

совых веществ определялась их оптическая плотность; содержание низкомолекулярных органических веществ определялось хромато-масс-спектрометрически.

Изучение способов концентрирования проб показало, что получаемые в дальнейшем ходе анализа результаты сопоставимы. Оба приема концентрирования воды имеют недостатки: вымораживание достаточно трудоемко и менее эффективно, упаривание более эффективно, но приводит к некоторому дополнительному окислению гумусовых веществ. Проведенные исследования показали возможность применения для изучения водорастворимого органического вещества принятых в почвоведении методов выделения и фракционирования гумусовых веществ. Органическое вещество природной воды представлено наряду с низкомолекулярными и прогумусовыми соединениям собственно гуминовыми и фульвокислотами. В озерной воде содержание специфических гумусовых веществ существенно превосходит содержание низкомолекулярных соединений индивидуальной природы.

УДК 547.992.2

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ И КЛАССИФИКАЦИЯ ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ

Перминова И.В.

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,

iperfm@org.chem.msu.ru

Определение класса гуминовых веществ до сих пор базируется на способе извлечения из природных объектов, а их общепринятая классификация – на процедуре фракционирования. Это определяет актуальность разработки количественных подходов к анализу и описанию строения гуминовых веществ. В связи с изложенным, цель работы состояла в разработке общей методологии анализа гумусовых кислот и численного описания их строения, позволяющей определять классификационные признаки таких объектов и моделировать их свойства.

В качестве способа численного описания строения адекватного стохастическому характеру гумусовых кислот был выбран комплекс интегральных параметров состава, соответствующих трем иерархическим уровням организации органических соединений - элементному, структурно-групповому, молекулярному. В качестве априорных признаков для классификационного анализа гуминовых веществ выбирали источник и фракционный состав препаратов.

Для достижения поставленной цели была создана представительная выборка препаратов гумусовых кислот (около 80 препаратов), различающихся по источникам происхождения (уголь, торф, почва, пре-

сные воды) и фракционному составу (гуминовые кислоты, фульвокислоты и их нефракционированные смеси). Препараты анализировали с помощью методов элементного анализа, спектроскопии ЯМР ^{13}C и ^1H и эксклюзионной хроматографии. Все определения проводили в количественных условиях, выбору которых уделяли особое внимание.

Строение препаратов характеризовали, рассчитывая параметры элементного, структурно-группового и молекулярно-массового состава. Использование полученных данных для классификации препаратов по априорным признакам - источнику происхождения и фракционному составу - показало, что максимальной дискриминирующей способностью обладает следующий комплекс параметров: N , C , M_p , M_w/M_n и C_{HCO} . Их применение позволило успешно решить поставленную задачу классификации.

УДК: 631.417.2:631.445.21

рК-СПЕКТРОСКОПИЯ КАК МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ КИСЛОТНО-ОСНОВНЫХ СВОЙСТВ ГУМУСОВЫХ ВЕЩЕСТВ

М.А. Рязанов*, Е.М. Лаптева**, Е.Д. Лодыгин**

*Сыктывкарский государственный университет, ryazanov@online.ru

**Институт биологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, lapteva@ib.komisc.ru

С целью установления состава кислотных функциональных групп, входящих в структуру молекул природных полиэлектролитов (таких, как гуминовые и фульвокислоты), широко используют потенциометрическое титрование их растворов с последующей компьютерной обработкой экспериментальных данных. Нами разработана программа, позволяющая из кривой титрования рассчитать функцию распределения мольных долей ионогенных групп (q) по величинам отрицательных логарифмов констант диссоциации (pK) - pK -спектр. Для ее тестирования были смоделированы результаты потенциометрического титрования шестиосновной кислоты с величинами pK равными 2, 3, 4, 5, 6, 7. Построенный pK -спектр соответствует модельному с заданными величинами pK (рис.1, 2).