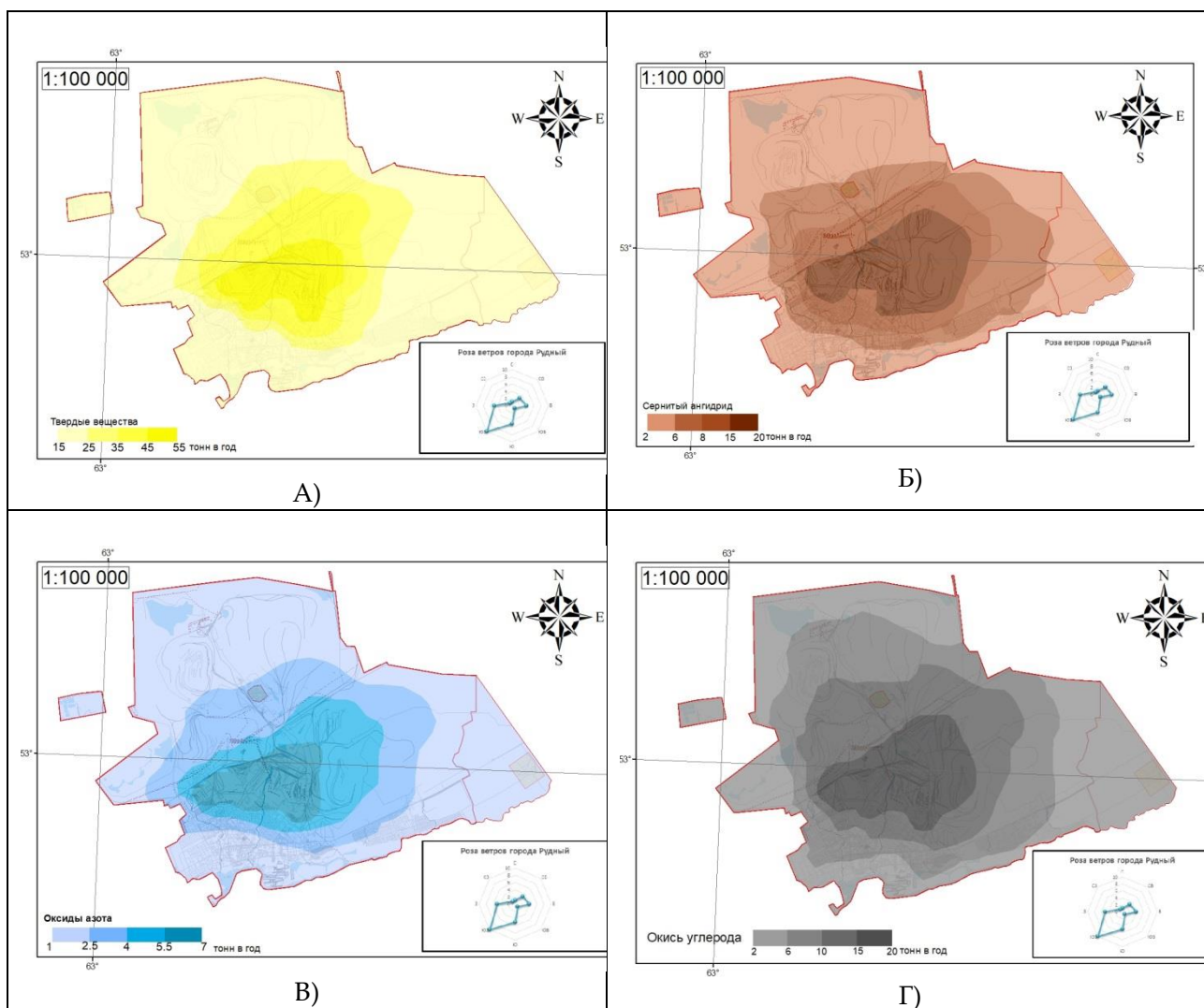


Рисунок 3. Карта распространения выбросов основных загрязняющих веществ в атмосферный воздух города Рудный за 2021 год

А – распространение твердых веществ, Б – распространение сернистого ангидрида, В – распространение оксида азота, Г – распространение окиси углерода по периметру территории

Примечание – составлено автором на основе системы ArcGis 10.1

Согласно РД если ИЗА, СИ и НП попадают в разные градации, то степень загрязнения атмосферы оценивается по ИЗА=9.

Среднемесячные концентрации диоксида азота – 1,57 ПДКс.с., концентрации остальных загрязняющих веществ не превышали ПДК.

Максимально-разовые концентрации диоксида серы – 4,00 ПДКм.р, оксида углерода – 1,30 ПДКм.р, диоксида азота – 4,20 ПДКм.р, оксида азота – 1,73 ПДКм.р, концентрации остальных загрязняющих веществ не превышали ПДК. (таблица 3).

Случаи высокого загрязнения (ВЗ) и экстремально высокого загрязнения (ЭВЗ) атмосферного воздуха не обнаружены.

Таблица 3

Характеристика загрязнения атмосферного воздуха

Примесь	Средняя концентрация (Q _{мес}).		Максимальная разовая концентрация (Q _м)		НП	Число случаев превышения ПДК _{м.р.}		
	мг/м ³	Кратность превышения ПДК _{с.с}	мг/м ³	Кратность превышения ПДК _{м.р}		> ПДК	>5 ПДК	>10 ПДК
г. Рудный								
Взвешенные частицы РМ-10	0,00	0,0	0,0	0,0	0,000	0	0	0
Диоксид серы	0,025	0,491	2,000	4,000	1,912	994	0	0
Оксид углерода	0,1	0,0	6	1,3	0,019	10	0	0
Диоксид азота	0,06	1,57	0,84	4,20	2,579	1341	0	0
Сероводород	0,00		0,00	0,00	0,000	0	0	0
Оксид азота	0,013	0,22	0,69	1,73	0,063	33	0	0
<i>Примечание – составлено на основе ежегодного бюллетеня Казгидромета</i>								

За последние годы (2017-2021гг.) уровень загрязнения атмосферного воздуха изменялся следующим образом (рисунок 4):

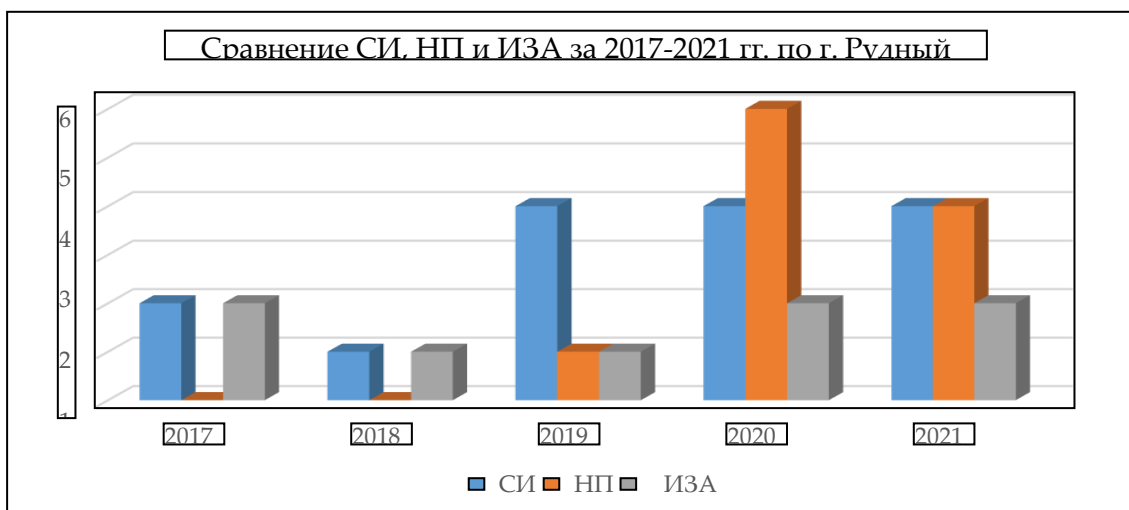


Рисунок 4. Схема показателей загрязнения атмосферы города Рудный

Примечание – составлено на основе данных Казгидромета

Как видно из графика, уровень загрязнения за 2017-2021 гг. оценивался как низкий. Превышения нормативов среднесуточных концентраций наблюдались по диоксиду азота, диоксиду серы. Данное загрязнение характерно для межсезонья, сопровождающегося влиянием выбросов от теплоэнергетических предприятий и отопления частного сектора.

Многолетнее увеличение показателя «наибольшая повторяемость» отмечено в основном за счет диоксида азота и диоксида серы, что свидетельствует о значительном вкладе в загрязнение воздуха как автотранспорта на загруженных перекрестках города, так и отопительного сезона [13].

Выводы

Одной из важнейших геоэкологических проблем является загрязнение воздушного бассейна г. Рудный. Проблема загрязнения воздуха г. Рудный встала особенно остро в последние два года (за 2019-2021 годы наблюдается увеличение объемов выбросов), когда периодически регистрировалась высокая степень загрязнения атмосферного воздуха сероводородом.

ГИС позволяет реализовать традиционные модели переноса, выпадения загрязнений в пространстве и времени. Во-вторых, ГИС содержит богатый инструментарий для отображения и хранения результатов моделирования в виде тематических интерактивных карт. Кроме того, ГИС имеет встроенные функции географического анализа данных и связей между ними (анализ близости, наложения, расчет площадей, длин, периметров и т.д.). Данные возможности позволяют создавать более реалистичные и гибкие модели рассеяния примесей во времени и пространстве.

Список литературы

1. Хадарцев А.А., Хрупачев А.Г., Ганюков С.П. Трансформация техногенных загрязнителей в атмосферном воздухе // Успехи современного естествознания. – 2010. – № 12. – С. 158-164.
2. Безуглая Э.Ю., Смирнова И.В. Воздух городов и его изменения. – Санкт-Петербург: Астерон, 2008. – 253 с.
3. Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере: справ. пособие. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1983. – 328 с.
4. Безуглая Э.Ю. Метеорологический потенциал и климатические особенности загрязнения воздуха городов. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1980. – 184 с.
5. Макаров В.З. Ландшафтно-экологическая модель территории крупного города // Геологические науки: Избр. тр. межвед. науч. конф. – Саратов, 1999. – 100-103 с.
6. Информационный бюллетень о состоянии окружающей среды Костанайской области за 2019 г. – Костанай: «Филиал РГП Казгидромет» по Костанайской области, 2019. – 37 с.
7. Информационный бюллетень о состоянии окружающей среды Костанайской области за 2020 г. – Костанай: «Филиал РГП Казгидромет» по Костанайской области, 2020. – 57 с.
8. Информационный бюллетень о состоянии окружающей среды Костанайской области за 2021 г. – Костанай: «Филиал РГП Казгидромет» по Костанайской области, 2021. – 45 с.
9. Сайт Центра гидрометеорологического мониторинга г. Алматы. [Электронный ресурс] – URL: www.almatymeteo.kz (дата обращения: 15.01.2022).
10. Касимов Н.С. Экология города / Коллектив авторов под ред. Н.С. Касимова. – Москва: Научный мир, 2004. – 624 с.
11. Костанайская область. Энциклопедия. – Алматы: Издательство «Арыс», 2006. – 736 с.
12. Черныш П.М. Очерки истории Кустанайской области. – Кустанай, 1995. – 276 стр.
13. Тарасова Н.П., Ермоленко Б.В., Зайцев В.А., Макаров С.В. Оценка воздействия промышленных предприятий на окружающую среду: учебное пособие. – Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 230 с.

А. Тюржанова, А. Нурмагамбетова, Ж.Г. Берденов

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Рудный қаласының атмосферасына шығарылатын заттарды модельдеу

Аңдатпа. Ғылыми жұмыс атмосфералық үрдістерді математикалық модельдеудің заманауи әдістері негізделген, ол әдістер статистикалық деректер негізінде жеке (бақылау) нүктелердегі ластаушы заттар шығарындыларының көлеміне септеуге және ластаушы заттардың концентрацияларының таралуыны жоқ шауланған карталарын құруға мүмкіндік береді. Бұл ғылыми мақалада В.А.Петрухин және В.А. Вишенский әдістері бойынша, Рудный қаласының атмосфералы қауасының ластану деңгейі картографияланған, бұл дегеніміз араласқан қабаттағы ластаушы заттардың концентрациясының орташа мәндерін есептеуге мүмкіндік береді. Атмосфераның ластануына үлесін тигізетін табиғи факторлар қарастырылды. Атмосфераны ластайтын негізгі көздер анықталды, стационарлық посттардың мәліметтері бойынша шығарындылардың көлемдері келтірілді. Жұмыста 4 көрсеткіш бойынша ластаушы заттардың модельдері құрастырылды.

Түйін сөздер: модельдеу, атмосфера, шығарындылар, ластаушызаттар, стационарлық көздер.

A. Turyuzhanova, A. Nurmagambetova, Zh.G. Berdenov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

Modeling of emissions of pollutants into the atmosphere of the city of Rudny

Abstract. The scientific article is based on modern methods of mathematical modeling of atmospheric processes, which allow calculating, based on statistical data, the volume of pollutant emissions at individual (control) points, and building isoline maps of the distribution of pollutant concentrations. In this scientific article, the mapping of the level of air pollution in the city of Rudny was carried out taking into account emissions from the territory of industrial enterprises according to the method of V.A. Petrukhin and V.A. Vishensky, which makes it possible to calculate the average values of pollutant concentrations over the mixing layer. The article considers contribution of natural factors to atmospheric pollution. The authors identified main sources of air pollution and the volumes of emissions according to the data of stationary posts. The authors compiled models of dispersion of pollutants according to 4 indicators.

Keywords: modeling, atmosphere, emissions, pollutants, stationary sources.

References

1. Hadarcev A.A., Hrupachev A.G., Ganyukov S.P. Transformaciya tekhnogennyh zagryaznitelej v atmosfernom vozduhe, Uspekhi sovremennogo estestvoznaniya [Transformation of technogenic pollutants in the atmospheric air, Successes of modern natural science], 12, 158-164 (2010).
2. Bezuglaya E.YU., Smirnova I.V. Vozduh gorodov i ego izmeneniya [The air of cities and its changes] (Sankt-Peterburg, Asteron, 2008, 253 s.) [St. Petersburg, Asteron, 2008, 253 p.]. [in Russian]
3. Klimaticheskie harakteristiki uslovij rasprostraneniya primesej v atmosfere: sprav. posobie [Climatic characteristics of the conditions for the spread of impurities in the atmosphere: Ref. allowance] (Leningrad, Gidrometeoizdat, 1983, 328 s.) [Leningrad, Gidrometeoizdat, 1983, 328 p.]. [in Russian]
4. Bezuglaya E.YU. Meteorologicheskij potencial i klimaticheskie osobennosti zagryazneniya vozduha gorodov [Meteorological potential and climatic features of urban air pollution] (Leningrad, Gidrometeoizdat, 1980, 184 s.) [Leningrad, Gidrometeoizdat, 1980, 184 p.]. [in Russian]

5. Makarov V.Z. Landshaftno-ekologicheskaya model' territorii krupnogo goroda, Geologicheskie nauki: Izbr. tr. mezhved. nauch. konf., Saratov: Novyi proekt [Landscape-ecological model of the territory of a large city. Geological Sciences: Selected Proceedings of the International Scientific Conference, Saratov: New Project], 100-103 (1999).
6. Informacionnyj bjulleten' o sostojanii okruzhajushhej sredy Kostanajskoj oblasti za 2019 g [Information bulletin on the state of the environment of the Kostanay region for 2019] (Kostanaj, «Filial RGP Kazgidromet» po Kostanajskoj oblasti, 2019, 37 s.) [Kostanay, Branch of RSE Kazhydromet in Kostanay region, 2019, 37 p.]. [in Russian].
7. Informacionnyj bjulleten' o sostojanii okruzhajushhej sredy Kostanajskoj oblasti za 2019 g [Information bulletin on the state of the environment of the Kostanay region for 2020] (Kostanaj, «Filial RGP Kazgidromet» po Kostanajskoj oblasti, 2020, 57 s.) [Kostanay, Branch of RSE Kazhydromet in Kostanay region, 2020, 57 p.]. [in Russian]
8. Informacionnyj bjulleten' o sostojanii okruzhajushhej sredy Kostanajskoj oblasti za 2021 g [Information bulletin on the state of the environment of the Kostanay region for 2021] (Kostanaj, «Filial RGP Kazgidromet» po Kostanajskoj oblasti, 2021, 45 s. [Kostanay, Branch of RSE Kazhydromet in Kostanay region, 2019, 45 p.]. [in Russian].
9. Sajt Centra gidrometeorologicheskogo monitoringa g. Almaty [Website of the Center for Hydrometeorological Monitoring of Almaty]. [Electronic resource] – Available at: www.almatymeteo.kz. (Accessed: 15.01.2022). [in Russian]
10. Kasimov N.S. Ekologiya gorod [Ecology of the city] (Moskva: Nauchnyj mir, 2004, 624 s.) [Moscow, Nauchnyj mir, 2004, 624 p.]. [in Russian]
11. Kostanajskaya oblast'. Enciklopediya [Kostanay region. Encyclopedia]. (Almaty, Arys, 2006, 736 s.) [Almaty, Arys, 2006, 736 p.]. [in Russian]
12. CHernysh P.M. Oчерki istorii Kustanajskoj oblasti [Essays on the history of the Kustanai region]. (Kostanaj, 1995, 276 s.) [Kostanay, 1995, 276 p.]. [in Russian]
13. N.P. Tarasova, B.V. Ermolenko, V.A. Zaitsev, S.V. Makarov. Ocenka vozdeystviya promyshlennyh predpriyatij na okruzhayushchuyu sredu: uchebnoe posobie [Assessment of the impact of industrial enterprises on the environment]. (Moskva: BINOM. Laboratoriya znanij, 2012, 230 s.) [Moscow: BINOM. Knowledge Lab, 2012, 230 p.]. [in Russian]

Сведения об авторах:

Тюржанова А.Т. – студентка 4 курса по образовательной программе «5В060900 География» Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Нурмагамбетова А.М. – магистрант 2 курса образовательной программы «7М05213 География» Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Берденов Ж.Г. – PhD, Ассоциированный профессор Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан.

Тюржанова А.Т. – The 4th year student in Geography, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Nurmagambetova A.M. – The 2nd year master's degree student in Geography, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Berdenov Zh.G. – Ph.D., Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

The global role, content, significance, and perspectives of world geography in educational science

Abstract. *The study discusses the significance and function of regional geography courses taught in the Faculty of Arts and Sciences Geography Departments in Turkey along with the pedagogical and scientific role of the course. The study sought answers to the following questions: What should be taken into consideration and what subtitles should be included to carry out a country's geographical analysis and prepare its geographical ID? What should regional geography teachers take into consideration in terms of collecting resources, performing country analyses, and planning training and education? What main titles and subtitles should the complex working method of regional geography include? Which learning domains should be prioritized in 21st-century regional geography courses? What is the national and global significance of regional geography courses for the students? What are the main tasks of regional geography teachers in the globalized world?*

Keywords: *Regional Geography, University Students, Geography Teachers, Turkey, Globalization.*

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-62-71>

Introduction

The main subject of regional geography is investigation of the complex relationships between nature, population, and economy in a space with defined boundaries.

Regional geographers should take broad advantage of the various branches of geography, such as geomorphology, climatology, hydrogeography, biogeography, economic geography, population and settlement geography, and political and cultural geography, and be able to reasonably interpret the relationships between these sub-branches.

Regional geography experts or teachers who teach these courses should be in close relation with different science branches such as botany, zoology, economics, demography, history, ecology, statistics, anthropology, geology, and geo-politics and be able to present more reliable country analyses and deeper scientific and pedagogical syntheses by benefiting from these sciences [1].

One of the priority functions of regional geography is to address and explore the similarities and common features as well as contrasts and differences. In other words, regional geography should not confine itself to examining the physical, human, and economic characteristics of different countries but should present their achievements, positive aspects, and differences while examining their failures, negative aspects, and problems with the same rigor, i.e., regional geography should include economic, ethnic, ecological, social, cultural, demographic, and geopolitical problems as well. So that, regional geography should give wider coverage to "Critical Geography" and "Geographical Issues" [2].

Regional geography should present a broader vision to the itinerant, researching, curious, and informed individuals of the 21st century and a sounder and more scientific outlook on the world's political, social, economic, and cultural realities and regional and global problems. Regional geography should provide individuals with opportunities to get to know the cities, regions, and nations that we have not yet visited, seen, or learned about. It should make different spaces and countries more familiar.

Intensified relations between countries in the areas of technology, tourism, trade, science, education, and politics in the globalized world make information sharing among countries inevitable as well [3]. Hence, research, books, and scientific studies on regional geography have significantly increased in all civilized countries. Regional geography courses are taught in high schools and universities as compulsory subjects [4].

According to Baranski, regional geography is the complementary and integrative branch of physical, human, and economic geography. Regional geography was born from the intersection of physical, human, and economic geography branches on an area whose borders have been defined and from the interrelations among these geography branches. According to Baranski, regional geography should not regard itself as a separate science but strive to generate a sounder country profile by collecting and assessing the diverse information from different branches of geography and by often asking and answering “why, where, when, how, and what” questions about all geographical features of these countries [5].

Atalay’s view on the significance and function of regional geography reflects a similar outlook: “It is possible to know the position and significance of a country in the world, to cooperate with it for the future, to prepare plans in the social, political, and strategic fields and to develop various strategies via knowledge on other countries. Therefore, educators, bureaucrats, and intellectuals must have deep and detailed knowledge of regional geography. Especially politicians and educators should test the pulse of their countries on one hand and test the pulse of other countries on the other to achieve their tasks thoroughly and adequately.”

Human beings and society are placed at the center of regional geography. It is the synthesis of geographical sciences. Hence, nature, economy, culture, politics, and space relationships are also included at the center of regional geography. Also, there is an increasing need for regional geography in solving the social, cultural, political, demographic, and economic problems of the planet day by day. When regional geography presents the geographical characteristics of a country through various symbols, visual materials and numerical data, such as graphs, drawings, maps and charts, and analyzes the industrial, agricultural and tourist potential of countries, as well as natural resources, commercial and demographic structures, it must address questions relating to the field from geographical areas such as social geography, cultural geography, political geography, ethnic and religious structures, military and economic organizations and demographic, economic and political problems. Then it is possible to picture the geographical portrait of countries [6].

Y. G. Masbits, a pioneering Russian expert in regional geography emphasizes the different roles and functions of regional geography and combines these under six headings:

1. Function of informing or informatics
2. Function of description or representation
3. Function of education
4. Function of culture or enlightenment
5. Scientific function or research
6. Function of implementation

However, it is crucial not to discuss these functions based on reasoning about which one is more important. Masbits reports that these headings should not compete against one another, and that regional geography should undertake all these roles and functions together. According to the author, regional geography has three different research and exploration aspects:

- a) Physical aspect
- b) human-financial aspect and
- c) complex aspect (multi-dimensional).

But it is stated that they benefit as a whole, not individually [7].

The scheme prepared in the 1930s by N.N. Baransky in regional geography studies is still relevant and widely used. According to this scheme, research should be conducted under six headings while undertaking geographical analysis for a continent, region or country [4]:

1. Geographical location (mathematics, special or geo-political location). The position and significance of the country in the world. The historical evolution of the country and its significant historical steps
2. Physical geography characteristics (climate, geographical formations, hidrography, soil types, flora, and fauna, etc.). Potential and production of the natural resources (surface and underground resources).
3. Historical geography characteristics and the past and present of the human-financial system.
4. Human geography (distribution and structure of population, demographic characteristics, settlement geography).
5. Economic geography (agriculture, industry, trade, tourism, transportation etc.)
6. Regional geography and characteristics of important cities.

In this working draft with six categories, Baransky specifically emphasized regional differentiation of continents or countries and the physical, economic, and human characteristics of different regions. He underlined the parts rather than the whole and focused on the differences rather than the general and similar aspects. He specifically mentioned that regional geography should have at least a 70% share in a country's working text [8].

In the following years, geographers such as V.P. Maksakovski, I.M. Maergoyz, N.M. Panter, Y.G. Masbits and M.D. Sarigin presented different studies and suggestions in this area. Among these, there is the remarkable work of Y. G. Masbits's 1995, "Complex Working Method in Regional Geography". Masbits suggests an outline composed of 11 main headings for studying a country. These 11 main headings are summarized below along with subtitles [5]:

1. Factors or characteristics that enable a country to be "distinctive" or "privileged"

- ✓ Formation of country identification card
- ✓ Position and significance of the country among others in terms of human, economic, and politic characteristics
- ✓ Geographical location, neighbors, and distinctness in terms of political and administrative structure
- ✓ Distinctness in terms of human, physical and economic characteristics
- ✓ Distinctness in terms of social, cultural, religious and settlement characteristics
- ✓ In short, "privileges" and characteristics that are unique to this country

1. Geographical Position.

- ✓ Area of the country and its population potential
- ✓ Geographical location of the country (advantages and disadvantages)
- ✓ Neighbors, land borders, and coastal characteristics of the country
- ✓ Relationship of the country with economic, military, and political organizations
- ✓ Geo-political position of the country and relevant results

2. Historical and political past of the country.

- ✓ (Masbits defines the historical and political past of the countries as the "Genetic Code of the Countries".)
- ✓ Stages in the formation of nations and governments based on time and space
- ✓ The main historical-political achievements and failures of the country, the position, and significance of the country in the world history

✓ Man-nature interactions undertaken in the country soil in the historical process and their results

3. Natural environment, natural resources, and use of natural environment

✓ Physical structure of the country (vertical and horizontal distribution) and its characteristics
 ✓ Natural characteristics such as climate, land formations, flora, fauna, and water resources
 ✓ Natural regions (highland, bottom land or wasteland, river basins, low or high areas, arid or moist areas etc.)

- ✓ Potential and production of natural resources
- ✓ Forestry, fishery, apiculture, animal husbandry, and vegetal production
- ✓ Energy-mining reserves and their production
- ✓ Impact of humans on the natural environment and its ecological results
- ✓ Use of land and soil.

4. Population geography.

- ✓ Qualitative and quantitative characteristics of the population
- ✓ Population density types and their characteristics
- ✓ Population increase, its causes, and results
- ✓ Demographic, health, and education characteristics of the population
- ✓ Ethnic, religious and socio-cultural characteristics of population
- ✓ Population projections
- ✓ Population problems

5. Settlement geography

- ✓ The evolution of settlement in the land of the country
- ✓ Rural and urban distribution of country population
- ✓ Main characteristics of urban and rural settlements
- ✓ Urbanization process in the country and its characteristics
- ✓ Main characteristics of metropolises
- ✓ Internal and external immigration, cause and results
- ✓ Settlement problems

6. Economic geography

✓ General economic structure of the country and its economic potential
 ✓ Technological and scientific potential of the country
 ✓ Regional and local characteristics of the country's economy
 ✓ Production, employment, and sectoral characteristics of country economy
 ✓ Analysis of main economic branches such as agriculture, transportation, tourism, and commerce

- ✓ Economic and commercial relations with other countries

7. Social geography.

- ✓ Social, the educational, and cultural structure of the country
- ✓ Societal and political characteristics of the country
- ✓ Folk culture and popular culture
- ✓ Ethnic, linguistic, and religious problems of the country

8. Regional geography.

- ✓ Main geographical characteristics of the country along with its physical and economic regions
- ✓ Ethnic, the linguistic and cultural structure of the regions
- ✓ Economic potential of the regions and their standards of life
- ✓ Regional differences, similarities, and contrasts

9. Environmental protection and ecological problems

- ✓ Environmental problems related to the industry, transportation, and tourism

- ✓ Environmental problems related to population, nutrition, and urbanization
- ✓ Environmental problems related to activities in the areas of agriculture and energy
- ✓ Regional ecological problems, their causes, and results

10. Country perspective and projections for the future

- ✓ Economic projections for the country
- ✓ Political projections for the country
- ✓ Population and settlement projections for the country
- ✓ Regional and local projections for the country

Masbits attributes the methodical approach that can be used in regional geography to the five main principles of geography (space/region, complexity, clearness/demonstrativeness, multidimensionality, interactivity, and dependence) [9]:

According to Masbits, the five principles cited above are valid for all world geography studies in all realms such as scientific, informatics, educational, cultural, descriptive, etc. there are not very different methods in today's regional geography studies as well. the methods that are valid for all geographical sciences such as the presentation and description method, historical development method, comparative analysis method, cartography method, and statistical and economic methods are also equally valid for regional geography. However, using all these methods in conjunction with each other while trying to develop a sound portrait of a country may be the soundest method of them all [5].

Which Learning Domains Should be Incorporated in 21st Century Regional Geography Courses Geared towards University Students?

Educators, scientists, and especially geography teachers face a daunting task in presenting, endearing, and popularizing different cultures, societies, civilizations, different continents, cities and countries, different nations, and minorities to young generations. Studying, comprehending, protecting, and embracing the world requires internalizing and embracing different cultures, different nations, different continents, and countries. We cannot love and adopt a world that we do not know, and we cannot sufficiently protect and embrace a world that we do not love. One of the indispensable tasks of regional geography is to present similar and common aspects among countries and nations and smooth out biases and intolerance and to bring nations and states closer. The part below discusses what university students should be taught in regional geography courses in today's complex world.

Teaching awareness of world-homeland

Today, when there are 7 continents, more than 230 countries, some 5,000 ethnic communities, some 6,000 languages, and a huge number of religious beliefs, reflecting the wide divisions, great diversity, and richness in the world, the concept of a common homeland where all civilizations and humanity join together is either ignored or cannot be perceived rationally.

Today's educational system brings differences and superiorities to the forefront rather than underlining the similarities and common characteristics of humanity and prefers to emphasize the strong and privileged aspects of each nation and country.

While separatist movements and schisms increase in this century in which religious exploitation, ethnic conflicts, and competition among civilizations have increased, societies also integrate, cultures get increasingly closer, the world becomes smaller and dependencies among countries increase. In other words, while the concept of globalization familiarizes and integrates societies and countries, it also increases conflicts, divides, and separatist movements. While our planet becomes unites, it is divided and fragmented on the other (Morin, 2003). The 21st century is about transformation into a century in

which anthropological and homogeneous awareness is eroded and ecological awareness and world citizenship consciousness are underrated or ignored. However, the melting pot that unites the black and white, the Japanese and the English, the westerner and the southerner, the villager and the urban, the Christian and the Muslim, the poor and the rich, and the Pygmy and the Aborigine is the melting pot of the world where we exist altogether.

The melting pot of the world is the pot where concepts such as the common planet, common destiny, and common humanity reach significance and make sense. This pot is the pot of a “world-homeland” pot where ethnic and religious discrimination is destroyed, and there are eroded racial and cultural differences. This pot is the pot of common joys and sorrows, achievements, and failures, hopes and expectations, and the past and the future. It is the pot in which the passengers of the same ship wait for the next stop. Regional geography courses should be areas where awareness for a common planet is transfused, they should present the reasons why we should lay claim to our world with sound rationales. Moreover, these courses should transfer students a sense of ethnic awareness, religious awareness, nationalistic awareness, and consciousness of citizenship while they also transfuse world-homeland consciousness.

How can we be purified, become clean, renew ourselves and change our consumption, production, and lifestyles before it is too late? We need to equip today’s children of the world with new morals, awareness, and with new attitudes and behaviors. We need to develop their world-homeland consciousness, their awareness of belonging to the Blue Planet, and their consciousness of world citizenship. With the help of regional geography, we should teach these children to listen to the world homeland instead of dominating it, to feel it instead of conquering it, and to love it instead of exploiting it. Because there is no other homeland in this infinite universe than the blue planet. Because all races, all nations, and all religions have the same identity under the same roof. They have an identity of an earthling. Because we are all passengers of the same ship, we share a common destiny, we share a common fate, and we share the same hopes and expectations. The happiness of our homeland is our joy. Its future is our future. The fate of the planet is looped in the fate of humanity. Therefore, regional geography courses should teach our children how to be earthlings. It should teach them how to adopt and embrace our planet and teach them how to live as brothers and sisters, how to embrace each other, how to share, and how to be tolerant [10].

Today, all nations, all religions, civilizations, and countries share the same ecological destiny, the same global threat, and the same fear of death. Therefore, the consciousness of humanity should be combined with the earthly consciousness of sharing a common fate. Because all human beings are citizens of the same planet, they are dependent on the same world. Therefore, we should stake a claim to the biosphere that we depend on, the planet that we are contingent upon, and we should ameliorate and protect them, or we will be destroyed in our shared destiny with our selfishness and insensitivity. Comprehending world citizenship requires internalization of our shared destiny and consciousness of belonging to the same planet [8].

Main responsibilities of regional geography teachers in the globalized world

While regional geography teachers analyze the causes and results of global and regional problems, they should have students grasp that events and problems can be approached by using various outlooks, different thoughts, and viewpoints. They should also train students to become individuals who can learn and make deductions from these problems, compare different regions and countries, objectively examine the advantages and disadvantages of these countries, make sound connections between the problems of the country and global problems, and freely create individual worlds in their own heads. Before anything else, teachers should not transfer concepts to students such as the superiority of countries or nations, show of strength, competition, ethnic spite, and religious

hatred; on the contrary, they should give students positive, universal, and peaceful messages to students by emphasizing similarities, beauties, commonly shared items, and tolerance. In these courses, students should be able to observe together and balance the beautiful and the ugly, the positive and the negative, the advantages, and the disadvantages.

Regional geography courses should not be unpleasant and monotone courses that only teach about the mountains, rivers, the largest lakes and cities, and the mines of countries; that have students memorize country capitals and confuse students' already confused minds by filling them with encyclopaedic, empty, and boring information. Modern regional geography teaching should be a learning domain that builds peace and Brotherhood Bridge among different nations, different religions, different countries, and cultures and it should emphasize democracy, human rights, and positive universal values. Also, regional geography teachers should teach their students how and where to use numerous digital data, maps, figures, and diagrams on continents and countries by utilizing the most recent scientific and technological innovations. What's more; they should have their students love, comprehend, and make sense of the field of geography by synthesizing and deeply filtering the geographical events and by looking for answers to "when, where how much, and how" in the framework of cause and result and have their students stay away from stereotyped information and rote learning in the field of geography.

Embracing the unity of the planet and of humanity

"Geography is a science that presents the characteristics of the spaces on earth and examines and explains these characteristics, the reasons for similarities and contrasts among different spaces and the rules that govern them" [5]. Geography explores the complex relationships between the social and natural environment, and it is a science of synthesis whose most prioritized research field is the interaction between society and the geographical environment by placing man and space in the focus of its exploration. Hence, geography is the science of space before anything else. Space is constant, limited, and variable. Anatolian peninsula, Japanese state, Cyprus Island, and the African continent are constant, but limited and variable spaces. While the limits of the spaces are determined by different physical factors such as seas, oceans, valleys, mountains, and rivers and by political factors such as state borders, internal changes in spaces are determined by internal forces, external forces, and human activities [10].

Results

While teaching students the natural, human, and economic characteristics of different spaces during regional geography courses and having students learn about authentic aspects and superior sides of different countries, it should be remembered to teach them the factors that bring these countries together and unite these people and the factors that integrate the nations included in different political and economic organizations. Regional geography courses should not ignore the fact that the common space for us all. Teachers, first, should train students to be individuals who can approach regional and global problems from peaceful windows, who can approach different races, religions, and cultures with tolerance, and who can volunteer to remove biases and enmities among countries. Hence, regional geography should move away from being the field of occupation that marginalizes and excludes people and states and must be turned into a teaching field in which messages of love, peace, amity, empathy, cooperation, and tolerance are given.

Having students comprehend human ethics and develop homogenous awareness lies at the center of future regional geography education. The homogenous awareness that should be developed in students should be built on the belief foundation that all races, all religions, all cultures, and all peoples belong to the same human race and that all people are relatives. Until now, our lineages, skin colors, beliefs, the languages we speak, country borders, political beliefs, and our kindreds have separated us

form one another, they have even estranged us. The quadruple unity of “individual-race-nation-state” has caused nations and countries to view one another with suspicion and distrust and resulted in conflicts and wars, genocides and immigrations, tears, and tragedies. Therefore, future geography teaching should work to humanize humanity and it should strive to develop world citizenship ethics, ethics for understanding, tolerance, and empathy. This is only possible through comprehending our earthling identity and embracing and adopting the unity of the planet and the unity of humanity. The regional geography teaching of the future should surpass national, ethnic, and religious awareness, sow the seeds of homogenous awareness and develop ecological awareness and world-homeland awareness and advance world citizenship consciousness which shows that we belong to the same humanity.

References

1. Miwa A. Takeuchi, Pratim Sengupta, Marie-Claire Shanahan, Jennifer D. Adams, Maryam Hachem. Transdisciplinarity in STEM education: a critical review // *Studies in Science Education*. – 2021. – Vol. 56. – Issue 2. – P. 213-253. DOI: <https://doi.org/10.1080/03057267.2020.1755802>.
2. Atalay İ. *Continents and World Regional Geography*. – İzmir: Meta, 2007. – 245 p.
3. Bilgili A.S. *Fundamentals of Social Studies*. – Ankara: Pegem, 2008. – 142 p.
4. Güner İ. *Introduction of the Geography of Continents*. Erzurum: Atatürk University Publication. – 2005. – №791. – P. 75-81. [in Turkish].
5. Becca C. Merrill. Configuring a Construct Definition of Teacher Working Conditions in the United States: A Systematic Narrative Review of Researcher Concepts // *Review of Educational Research*. – 2021. – Vol. 91. – Is.2. DOI: <https://doi.org/10.3102/0034654320985611>.
6. Atasoy E. Education for Environment and Environment consciousness, Kaygı. // *Uludağ University Faculty of Arts and Sciences Journal of Philosophy*. – 2005. – Vol. 5. – P. 124-129. [in Turkish].
7. Lipson L. *Moral Crisis of Civilization. Spiritual Melting or Progress?* // *Cultural Publications of Turkey Isbank*. – İstanbul, 2010. – 425-450 p.
8. Güner İ., Ertürk M. *Continents and World Regional Geography*. – Ankara: Nobel publications, 2015. – 236 p.
9. Abril C.R., Bannerman J. K. Perceived factors impacting school music programs: The teacher’s perspective // *Journal of Research in Music Education*. – 2015. – 62(4). – P. 344-361. DOI: <https://doi.org/10.1177/0022429414554430>.
10. Runova T.G. *Economic Geography with Fundamentals of Regionalistics* // *Journal of Moscow State University, Geographic series*. – 2010. - №5. – P. 75-78.

Алааттин Кизилкаоглу¹, Ерол Каплухан²

¹*Балыкесир университеті, Балыкесир, Түркия*

²*Мехмет Акиф Эрсой атындағы Бурдур университеті, Бурдур, Түркия*

Елтану пәні педагогика ғылымындағы жаһандық рөлі, мазмұны, мәні және болашағы

Аңдатпа. Бұл ғылыми жұмыста Түркиядағы география және педагогика ғылымдары факультеттерінде оқытылатын елтану курстарының негіздемесі, мәні мен қызметтері сипатталып, осы курстың педагогикалық және ғылыми рөлі ашылған. Зерттеу барысында келесі сұрақтарға жауаптар алынды: елдерге географиялық талдау жүргізу және олардың географиялық сипаттамаларын дайындау үшін нені ескеру керек және қандай тақырыпшаларды қамту керек? Елтану пәнінің мұғалімдері елдер туралы ақпарат жинауда, оқыту мен білім беруді жоспарлауда нені ескеруі керек? Елтанудың кіріктірілген әдісі қандай негізгі тақырыптар мен тақырыпшаларды қамтуы керек? XXI ғасырдағы елтану курстарында қандай ғылыми және білім

беру салаларына басымдық берілуі керек? Оқушыларға арналған елтану курсының ұлттық және әлемдік маңызы қандай? Елтану мұғалімдерінің әлемдік ауқымдағы негізгі міндеттері қандай?

Түйін сөздер: Түркия, елтану, аймақтық география, университет студенттері, мұғалімдері.

Алааттин Кизилкаоглу¹, Ерол Каплухан²

¹Университет Балыкесир, Балыкесир, Турция

²Бурдурский университет им. Мехмет Акиф Эрсой, Бурдур, Турция

Глобальная роль, содержание, значение и перспективы географии стран мира в педагогической науке

Аннотация. В данной научной работе описаны рассуждения, значение и функции курсов страноведения, преподаваемых на факультетах географии и педагогических наук в Турции, также раскрывается педагогическая и научная роль данных курсов. В ходе исследования были получены ответы на следующие вопросы: что следует учитывать и какие подзаголовки следует включать для проведения географического анализа стран и подготовки их географических характеристик? Что должны учитывать учителя страноведения при сборе информации о странах, при планировании обучения и образования? Какие основные темы и подзаголовки должен включать комплексный метод страноведения? Какие научные и познавательные области должны быть приоритетными в курсах страноведения 21 века? Каково национальное и мировое значение курса страноведения для школьников? Каковы основные задачи учителей страноведения в глобальном масштабе?

Ключевые слова: Турция, география стран мира, региональная география, студенты университетов, преподаватели географии, страноведение.

References

1. Miwa A. Takeuchi, Pratim Sengupta, Marie-Claire Shanahan, Jennifer D. Adams, Maryam Hachem. Transdisciplinarity in STEM education: a critical review, *Studies in Science Education*, 56(2) 213-253 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1080/03057267.2020.1755802>.
2. Atalay İ. *Continents and World Regional Geography* (İzmir, Meta, 2007, 245 p.).
3. Bilgili A.S. *Fundamentals of Social Studies* (Ankara, Pegem, 2008, 142 p.).
4. Güner İ. Introduction of the Geography of Continents. Erzurum: Atatürk University Publication, 791, 75-81 (2005). [in Turkish]
5. Becca C. Merrill. Configuring a Construct Definition of Teacher Working Conditions in the United States: A Systematic Narrative Review of Researcher Concepts // *Review of Educational Research*. 91(2), (2021). DOI: <https://doi.org/10.3102/0034654320985611>.
6. Atasoy E. Education for Environment and Environment consciousness, *Kaygı, Uludağ University Faculty of Arts and Sciences Journal of Philosophy*, 5, 124-129 (2005). [in Turkish]
7. Lipson L. Moral Crisis of Civilization. Spiritual Melting or Progress? // *Cultural Publications of Turkey Isbank* (İstanbul, 2010, 425-450 p.).
8. Güner İ., Ertürk M. *Continents and World Regional Geography* (Ankara, Nobel publications, 2015, 236 p.).
9. Abril C.R., Bannerman J. K. Perceived factors impacting school music programs: The teacher's perspective, *Journal of Research in Music Education*, 62(4), 344-361 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1177/0022429414554430>.
10. Runova T.G. Economic Geography with Fundamentals of Regionalistics, *Journal of Moscow State University, Geographic series*, 5, 75-78 (2010).

Information about authors:

Alaattin Kizilçaoğlu – Professor of Department of Social Studies Education, Faculty of Education, Balıkesir University, Balıkesir, Turkey.

Erol Kapluhan – Associate Professor of Department of Geography of Faculty of Arts and Sciences, Akif Ersoy University, Burdur, Turkey.

Алааттин Кизилкаоглу – профессор кафедры социальных наук, факультет образования, Университет Балакесир, Балакесир, Турция.

Ерол Каплухан – ассоциированный профессор кафедры географии, факультет науки о Земле, университет Мехмета Акифа Эрсоя, Бурдур, Турция.

Редакторы: **Э.Е. Копишев, Ж.Г. Берденов**

Авторларға арналған нұсқаулықтар,
жарияланым этикасы журнал сайтында енгізілген: <http://bulchmed.enu.kz>

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің
Хабаршысы. Химия. География. Экология сериясы.
- 1(138)/2022 - Нұр-Сұлтан: ЕҰУ. 72 б.
Шартты б.т. – 4,5. Таралымы 5 дана.
Басуға қол қойылды: 25.03.2022
Ашық қолданыстағы электронды нұсқа: <http://bulchmed.enu.kz>

Мазмұнына тирпография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы: 010008, Қазақстан Республикасы Нұр-Сұлтан қ.,
Сәтбаев көшесі, 2.

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Тел.: +7(71-72) 70-95-00(ішкі 31-428)

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды