

ЭКОЛОГИЯ ИЛИМДЕРИ
ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ НАУКИ
ENVIRONMENTAL SCIENCES

*Маймеков З.К., Абдыкадырова Р.Э., Самбаева Д.А.,
Исаев А.Д., Изаков Ж.Б., Маймеков Т.З.*

**ТОПУРАК-СУУ-НИТРАТ НАТРИЙ ГЕТЕРОГЕНДИК ТАТААЛ
СИСТЕМАСЫН ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫК МОДЕЛДӨӨ ЖАНА СУСПЕНЗИЯЛЫК
ЭРИТМЕДЕГИ КОМПОНЕНТТЕРДИН, БӨЛҮКЧӨЛӨРДҮН КОНЦЕНТРАЦИЯЛЫК
ТАРАЛЫШЫН ЭКОЛОГИЯЛЫК БААЛОО**

*Маймеков З.К., Абдыкадырова Р.Э., Самбаева Д.А.,
Исаев А.Д., Изаков Ж.Б., Маймеков Т.З.*

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОЙ
СЛОЖНОЙ СИСТЕМЫ: ПОЧВА-ВОДА-НИТРАТ НАТРИЯ И ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ
ОЦЕНКА КОНЦЕНТРАЦИОННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОМПОНЕНТОВ
И ЧАСТИЦ В СУСПЕНЗИОННОМ РАСТВОРЕ**

*Z.K. Maimekov, R.E. Abdykadyrova, D.A. Sambaeva,
A.D. Isaev, Zh.B. Izakov, T.Z. Maimekov*

**PHYSICOCHEMICAL MODELING OF A HETEROGENEOUS COMPLEX
SYSTEM: SOIL-WATER-SODIUM NITRATE AND AN ECOLOGICAL ASSESSMENT
OF THE CONCENTRATION DISTRIBUTION OF COMPONENTS
AND PARTICLES IN A SLURRY SOLUTION**

УДК: 631.432: 631.483: 577.41

Макалала топурак-суу-нитрат натрий гетерогендик системасы каралды. Физика-химиялык моделде топурактын химиялык курамы, органикалык заттары, газдык өлчөмдөрү, нымдуулугу, температурасы эске алынды. Топурак-суу системасына нитрат натрийдин тийгизген таасири байкалды. Үчтүк системада компоненттердин жана бөлүкчөлөрдүн концентрациялык таралышы аныкталды. Азоттун системадагы мааниси жана түрлөрү ачыкталды. Нитрат натрийдин суспензиялык эритмедеги концентрациясынын суутектик көрсөткүчкө, кычкылдануу-калыбына келүү потенциалына, эриген заттын өлчөмүнө болгон таасири графиктерде көрсөтүлдү. Эсептик формулалар алынды. Алынган натыйжалар практикалык жумуштарга пайдалуу болуп эсептелет.

Негизги сөздөр: топурак, суу, нитрат натрий, концентрация, экология, система, компонент, бөлүкчө.

В статье рассмотрена гетерогенная система: почва-вода-нитрат натрия. В физико-химической модели учтены химический состав, органическое вещество, газовое содержание, влажность и температура почвы. Выявлено влияние нитрата натрия на равновесное состояние почвы. Определено концентрационное распределение компонентов и частиц в трехкомпонентной гетерогенной сложной системе. Отмечены роль и виды азота в системе почва-вода-нитрат натрия. Установлена зависимость окислительно-

восстановительного потенциала, водородного показателя и содержание растворенных веществ в суспензионном растворе от концентрации нитрата натрия и приведены графические их данные. Получены расчетные уравнения. Результаты исследований полезны в практических условиях.

Ключевые слова: почва, вода, нитрат натрий, концентрация, экология, система, компонент, частица.

A heterogeneous system is considered: soil-water-sodium nitrate. In the physicochemical model, the chemical composition, organic matter, gas content, humidity, and soil temperature are taken into account. The influence of sodium nitrate on the equilibrium state of the soil was revealed. The concentration distribution of components and particles in a three-component heterogeneous complex system is determined. The role and types of nitrogen in the soil-water-nitrate system of sodium are noted. The dependence of the oxidation-reduction potential, the hydrogen index and the content of dissolved substances in the suspension solution on the concentration of sodium nitrate is established and graphical data are given. The calculation equations are obtained. The results of the research are useful in practical conditions.

Key words: soil, water, sodium nitrate, concentration, ecology, system, component, particle.

Известно, что азот один из самых распространенных веществ в биосфере, где поддерживается

жизнь. Основная часть атмосферного азота находится в свободной форме, образуя молекулу азота. Связывание азота – чрезвычайно важная задача, поскольку круговорот последнего включает ряд замкнутых взаимосвязанных циркуляционных процессов. Например, при разложении органических веществ в почве различные микроорганизмы извлекают азот из разлагающихся материалов и переводят его в молекулы, необходимые им для обмена веществ. При этом оставшийся азот высвобождается в виде аммиака (NH_3) или ионов аммония (NH_4^+). Затем другие микроорганизмы связывают этот азот, переводя его обычно в форму нитратов (NO_3^-). Поступая в растения азот участвует в образовании биологических молекул. После гибели организма азот возвращается в почву, и цикл начинается снова. При этом возможны как потери азота – когда он включается в состав отложений или высвобождается в процессе жизнедеятельности денитрифицирующих бактерий, так и компенсация этих потерь за счет извержения вулканов и других видов геологической активности. В нормальных условиях азот из окружающей среды попадает в биологические системы и возвращается в окружающую среду после гибели биологических систем. Таким образом, в результате естественных природных процессов и в ходе человеческой деятельности происходит связывание азота и перенос его в биосферу. Азот связывается при сжигании природного топлива, но больше всего связанного азота человек производит в виде минеральных удобрений для повышения урожайности растений. Таким образом, к естественным процессам добавилось искусственное связывание азота при производстве минеральных удобрений, т.е. человек стал оказывать существенное влияние на круговорот азота в природе [1-7].

С учетом изложенных положений выше, в настоящей работе осуществлено физико-химическое моделирование гетерогенной сложной системы [8]: почва-вода-нитрат натрия с целью экологической оценки влияния азотсодержащих минеральных удобрений, а именно нитрата натрия на концентрационное распределение компонентов и частиц в почвенно-водном растворе, т.е. суспензии. При физико-химическом моделировании гетерогенной сложной системы, состоящей из почвы, воды с включением нитрат натрия были учтены [1-7, 9-11]: средний химический состав почвы - (по Виноградову, 1959), масс.% (в молях на 1 кг почв): кислород – 55 (34,4); кремний – 33(11,8); алюминий – 7,13(2,6); железо – 3,8(0,68); кальций – 1,37(0,34); натрий – 0,63(0,27); калий – 1,36(0,35); магний – 0,63(0,26); водород – 5(50); углерод – 2(1,67); сера – 0,085(0,026); марганец – 0,085(0,015); фосфор – 0,08(0,026); хлор – 0,01(0,003); азот – 0,1(0,071); медь – 0,002(0,0003); кобальт – 0,008(0,001); бор – 0,001(0,0009); цинк – 0,005(0,0008); титан – 0,46(0,09); органическое вещество в почве (1кг) по гуминовой кислоте с моле-кулярным весом 1400, %(молях): углерод – 55,8 (46,5); водород – 4,7(47); кислород – 35,5(22,18); азот – 4(2,86);

газовый состав почвы (%) по Мамонтову В.Г., 2006 включают большой спектр различных компонентов: азот (68-73); кислород (5-21); диоксид углерод (0,1-20); водород ($1-8 \cdot 10^{-6}$); оксид углерод ($1-8 \cdot 10^{-6}$); оксид азота ($\text{NO}=1-8 \cdot 10^{-4}$); закись азота ($\text{N}_2\text{O}=4 \cdot 10^{-5}$); диоксид сера ($3 \cdot 10^{-7}$); сероводород ($2 \cdot 10^{-7}$); CH_3SH ($3 \cdot 10^{-7}$); CH_3S ($1 \cdot 10^{-6}$); метан ($1-8 \cdot 10^{-7}$); C_2-C_{20} ($1,35 \cdot 10^{-6}$). В расчетах воздушный режим почв на 1кг почвы, %(молях) учтен на основе следующих газов: кислород – 16,35(5,11); азот – 80(28,57); диоксид углерод – 0,65(0,147); суммарное количество метана, сероводорода и аммиака составляет 3%: метан – 1(0,625); сероводород – 1(0,294); аммиак – 1(0,588); **влажность** почвы (на 1 кг), %(молях): вода – 15 (8,33); **температура** почвы изменялась в пределах 285-291К(12-18°C); **вода** – 1кг (55,555моль); **нитрат натрия** – предельно-допустимая концентрация нитрата натрия в почве составляет $C_{\text{NaNO}_3} = 29,3$ мг/кг, а по ГОСТ 26951-86 (25-30мг/кг). В отдельных источниках отмечено, что предельно допустимое содержание нитратов в почве не должно превышать 130 мг/кг (спектрофотометрический метод определения нитратного азота с точностью до 0,001 мг/л), т.е. 1,53 моля нитрата натрия в 1 кг почве. Норма нитратов в воде равна 45 мг/л (0,53 моль), в некоторых европейских государствах норма может быть увеличена до 50 мг (0,588 моль) на литр. Вода для приготовления пищи и напитков не должна содержать больше 10 мг нитратов в 1 литре (0,118 моль), а в питьевой воде они содержатся в пределах 7-9 мг/л. В природных водных источниках содержание солей азотной кислоты не превышает 2 мг/л (0,032 моль).

В работе сначала осуществлено физико-химическое моделирование системы при минимизации энергии Гиббса [8]: почва-вода при 288К (15°C) при нулевом содержании нитрата натрия в суспензионном растворе (табл. 1), затем количество нитрата натрия изменялось в широких пределах от 0,0085мг/л (0,0001 моль) до 85мг/л (1 моль); давление равно 0,1МПа (1бар). На основании проведенных исследований найдены физико-химические (объем, масса, плотность, окислительно-восстановительный потенциал, водородный показатель, ионная сила, количество растворенных веществ в кг растворе, теплоемкость, теплопроводность, динамическая вязкость, массовая доля конденсированных веществ) и термодинамические параметры системы (энергия Гиббса, энтальпия, энтропия, внутренняя энергия). Адекватность значений физико-химических параметров системы подтверждена на основе сходимостью балансовых расчетов компонентов в отдельных фазах, а также сравнением экспериментальных и расчетных величин водородного показателя суспензионного раствора на основе почвы (нейтральная реакция почвы соответствует $\text{pH} = 6,1-7,4$, а при участии нитрата натрия в системе почва-вода pH изменялась от 6,98-8,88). Из таблицы видно, что при рабочих температурах системы почва-вода равной 15°C водородный показатель pH равна 7,775. Добавление нитрат натрия в

систему в количествах от 0,0001 до 0,5 моль увеличивает значения pH от 7,58 до 8,88, т.е. реакция почвы становится слабощелочной. При этом окислительно-восстановительный потенциал (Eh) равен 0,7819 при отсутствии в системе нитрата натрия, т.е. среда окислительная. При добавлении в систему нитрата натрия от 0,0001 до 0,5 моль $Eh = \{(-0,187) - (-0,261)\}В$, т.е. среда восстановительная. Количество

растворенных веществ в суспензионном растворе незначительно уменьшается при увеличении содержания нитрат натрия в системе: почва-вода при температуре 288К. Обработка полученных результатов позволили получить отдельное расчетное уравнение по определению pH, Eh, TDS в зависимости от концентрации нитрата натрия в растворе (рис.1-3).

Таблица 1

Физико-химические и термодинамические параметры гетерогенной сложной системы: почва-вода

температура, k	288,15	G, МДж	-13,13	Eh, В	0,7819
давление, мпа	0,1	H, МДж	-15,91	-	-
объем, м ³	0,001388856	S, кДж/К	3,75	pH	7,775
масса, кг	1,001	U, МДж	-15,71	ионная сила	0,0044
плотность, кг/м ³	720,635	Ср, кДж	4,18	TDS, мг/кг раствора	181,8895

Параметры фазы

название фазы	объем, м ³	количество молей	масса, кг	плотность, кг/м ³	вес %
водный раствор	1,00e-03	5,55e+01	1,00e+00	9,99e+02	99,93805
газовая фаза	3,88e-04	1,62e-02	5,14e-04	1,32e+00	0,05133
жидкая фаза	3,40e-10	1,44e-08	0	1,33e+00	0
camg(cо ₃) ₂	3,52e-08	5,47e-04	1,01e-04	2,87e+03	0,01007
кпоз	0	5,52e-05	5,60e-06	0,00e+00	0,00056

Независимые компоненты

независимые компоненты	химический состав	дисперсия баланса массы	молярность	мг/кг раствора	двойной раствор	химический потенциал	log молярности
Na	0,0017938	1,47e-10	1,79e-03	4,12e+01	-147,02	-84186	-2,75
Ca	0,0010707	-1,14e-16	5,24e-04	2,10e+01	-301,91	-2e+05	-3,28
Mg	0,0005468	8,09e-10	1,87e-07	4,54e-03	-269,46	-2e+05	-6,73
C	0,0025059	-5,84e-16	2,32e-04	2,78e+00	-166,80	-95509	-3,64
Cl	0,0006843	1,96e-09	6,84e-04	2,43e+01	-31,45	-18010	-3,17
S	0,0008464	-1,51e-12	8,46e-04	2,71e+01	-255,82	-1e+05	-3,07
N	0,0080784	7,88e-10	3,64e-04	5,09e+00	-0,32	-184	-3,44
K	0,0000558	1,18e-10	5,21e-07	2,04e-02	-164,67	-94290	-6,28
H	111,0194004	1,66e-09	3,92e-07	3,95e-04	-49,46	-28324	-6,41
O	55,5435469	1,06e-09	6,14e-03	9,83e+01	0,23	133	-2,21

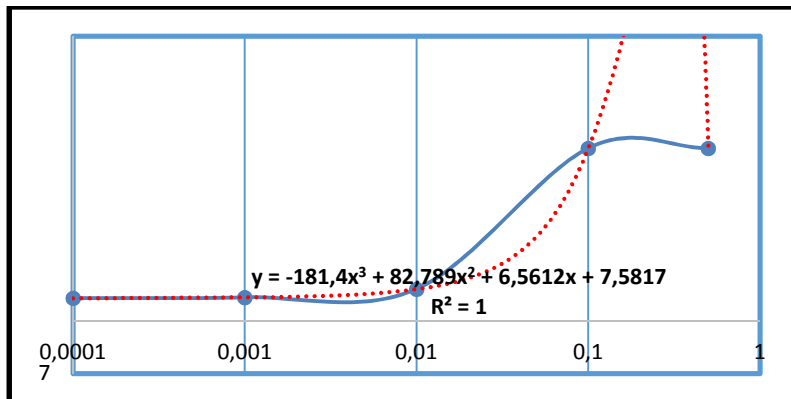
Зависимые компоненты

КОМПОНЕНТЫ И ЧАСТИЦЫ	gt, мдж/моль	моляльность	количество молей	мг/кг раствора или вес, %	log молей	коэфф. актив.	log коэфф. актив.	ln активности
Водный раствор								
CO ₃ ⁻²	-0,55	2,31e-04	2,31e-04	1,39e+01	-3,64	0,76	-0,12	-12,66
Ca ⁺²	-0,57	5,24e-04	5,24e-04	2,10e+01	-3,28	0,75	-0,12	-11,85
CaCl ⁺	-0,72	4,13e-08	4,13e-08	3,12e-03	-7,38	0,93	-0,03	-21,09
CaOH ⁺	-0,77	1,24e-09	1,24e-09	7,09e-05	-8,91	0,93	-0,03	-24,59
Cl ⁻	-0,15	2,28e-04	2,28e-04	8,09e+00	-3,64	0,94	-0,03	-12,47
HSO ₄ ⁻	-0,80	8,27e-10	8,27e-10	8,03e-05	-9,08	0,94	-0,03	-25,00
K ⁺	-0,32	1,74e-07	1,74e-07	6,78e-03	-6,76	0,93	-0,03	-19,66
Mg ⁺²	-0,49	1,11e-07	1,11e-07	2,70e-03	-6,96	0,76	-0,12	-20,31
MgCl ⁺	-0,65	1,41e-11	1,41e-11	8,43e-07	-10,85	0,93	-0,03	-29,07
NO ₂ ⁻	-0,08	9,74e-09	9,74e-09	4,48e-04	-8,01	0,94	-0,03	-22,53
NO ₃ ⁻	-0,07	1,28e-06	1,28e-06	7,94e-02	-5,89	0,94	-0,03	-17,65
Na ⁺	-0,28	1,78e-03	1,78e-03	4,10e+01	-2,75	0,93	-0,03	-10,42
SO ₄ ⁻²	-0,76	8,35e-04	8,35e-04	8,02e+01	-3,08	0,76	-0,12	-11,38
HCl	-0,19	5,18e-13	5,18e-13	1,89e-08	-12,29	1,00	0	-32,30
HNO ₃	-0,12	5,88e-16	5,88e-16	3,70e-11	-15,23	1,00	0	-39,09
Mg(HCO ₃) ⁺	-1,09	7,58e-08	7,58e-08	6,47e-03	-7,12	0,93	-0,03	-20,48
NaOH	-0,47	7,70e-11	7,70e-11	3,08e-06	-10,11	1,00	0	-27,31
NaSO ₄ ⁻	-1,04	1,19e-05	1,19e-05	1,42e+00	-4,92	0,94	-0,03	-15,42
O ₂	0,00	1,03e-03	1,03e-03	3,29e+01	-2,99	1,00	0,00	-10,90
N ₂	0,00	1,81e-04	1,81e-04	5,06e+00	-3,74	1,00	0	-12,64
OH ⁻	-0,19	2,96e-07	2,96e-07	5,03e-03	-6,53	0,94	-0,03	-19,12
H ⁺	-0,04	1,76e-08	1,76e-08	1,77e-05	-7,76	0,93	-0,03	-21,95
H ₂ O	-0,24	5,55e+01	5,55e+01	1,00e+00	1,74	1	0	0
Газовая фаза								
CO ₂	-0,40		1,18e-03	10,12	-2,93	1	0	-2,62
N ₂	0,00		3,83e-03	20,88	-2,42	1	0	-1,44
O ₂	0,001		1,09e-02	68,19	-1,96	1	0	-0,39
H ₂ O	-0,24		2,30e-04	0,8	-3,64	1	0	-4,26
Жидкая фаза								
O ₂	0,002		1,42e-08	99,03	-7,85	1	0	-0,02
H ₂ O	-0,24		2,47e-10	0,97	-9,61	1	0	-4,07
Твердая фаза								
CaMg(CO ₃) ₂	-2,16		5,47e-04	94,75	-3,26	1	0	0
KNO ₃	-0,39		5,52e-05	5,25	-4,26	1	0	0

Параметры газа

компоненты и частицы	фугитивность	log фугитивности	парциальное давление	log парциального давления	log коэф. фугитивности	коэф. фугитивности
NH ₃	1,12e-62	-6,20e+01	1,12e-62	-6,20e+01	0	1
CO ₂	7,30e-02	-1,14e+00	7,30e-02	-1,14e+00	0	1
N ₂	2,37e-01	-6,26e-01	2,37e-01	-6,26e-01	0	1
O ₂	6,76e-01	-1,70e-01	6,76e-01	-1,70e-01	0	1
H ₂ O	1,42e-02	-1,85e+00	1,42e-02	-1,85e+00	0	1

pH

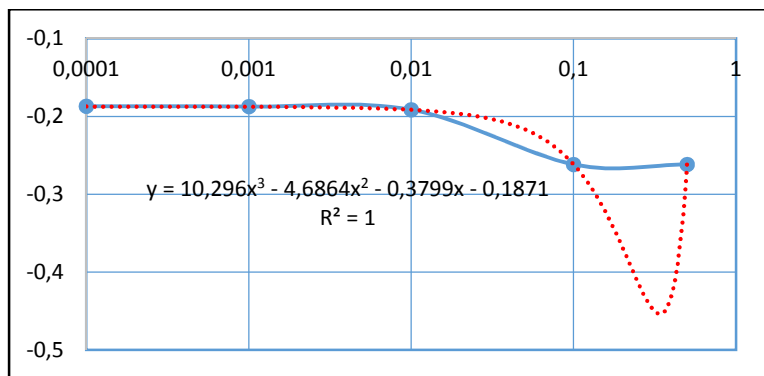


pH	NaNO ₃ , моль
7,58	0,0001
7,58	0,001
7,65	0,01
8,88	0,1
8,88	0,5

NaNO₃, моль

Рис. 1. Зависимость водородного показателя (pH) от содержания нитрата натрия в системе: почва-вода при температуре 288K.

Eh, В

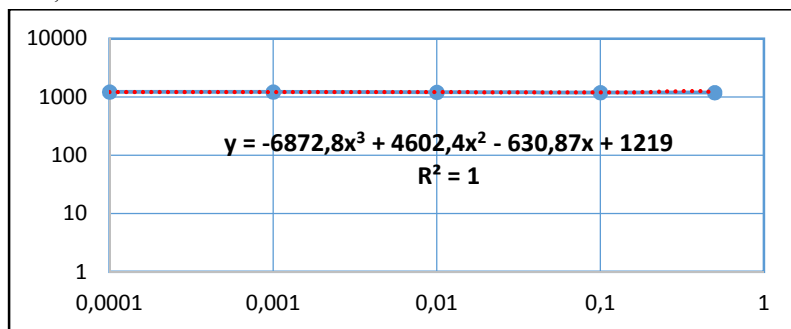


NaNO ₃ , моль	Eh, В
0,0001	-0,187
0,001	-0,187
0,01	-0,191
0,1	-0,261
0,5	-0,261

NaNO₃, моль

Рис. 2. Зависимость окислительно-восстановительного потенциала от содержания нитрата натрия в системе: почва-вода при температуре 288K.

TDS, мг/кг



NaNO ₃ , моль	TDS, мг/кг раствора
0,0001	1218,8
0,001	1218,3
0,01	1213,1
0,1	1195,0
0,5	1195,0

NaNO₃, моль

Рис. 3. Зависимость количества растворенного вещества от содержания нитрата натрия в системе: почва-вода при температуре 288K.

Таким образом изучение гетерогенной сложной системы: почва-вода-нитрат натрия при $P=0,1$ МПа, $T=288$ К позволило определить: объем, массу, плотность раствора; энергию Гиббса, G ; энтальпии, H ; энтропию, S ; внутреннюю энергию, U ; теплоемкость, C_p ; окислительно-восстановительный потенциал, E_h ; pH ; ионную силу; количество растворенных веществ в растворе, TDS; количество молей и весовой процент компонентов в фазах (табл.1). Установлено концентрационное распределение компонентов и частиц в системе почва-вода: CO_3^{2-} Ca^{+2} $CaCl^+$ $CaOH^+$ Cl^- HSO_4^- K^+ Mg^{+2} $MgCl^+$ NO_2^- NO_3^- Na^+ SO_4^{2-} , HCl , HNO_3 $Mg(HCO_3)^+$ $NaOH$ $NaSO_4$ O_2 N_2 OH^- OH^- H_2O , где в естественных условиях азот встречается в виде нитрит и нитрат ионов, азотной кислоты и молекулярного азота. Следует отметить, что большинство сельскохозяйственных культур развиваются в условиях слабокислой или нейтральной реакции почвы. На кислых почвах растения плохо усваивают питательные вещества, недостаточно развивается корневая система и в целом в растении, накапливаются вредные для растений вещества, не формируются полезные почвенные микроорганизмы, способствующие повышению и поддержанию плодородия. Элементы питания на таких почвах переходят в недоступные для растений формы. Единственный прием устранения избыточной кислотности почвы известкование, а также использование малых количеств

удобрений. Указанные мероприятия резко смещают биологические процессы в сторону, благоприятную для роста растений.

Литература:

1. Мамытов А.М. Почва Киргизской ССР. - Фрунзе: Илим, 1974. - 66-76 с.
2. Мамытов А.М. Почва Киргизской ССР. - Фрунзе: Илим, 1980. - 207 с.
3. Мамытов А.М. Почва Киргизской ССР. - Фрунзе: Илим, 1980. - 209 с.
4. Мамытов А.М. Почва Киргизской ССР. - Фрунзе: Илим, 1980. - 228 с.
5. Минеральные удобрения / И.И. Синягин // Большая советская энциклопедия.: гл. ред. А.М. Прохоров. - М., 1969.
6. Артюшин А.М. Краткий справочник по удобрениям. - 2 изд. - М.: Колос, 1984. - 208 с.
7. Вальков В.Ф. Почвенная экология сельскохозяйственных растений. - М., 1986. - 416 с.
8. Karpov I.K. The convex programming minimization of five thermodynamic potential other than Gibbs energy in geochemical modeling [Text] / [I.K. Karpov, K.V. Chudnenko, D.A. Kulik and oth.] // American J. Science, 2002. - P. 281-311.
9. Добровольский Г.В. Экологические функции почвы. - М., 1986. - 413 с.
10. https://znaytovar.ru/gost/2/GN_217204106_Predelno_dopustim.html
11. https://online.zakon.kz/document/?doc_id=30392196#pos=1:-97

Рецензент: к.т.н., доцент Сыдыков Ж.Д.