

## ПРИЛОЖЕНИЯ

## Приложение 3.1

Первичные данные по элементному составу препаратов  
гумусовых кислот (СНН и О – данные элементного анализатора;  
S и зольность – ручное сжигание; H<sub>2</sub>O – по обратному набору веса)

Препарат	Содержание, масс. %						
	С	Н	Н	О	S	Ash	H <sub>2</sub> O
<b>ГФК торфа</b>							
RHF-T10L94	48.9	4.5	2.1	27.5*	1.4	0.8	
RHF-T10L98	37.6	3.6	2.2			22.5	
RHF-T1H94	48.5	5.1	1.9	36.2	2.8	4.7	
RHF-T3L98	53.8	4.8	1.8			4.7	
RHF-T4H94	48.2	5.0	2.3	36.8*	1.1	1.5	7.2
RHF-T4H98	53.3	4.7	3.3		2.4	1.1	
RHF-T5H94	48.2	4.9	2.1	33.1*	1.0	3.0	7.9
RHF-T5H98	48.4	4.8	1.8	36.3*		1.5	
RHF-T6H94	48.1	4.8	1.2	35.9	1.9	3.3	7.4
RHF-T6H98	49.3	4.6	1.2			1.4	
RHF-T7H94	47.6	4.8	1.4	34.2	2.8	2.0	9.2
RHF-T7H98	47.3	4.3	1.0			8.9	
RHF-TH94	50.1	4.5	1.6	35.7*	1.4	1.4	9.2
RHF-TMu4H	49.7	5.0	1.9	34.8	2.9	0.0	8.8
RHF-TTL94	48.9	4.3	2.4		1.6	2.1	8.3
RHF-TTL98	48.8	4.0	1.8			3.8	
<b>ГК торфа</b>							
RHA-T10L98	49.9	5.0	2.0			0.0	
RHA-T3L98	52.0	4.6	2.3			2.4	
RHA-T4H98	47.8	4.5	2.0			4.5	
RHA-T5H98	48.4	4.6	2.1			4.4	
RHA-T6H98	49.4	4.6	1.5			0.5	
RHA-T7H98	52.1	4.7	1.3			0.0	
RHA-TH8	52.4	5.2	1.7			4.7	
RHA-THTO	46.4	4.6	2.5	29.9*		12.3	10.1
RHA-TSkL00	47.5	4.2	2.5			11.3	
RHA-TTL98	50.1	4.4	2.1			2.0	

Препарат	Содержание, масс. %						
	C	H	N	O	S	Ash	H <sub>2</sub> O
<b>ФК торфа</b>							
PFA-T10L98	47.1	4.0	1.2			1.8	
PFA-T3L98	46.7	3.9	0.5			0.0	
PFA-T4H98	49.3	4.4	0.5			0.0	
PFA-T5H98	44.7	4.7	1.9			0.8	
PFA-T6H98	45.2	4.8	0.5			11.1	
PFA-T7H98	46.1	4.7	0.7			3.6	
PFA-TSkL00	38.1	3.7	1.6			11.2	
PFA-TTL98	46.9	3.8	1.1			1.4	
<b>РОВ торфа</b>							
PDOM-TH	42.2	5.3	1.7		2.4	1.1	11.0
PDOM-TT	43.8	5.5	1.0			2.6	
<b>ГФК почв</b>							
SHF-Co94	41.0	4.6	3.3	32.5/32.0*	6.4	16.0	7.2
SHF-CtK98	44.4	3.3	2.5			2.8	
SHF-CtV98	34.4	3.0	1.7			21.0	
SHF-Gw98	39.4	4.0	3.1			15.7	
SHF-PMu9	32.5	3.9	1.6		2.6	27.6	
SHF-TMu12	45.5	4.8	2.8		4.3	5.9	
<b>ГК почв</b>							
SHA-Cm94	51.9	3.7	4.4	29.9*	2.7	7.0	11.0
SHA-Cm98	55.1	3.4	4.0			1.2	
SHA-CtK98	41.9	2.8	2.0			27.0	
SHA-CtV94	49.9	3.4	3.7	28.9*		7.4	11.1
SHA-Gp94	40.1	4.4	3.8		1.6	9.0	11.6
SHA-Gw94	45.4	4.5	4.6	32.4*	2.0	10.1	9.8
SHA-Pg94	39.0	4.1	3.3	30.5*	0.8	22.2	9.4
SHA-Pg96	44.7	4.4	3.3			11.3	
SHA-Pp94	41.5	4.7	3.7			9.1	11.2
SHA-Pp96	38.0	4.4	3.9			21.6	
SHA-Pw94	43.3	4.2	4.4	32.1*	2.5	11.7	11.3
SHA-Pw96	45.3	5.1	3.8			10.0	
SHA-Pw98	48.9	5.2	3.8			7.8	
SHA-PwN	52.2	4.9	3.7	32.6*	2.1	1.7	7.1
SHA-K1	28.0	3.0	2.3			32.3	

Препарат	Содержание, масс. %						
	C	H	N	O	S	Ash	H <sub>2</sub> O
<b>ФК почв</b>							
SFA-Cm94	43.5	4.4	3.1	36.8		11.2	10.9
SFA-Cm98	47.5	4.2	2.5			12.3	
SFA-Ct94	44.7	4.0	3.3	39.8		8.9	8.4
SFA-Gp94	38.2	4.2	3.0	38.8		16.5	
SFA-Gw94	43.9	4.7	3.4	40.3		7.7	9.8
SFA-Pg94	41.4	4.2	2.8	41.0		11.0	9.0
SFA-Pg96	43.8	4.1	2.6			5.7	
SFA-Pp94	41.2	4.5	3.9	40.1		11.1	
SFA-Pp96	45.5	4.4	4.7			4.5	
SFA-Pw94	38.2	3.8	1.7	39.2		17.7	8.4
SFA-Pw96	43.9	4.3	3.0			7.1	
SFA-Pw98	45.8	4.1	1.4			2.2	
<b>ГФК почвенного раствора</b>							
SDHF-Pg96	30.6	3.6	0.3			30.8	
SDHF-Pp96	22.0	3.0	0.1			46.7	
SDHF-Pw96	13.5	2.2	0.1			60.4	
<b>ГК углей</b>							
CHA-AGK	49.0	4.1	0.5	38.2*	1.8	16.6	10.3
CHA-ALD	43.1	3.8	0.7			27.0	
CHA-RO	49.3	4.1	1.1			9.5	
CHA-K2	50.0	2.4	0.4			19.3	
CHA-K3	41.2	2.5	1.2			26.7	
CHA-K4	29.9	2.8	0.5			39.8	
<b>ГФК природных вод</b>							
AHF- RI	48.5	5.1	1.0		1.8	3.6	
AHF- RMX2/8	41.0	4.2	1.3		1.0	14.4	
AHF- RMX8	45.0	4.5	1.2		2.7	11.0	6.3
AHF- RND3	32.4	3.7	1.4	28.6	3.0	29.8	6.3
AHF-MMu7	18.8	2.6	0.3		1.3	48.0	
AHF-MMu8	37.5	4.0	0.5		3.2	18.0	
AHF-RMC	42.1	4.9	2.4		5.3	4.8	
AHF-RMX2	32.3	3.3	0.7		1.2	31.8	
AHF-RND14	14.2	2.2	0.1			57.6	

Препарат	Содержание, масс. %						
	С	Н	Ν	О	С	Ash	H <sub>2</sub> O
<b>РОВ природных вод</b>							
ADOM-SMu4	35.2	3.8	0.5		0.9	19.6	11.1
ADOM-SMu8	30.5	3.8	2.2	27.8	1.2	31.0	9.6
ADOM-SSh1	26.9	2.9	0.1		1.3	42.1	
<b>ГФК донных отложений</b>							
BHF-RLuh	25.9	3.3	1.9			35.0	
BHF-RND13	45.3	5.1	1.9		5.2	4.0	
BHF-SMu2	45.7	4.6	2.0		3.1	6.0	
<b>ГК донных отложений</b>							
BHA-SSk00	48.6	5.4	3.3			7.5	
<b>ФК донных отложений</b>							
BHA-SSk00	39.9	3.5	2.4			7.3	

\* – по данным ИВС.

Данные по элементному составу препаратов гумусовых кислот,  
исправленные на зольность и влажность, и атомные отношения  
(содержание О рассчитано по разности, содержание H<sub>2</sub>O 8%)

Препарат	Содержание, % масс.							
	С	Н	N	О	S	H/C	O/C	C/N
<b>ГФК торфа</b>								
PHF-T10L94	53.6	3.9	2.3	38.7	1.6	0.88	0.54	28
PHF-T10L98	54.2	3.8	3.2	37.8	1.0	0.85	0.52	20
PHF-T1H94	55.5	4.8	2.2	34.3	3.2	1.03	0.46	30
PHF-T3L98	61.5	4.5	2.0	31.0	1.0	0.87	0.38	35
PHF-T4H94	52.8	4.6	2.5	38.9	1.2	1.02	0.54	25
PHF-T4H98	58.6	4.2	3.6	30.9	2.7	0.86	0.40	20
PHF-T5H94	54.1	4.5	2.4	37.8	1.1	1.00	0.52	27
PHF-T5H98	53.5	4.3	2.0	39.2	1.0	0.97	0.55	31
PHF-T6H94	53.9	4.4	1.3	38.2	2.1	0.96	0.52	47
PHF-T6H98	54.3	4.1	1.3	39.2	1.0	0.91	0.54	49
PHF-T7H94	53.6	4.3	1.6	37.4	3.1	0.99	0.54	39
PHF-T7H98	56.9	4.1	1.3	36.8	1.0	0.87	0.48	53
PHF-TH94	56.0	3.9	1.8	36.8	1.5	0.87	0.51	36
PHF-TMu4H	54.5	4.4	2.0	35.9	3.1	1.00	0.50	31
PHF-TTL94	54.6	3.7	2.7	37.3	1.7	0.83	0.52	24
PHF-TTL98	55.3	3.5	2.1	38.1	1.0	0.76	0.52	31
<b>ГК торфа</b>								
PHA-T10L98	54.3	4.4	2.2	38.1	1.0	0.98	0.53	29
PHA-T3L98	58.0	4.2	2.6	34.2	1.0	0.87	0.44	26
PHA-T4H98	54.6	4.2	2.3	37.9	1.0	0.92	0.52	28
PHA-T5H98	55.2	4.3	2.4	37.1	1.0	0.93	0.50	27
PHA-T6H98	54.0	4.1	1.7	39.3	1.0	0.91	0.55	38
PHA-T7H98	56.7	4.1	1.4	36.8	1.0	0.87	0.49	46
PHA-TH8	60.0	4.9	2.0	32.1	1.0	0.99	0.40	36
PHA-THTO	59.8	4.5	3.2	31.6	1.0	0.96	0.43	22
PHA-TSkL00	58.9	4.2	3.1	32.9	1.0	0.85	0.42	22
PHA-TTL98	55.6	3.9	2.3	37.2	1.0	0.83	0.50	28

Препарат	Содержание, % масс.							
	C	H	N	O	S	H/C	O/C	C/N
<b>ФК торфа</b>								
PFA-T10L98	52.2	3.4	1.3	42.1	1.0	0.78	0.60	48
PFA-T3L98	50.8	3.2	0.5	44.5	1.0	0.76	0.66	120
PFA-T4H98	53.6	3.9	0.5	41.0	1.0	0.86	0.57	127
PFA-T5H98	49.0	4.2	2.0	43.8	1.0	1.02	0.67	28
PFA-T6H98	55.9	4.8	0.6	37.6	1.0	1.03	0.50	101
PFA-T7H98	52.1	4.3	0.8	41.7	1.0	1.00	0.60	75
PFA-TSkL00	47.1	3.4	2.0	46.4	1.0	0.88	0.74	27
PFA-TTL98	51.7	3.2	1.2	42.9	1.0	0.74	0.62	49
<b>РОВ торфа</b>								
PDOM-TH	48.0	4.7	1.9	42.6	2.8	0.67	1.18	29
PDOM-TT	49.0	5.2	1.1	43.8	1.0	0.67	1.27	52
<b>ГФК почв</b>								
SHF-Co94	53.4	5.0	4.3	29.0	8.3	1.10	0.39	15
SHF-CtK98	49.7	2.7	2.8	43.7	1.0	0.65	0.66	20
SHF-CtV98	48.4	3.0	2.4	45.1	1.0	0.75	0.70	23
SHF-Gw98	51.6	4.1	4.1	39.2	1.0	0.95	0.57	15
SHF-PMu9	50.4	4.7	2.5	38.4	4.0	1.11	0.57	24
SHF-TMu12	52.8	4.5	3.3	34.3	5.0	1.03	0.49	19
<b>ГК почв</b>								
SHA-Cm94	63.3	3.0	5.4	25.1	3.2	0.66	0.34	14
SHA-Cm98	60.7	2.7	4.4	31.2	1.0	0.54	0.39	16
SHA-CtK98	64.4	3.0	3.0	28.6	1.0	0.56	0.33	25
SHA-CtV94	61.2	2.7	4.5	30.6	1.0	0.62	0.42	16
SHA-Gp94	50.5	4.0	4.8	38.7	2.0	1.06	0.63	12
SHA-Gw94	56.7	4.3	5.8	30.7	2.5	0.96	0.43	12
SHA-Pg94	56.9	4.5	4.9	32.6	1.1	1.00	0.45	14
SHA-Pg96	55.3	4.3	4.1	35.3	1.0	0.93	0.48	16
SHA-Pp94	52.1	4.3	4.7	37.9	1.0	1.09	0.60	13
SHA-Pp96	54.0	5.0	5.5	34.5	1.0	1.11	0.48	11
SHA-Pw94	56.3	3.9	5.7	30.9	3.3	0.92	0.46	12
SHA-Pw96	55.2	5.1	4.6	34.1	1.0	1.10	0.46	14
SHA-Pw98	58.1	5.1	4.5	31.3	1.0	1.05	0.40	15
SHA-PwN	57.2	4.5	4.0	31.9	2.3	0.93	0.41	17
SHA-K1	47.0	3.6	3.9	44.5	1.0	0.71	0.92	14

Препарат	Содержание, % масс.							
	C	H	N	O	S	H/C	O/C	C/N
<b>ФК почв</b>								
SFA-Cm94	55.9	4.0	4.0	35.1	1.0	0.87	0.47	16
SFA-Cm98	59.6	4.2	3.2	32.1	1.0	0.85	0.40	22
SFA-Ct94	54.0	3.7	4.0	37.3	1.0	0.81	0.52	16
SFA-Gp94	50.6	4.4	3.9	40.0	1.0	1.05	0.59	15
SFA-Gw94	53.2	4.3	4.1	37.3	1.0	0.98	0.53	15
SFA-Pg94	51.8	4.0	3.4	39.7	1.0	0.92	0.58	18
SFA-Pg96	50.8	3.7	3.0	41.4	1.0	0.88	0.61	19
SFA-Pp94	50.9	4.5	4.8	38.8	1.0	1.06	0.57	12
SFA-Pp96	52.0	4.0	5.4	37.7	1.0	0.91	0.54	11
SFA-Pw94	51.7	3.9	2.2	41.2	1.0	0.90	0.60	27
SFA-Pw96	51.7	4.0	3.5	39.7	1.0	0.94	0.58	17
SFA-Pw98	51.0	3.6	1.5	42.9	1.0	0.84	0.63	40
<b>ГФК почвенного раствора</b>								
SDHF-Pg96	49.9	4.4	0.4	44.3	1.0	0.67	1.06	146
SDHF-Pp96	48.5	4.6	0.2	45.6	1.0	0.71	1.14	283
SDHF-Pw96	42.9	4.1	0.3	51.7	1.0	0.90	1.15	167
<b>ГК углей</b>								
CHA-AGK	67.0	4.1	0.7	25.8	2.5	0.79	0.32	112
CHA-ALD	66.4	4.5	1.0	27.1	1.0	0.81	0.31	77
CHA-RO	59.8	3.9	1.3	34.1	1.0	0.78	0.43	55
CHA-K2	68.8	2.0	0.5	27.7	1.0	0.35	0.30	167
CHA-K3	63.0	2.5	1.8	31.7	1.0	0.48	0.38	41
CHA-K4	57.2	3.7	1.0	37.1	1.0	0.77	0.49	69
<b>ГФК природных вод</b>								
AHF- RI	54.9	4.7	1.1	37.2	2.0	1.04	0.51	57
AHF-RMX2/8	52.8	4.3	1.6	40.1	1.3	0.97	0.57	38
AHF- RMX8	54.3	4.5	1.5	36.4	3.3	0.95	0.48	43
AHF- RND3	50.7	4.7	2.2	37.7	4.7	1.05	0.52	26
AHF-MMu7	42.7	4.0	0.7	49.7	3.0	1.12	0.87	74
AHF-MMu8	50.7	4.2	0.7	40.1	4.3	1.00	0.59	83
AHF-RMC	48.3	4.6	2.7	38.3	6.0	1.15	0.59	21
AHF-RMX2	53.6	4.0	1.1	39.3	2.0	0.88	0.55	55
AHF-RND14	41.4	3.7	0.3	53.7	1.0	1.07	0.97	166

Препарат	Содержание, % масс.							
	С	Н	Н	О	С	Н/С	О/С	С/Н
<b>РОВ природных вод</b>								
ADOM-SMu4	50.8	3.7	0.7	43.4	1.3	0.64	0.87	85
ADOM-SMu8	51.3	4.6	3.6	38.5	2.0	0.56	1.08	17
ADOM-SSh1	53.8	4.0	0.2	40.9	1.0	0.57	0.89	314
<b>ГФК, ГК и ФК донных отложений</b>								
BHF-RLuh	45.5	4.3	3.4	45.8	1.0	0.75	1.13	16
BHF-RND13	51.5	4.8	2.1	35.7	5.9	0.52	1.12	28
BHF-SMu2	53.1	4.3	2.3	36.7	3.7	0.52	0.97	27
BHA-SSk00	57.5	5.3	3.8	32.3	1.0	0.42	1.1	17
BFA-SSk00	47.1	3.1	2.9	45.9	1.0	0.73	0.79	19



Интегральные интенсивности диапазонов  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектров  
препаратов при различных временах релаксационной задержки

Препарат	Спектральная область, м.д.						
	220-185	185-167	167-145	145-108	108-90	90-50	50-5
$I_1$							
SHF-Pw94	0.7	13.1	12.6	32.2	2.5	17.3	21.6
SHF-PwN	1.8	9.3	10.4	32.1	2.4	19.3	24.7
PHF-T1094	1.4	8.3	8	26.6	4.7	28.7	22.2
PHF-T594	1.5	9.4	12.8	23.1	2.6	22.3	28.4
PHF-T694	1.2	8.8	10.3	31	2.3	26.5	20
PHF-T794	1.9	10.7	12.2	31.2	3.9	21.9	18.2
PHF-TT94	1.1	9.4	10.7	29.1	5.1	22	22.5
PHF-TH94	1.6	10.6	11.4	29	3	25.4	18.9
SFA-Pw94	2.6	11.6	8.9	22	1.2	25	28.6
SFA-Pg94	2.9	11.3	9.5	24.9	1.9	25.7	23.7
AHF-RI	1.2	11.6	9.3	25.3	2.2	26.9	23.5
CHA-ALD	2.1	9.2	10	40.9	0	9.1	28.6
$I_2$							
PHF-T694	1.5	11.1	12.9	38.2	1	20	15.4
PHF-TH94	1.3	14.4	12.8	29.6	2.9	19.8	19.1
SFA-Pw94	2.2	16.2	10.6	22.9	3.1	19.6	25.4
SFA-Pg94	2.8	16	11.6	29.9	1.4	17.3	21
AHF-RI	2.5	14.5	11.3	23.9	2.5	22.2	23.1
CHA-ALD	1.1	11.9	12.7	43.2	0	7.5	23.5
$I_3$							
SHF-Pw94	0.9	16.8	13	33	2.7	15.4	18.2
SHF-PwN	2.1	14.3	14	33.7	1.9	13.5	20.5
PHF-T1094	1.5	14.2	14.3	32	3.2	16.7	18.1
PHF-T594	1.7	14.5	13.7	23.8	2.8	18.8	24.7
PHF-T694	1.5	13.3	13.9	36	3	16.5	15.8
PHF-T794	1.8	14.6	14.6	33.3	3.8	16.3	15.6
PHF-TT94	1.2	14.3	13.9	31	4.2	16.2	19.2
PHF-TH94	1.8	14.4	15.5	29.5	2.9	19	16.9

Препарат	Спектральная область, м.д.						
	220-185	185-167	167-145	145-108	108-90	90-50	50-5
$I_4$							
SHF-Pw94	0.9	17.1	12.5	32.4	2.1	16.5	18.6
SHF-PwN	1	14.2	14	33.9	3.3	13.3	20.3
PHF-T594	1.3	12.1	16	24.6	1.2	22.1	22.7
PHF-T694	2.3	13.4	14.2	37.5	0.9	17.5	14.2
PHF-T794	4.7	15.1	15.8	33.1	2.4	14.2	14.8
PHF-T1094	2.1	16.1	15.4	33.1	1.3	15.7	16.4
PHF-TT94	1.5	13.7	15.4	30.1	5	16.1	18.1
PHF-TH94	0.7	15.3	14.5	28.9	2.7	17.7	20.2
SFA-Pw94	2.7	19.6	12	23	2	17	23.7
SFA-Pg94	3	18	12	29	2	17	19
AHF-RI	2	18	12	26	3	19	20
CHA-ALD	1	15	13	43	0	7	21
$I_8$							
PHF-T694	3.1	13.9	13.5	37.5	0.6	17.2	14.2
PHF-TH94	1.2	15	14.3	28.7	2.1	17.5	21.2
SFA-Pw94	2	20	12.3	23.4	2.7	17.5	22.1
SFA-Pg94	2.2	18.3	13.1	28.4	2	16.9	19.1
AHF-RI	1.2	17.5	13.4	25.8	3.6	18.6	19.9
CHA-ALD	0.9	15.1	13	43.4	0	7.1	20.5

Описательные статистики  $^{13}\text{C}$  ЯМР-данных по распределению C в структуре гумусовых кислот (содержание C в составе фрагментов дано в % от общего C)

Фрагмент	$\bar{x}$	Med	$X_{\min}$	$X_{\max}$	$Q_{25}$	$Q_{75}$	$s^2$	A	E	W
<b>ГФК торфа (n = 15)</b>										
C=O	3.0	2.4	0.5	7.3	2.0	4.7	3.1	1.09	1.07	0.895
COO	14.8	15.3	10.8	17.3	13.4	16.6	3.8	-0.73	-0.26	0.924
C <sub>Ar</sub> O	12.2	12.7	6.9	17.3	8.6	15.3	12.2	-0.04	-1.36	0.941
C <sub>Ar</sub>	30.0	29.4	24.8	38.3	25.9	33.2	18.0	0.47	-0.88	0.933
OCO	3.8	3.5	0.5	6.9	2.9	5.6	3.8	0.10	-0.67	0.962
CHO	12.8	11.0	7.5	22.7	9.0	16.2	20.0	0.87	-0.05	0.913
CH <sub>2</sub> O	2.8	2.6	1.3	5.5	2.1	3.3	1.1	1.19	1.63	0.916
CH <sub>3</sub> O	3.1	3.1	1.7	4.5	2.4	3.7	0.7	0.12	-0.84	0.971
CH <sub>n</sub>	17.5	17.4	13.8	20.9	16.1	19.1	3.5	0.03	-0.15	0.973
$\Sigma\text{C}_{\text{Ar}}$	42.2	45.5	33.4	49.5	35.4	46.9	37.1	-0.46	-1.78	0.816
$\Sigma\text{C}_{\text{Carb}}$	19.4	19.3	11.4	31.5	14.5	26.1	37.5	0.57	-0.74	0.935
<b>ГК торфа (n = 8)</b>										
C=O	3.0	2.6	1.6	4.5	1.7	4.1	1.5	0.15	-2.21	0.875
COO	13.6	14.1	8.6	17.5	11.0	16.1	9.3	-0.51	-0.37	0.976
C <sub>Ar</sub> O	11.1	9.2	6.7	20.6	7.2	16.5	28.2	1.29	0.28	<b>0.801</b>
C <sub>Ar</sub>	32.4	32.2	25.0	37.9	31.7	35.4	15.8	-0.82	2.13	0.905
OCO	2.5	2.3	1.1	4.3	1.7	3.7	1.3	0.63	-0.78	0.932
CHO	10.9	12.3	3.7	14.2	8.2	14.1	14.2	-1.42	1.61	0.839
CH <sub>2</sub> O	2.5	2.7	1.0	3.4	2.2	3.3	0.6	-1.20	2.00	0.895
CH <sub>3</sub> O	4.1	4.0	2.6	6.5	3.4	4.4	1.4	1.27	3.02	0.887
CH <sub>n</sub>	19.8	20.5	13.3	25.7	14.8	22.7	19.3	-0.46	-0.72	0.938
$\Sigma\text{C}_{\text{Ar}}$	43.5	42.0	33.1	58.6	38.8	48.6	65.5	1.01	1.62	0.925
$\Sigma\text{C}_{\text{Carb}}$	16.0	17.6	6.4	20.7	12.4	20.1	26.8	-1.17	0.81	0.880
<b>ФК торфа (n = 6)</b>										
C=O	2.6	2.6	1.1	3.9	1.6	3.5	1.2	-0.12	-1.75	0.954
COO	13.1	12.0	9.8	18.9	10.9	15.2	11.3	1.20	0.81	0.890
C <sub>Ar</sub> O	7.8	7.6	4.9	10.9	6.9	8.8	4.1	0.26	0.63	0.980
C <sub>Ar</sub>	24.9	24.4	21.6	30.2	24.0	25.1	8.1	1.41	3.32	0.846
OCO	6.3	6.0	3.7	9.6	5.4	6.9	3.8	0.79	1.81	0.947
CHO	21.1	24.4	12.3	26.6	12.7	26.1	45.0	-0.89	-1.87	<b>0.751</b>
CH <sub>2</sub> O	3.3	3.0	2.2	5.6	2.3	3.5	1.6	1.67	3.08	<b>0.832</b>

Фрагмент	$\bar{x}$	Med	$X_{\min}$	$X_{\max}$	$Q_{25}$	$Q_{75}$	$s^2$	A	E	W
CH <sub>3</sub> O	2.5	2.3	1.2	4.1	1.8	3.2	1.1	0.53	-0.39	0.973
CH <sub>n</sub>	18.6	19.9	11.9	24.9	13.2	21.6	26.1	-0.31	-1.58	0.924
$\Sigma C_{Ar}$	32.7	32.2	26.5	38.9	31.3	34.9	16.8	0.07	1.12	0.963
$\Sigma C_{Carb}$	30.6	35.6	18.8	37.2	20.5	36.1	73.1	-0.96	-1.77	0.727

## ГФК почв (n = 5)

C=O	2.0	1.7	0.8	3.8	1.5	2.2	1.3	1.16	1.88	0.925
COO	14.5	15.4	9.0	18.4	12.9	16.8	13.5	-0.82	0.07	0.955
C <sub>Ar</sub> O	9.4	8.2	4.4	14.0	7.4	13.1	16.3	0.06	-2.01	0.921
C <sub>Ar</sub>	33.6	32.6	26.2	41.7	31.9	35.8	32.3	0.26	0.78	0.979
OCO	4.1	3.0	3.0	7.4	3.0	4.0	3.6	1.98	3.90	0.690
CHO	9.9	11.0	4.8	12.0	10.5	11.0	8.3	-2.03	4.35	0.725
CH <sub>2</sub> O	2.7	2.7	1.7	3.7	2.6	3.0	0.5	-0.25	1.25	<b>0.972</b>
CH <sub>3</sub> O	3.8	3.6	0.7	7.4	3.2	4.0	5.8	0.54	1.89	0.938
CH <sub>n</sub>	20.0	18.7	12.1	28.9	14.2	26.1	53.5	0.26	-2.47	0.920
$\Sigma C_{Ar}$	43.1	44.0	36.9	49.1	40.3	45.0	21.7	-0.11	-0.43	0.985
$\Sigma C_{Carb}$	16.7	18.0	9.5	20.5	16.7	18.7	18.0	-1.66	3.16	0.844

## ГК почв (n = 16)

C=O	2.2	2.1	1.0	4.0	1.7	2.8	0.7	0.41	0.02	0.952
COO	16.3	15.6	14.3	19.0	15.0	17.4	2.4	0.57	-0.95	0.899
C <sub>Ar</sub> O	10.6	11.0	7.0	13.0	9.4	12.4	4.0	-0.50	-0.69	0.924
C <sub>Ar</sub>	33.6	32.5	21.0	48.1	29.3	37.9	56.2	0.54	-0.19	0.949
OCO	2.7	2.5	2.0	4.1	2.0	3.0	0.6	0.75	-0.82	<b>0.790</b>
CHO	9.0	9.7	4.0	12.2	8.0	10.3	4.8	-0.65	0.40	0.947
CH <sub>2</sub> O	2.2	2.1	0.8	3.5	2.0	2.7	0.5	-0.21	0.16	0.956
CH <sub>3</sub> O	4.7	4.8	3.0	6.6	4.0	5.4	0.9	0.13	-0.17	0.979
CH <sub>n</sub>	18.7	18.3	12.6	26.0	15.5	21.9	17.2	0.21	-0.96	0.963
$\Sigma C_{Ar}$	44.2	44.7	31.0	56.8	37.7	50.2	63.7	-0.01	-0.92	0.961
$\Sigma C_{Carb}$	13.9	14.0	7.6	19.0	12.0	15.9	9.9	-0.29	-0.13	0.966

## ФК почв (n = 4)

C=O	3.1	3.3	2.0	4.0	2.6	3.7	0.7	-0.83	1.32	0.962
COO	20.1	19.7	18.0	23.0	18.8	21.4	4.4	1.14	2.15	0.915
C <sub>Ar</sub> O	9.4	8.7	7.0	13.1	7.3	11.5	7.6	1.04	-0.03	0.910
C <sub>Ar</sub>	24.1	24.5	19.0	28.2	21.3	26.9	15.0	-0.62	0.52	0.981
OCO	2.3	2.2	2.0	3.0	2.0	2.7	0.2	1.52	1.98	0.814
CHO	11.5	10.5	9.9	15.0	10.0	13.0	5.8	1.76	3.06	0.779
CH <sub>2</sub> O	2.5	2.5	2.0	3.0	2.2	2.8	0.2	0.36	1.28	0.976

Фрагмент	$\bar{x}$	Med	$X_{\min}$	$X_{\max}$	$Q_{25}$	$Q_{75}$	$s^2$	A	E	W
CH <sub>3</sub> O	4.1	4.1	3.5	4.5	3.8	4.4	0.2	-0.65	0.71	0.979
CH <sub>n</sub>	22.5	23.6	17.6	25.1	19.8	25.1	12.6	-1.15	0.21	0.852
$\Sigma C_{Ar}$	33.4	33.2	26.0	41.3	29.6	37.3	39.1	0.22	1.52	0.948
$\Sigma C_{Carb}$	16.3	15.0	14.2	21.0	14.4	18.2	10.2	1.85	3.46	0.761
<b>ГК углей (n = 5)</b>										
C=O	2.0	2.7	0.5	3.1	1.0	2.9	1.4	-0.64	-2.68	0.831
COO	16.3	16.6	15.0	17.7	15.2	16.9	1.3	-0.06	-2.13	0.916
C <sub>Ar</sub> O	15.8	17.9	10.0	19.3	13.0	19.0	17.1	-0.83	-1.63	0.851
C <sub>Ar</sub>	45.9	47.8	38.0	52.8	43.0	48.0	31.6	-0.42	-0.15	0.965
OCO	1.4	0.0	0.0	4.8	0.0	2.1	4.5	1.43	1.21	0.762
CHO	1.8	1.1	0.0	6.9	0.0	1.1	8.4	2.04	4.29	<b>0.703</b>
CH <sub>2</sub> O	0.6	1.0	0.1	1.0	0.1	1.0	0.2	-0.61	-3.33	<b>0.684</b>
CH <sub>3</sub> O	2.7	2.7	0.2	6.0	1.6	3.0	4.6	0.80	1.36	0.953
CH <sub>n</sub>	13.3	10.8	5.2	21.0	8.9	20.8	51.7	0.25	-2.68	0.865
$\Sigma C_{Ar}$	61.8	57.8	56.0	71.9	57.3	65.9	47.2	0.98	-0.95	0.847
$\Sigma C_{Carb}$	3.8	1.2	1.0	12.7	1.0	3.3	25.5	2.05	4.22	<b>0.681</b>
<b>Объединенная выборка (n = 58)</b>										
C=O	2.6	2.4	0.5	7.3	1.7	3.2	1.6	1.046	2.087	–
COO	15.4	15.4	8.6	23.0	14.2	17.0	7.7	-0.258	0.538	–
C <sub>Ar</sub> O	11.1	10.3	4.4	20.6	8.1	13.1	14.1	0.636	-0.162	–
C <sub>Ar</sub>	32.0	31.8	19.0	52.8	25.9	35.3	55.6	0.826	0.357	–
OCO	3.3	3.0	0.0	9.6	2.0	4.1	3.8	0.884	1.065	–
CHO	11.1	10.5	0.0	26.6	8.0	12.5	33.3	0.780	1.339	–
CH <sub>2</sub> O	2.4	2.5	0.1	5.6	2.0	3.0	1.1	0.452	1.704	–
CH <sub>3</sub> O	3.7	3.8	0.2	7.4	2.7	4.5	2.0	0.075	0.384	–
CH <sub>n</sub>	18.4	18.3	5.2	28.9	15.9	21.6	21.9	-0.206	0.168	–
$\Sigma C_{Ar}$	43.1	42.8	26.0	71.9	34.9	48.0	90.4	0.657	0.495	–
$\Sigma C_{Carb}$	16.8	15.6	1.0	37.2	12.5	20.1	63.8	0.612	1.070	–

–,  $X_{\min}$ ,  $X_{\max}$  и Med – средние, мин. и макс. значения и медиана;

$Q_{25}$  и  $Q_{75}$  – нижние и верхние квартили;

A и E – коэффициенты асимметрии и эксцесса; W – значение критерия Уилка-Шапиро.

\* Жирным шрифтом выделены  $W < (W_{0.05})_{\text{крит}}$ .

Описательные статистики ПМР-данных по распределению Н  
в структуре гумусовых кислот (содержание Н в составе фрагментов  
дано в % от общего Н)

Фрагмент	$\bar{x}$	Med	$X_{\min}$	$X_{\max}$	$Q_{25}$	$Q_{75}$	$s^2$	A	E	W
<b>ГФК торфа (n = 13)</b>										
COOH	8.8	9.0	6.0	10.0	8.0	10.0	1.7	-0.84	-0.02	<b>0.831</b>
ArOH	8.1	9.0	3.0	13.0	8.0	9.0	7.2	-0.46	0.40	0.909
ArH	13.2	13.0	9.0	20.0	10.0	16.0	11.1	0.38	-0.17	0.914
AlkOH	8.5	9.0	2.0	15.0	9.0	9.0	9.9	-0.47	2.31	<b>0.757</b>
CHO	32.6	32.0	29.0	38.0	30.0	35.0	9.1	0.31	-1.32	0.906
AlkH	29.2	29.0	22.0	38.0	28.0	31.0	13.1	0.62	3.18	0.898
H <sub>Ar</sub>	0.2	0.2	0.1	0.2	0.2	0.2	0.002	0.03	-0.79	0.977
H <sub>Carb</sub>	0.4	0.4	0.4	0.5	0.4	0.5	0.001	0.43	-0.95	0.934
<b>ГК торфа (n = 8)</b>										
COOH	7.3	7.0	6.0	11.0	6.0	7.5	2.8	1.94	4.18	<b>0.753</b>
ArOH	10.9	10.5	6.0	17.0	9.0	12.5	11.6	0.58	0.59	0.954
ArH	14.8	14.5	12.0	18.0	13.0	16.5	4.8	0.10	-1.09	0.943
AlkOH	4.3	3.5	0.0	9.0	2.5	6.5	9.1	0.48	-0.47	0.946
CHO	32.1	32.5	24.0	38.0	29.5	35.5	21.0	-0.63	-0.11	0.960
AlkH	31.0	31.0	29.0	35.0	29.5	31.5	3.7	1.28	2.31	0.869
H <sub>Ar</sub>	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.001	0.29	-0.98	0.931
H <sub>Carb</sub>	0.4	0.4	0.3	0.5	0.4	0.4	0.001	-0.91	0.82	0.904
<b>ФК торфа (n = 7)</b>										
COOH	8.9	9.0	6.0	11.0	7.0	10.0	3.1	-0.71	-0.53	0.919
ArOH	5.7	6.0	2.0	9.0	4.0	7.0	5.2	-0.33	0.06	0.981
ArH	12.0	12.0	8.0	16.0	11.0	13.0	5.7	0.00	2.07	0.923
AlkOH	8.6	8.0	3.0	16.0	5.0	11.0	19.6	0.54	-0.20	0.958
CHO	36.6	37.0	29.0	43.0	33.0	41.0	22.6	-0.28	-0.34	0.986
AlkH	27.4	27.0	16.0	38.0	23.0	34.0	56.3	-0.09	-0.64	0.977
H <sub>Ar</sub>	0.2	0.2	0.1	0.2	0.1	0.2	0.001	-0.80	0.46	0.918
H <sub>Carb</sub>	0.5	0.5	0.4	0.6	0.4	0.6	0.006	-0.31	-1.43	0.945
<b>ГК почв (n = 6)</b>										
COOH	7.8	8.0	4.0	11.0	7.0	9.0	5.4	-0.57	1.50	0.955
ArOH	7.7	8.0	5.0	9.0	7.0	9.0	2.7	-0.86	-0.30	0.821
ArH	13.7	13.0	10.0	20.0	12.0	14.0	11.9	1.44	2.72	0.866
AlkOH	8.7	6.5	4.0	21.0	5.0	9.0	39.5	2.06	4.47	<b>0.747</b>

Фрагмент	$\bar{x}$	Med	$X_{\min}$	$X_{\max}$	$Q_{25}$	$Q_{75}$	$s^2$	A	E	W
CHO	26.8	27.0	22.0	32.0	24.0	29.0	12.6	0.08	-0.29	0.977
AlkH	35.2	35.5	31.0	39.0	32.0	38.0	11.0	-0.17	-2.20	0.917
$H_{Ar}$	0.2	0.2	0.2	0.3	0.2	0.2	0.002	1.99	4.09	<b>0.753</b>
$H_{Carb}$	0.4	0.4	0.3	0.4	0.4	0.4	0.001	-1.81	3.55	0.809

**ФК почв (n = 5)**

COOH	10.0	10.0	5.0	13.0	9.0	13.0	11.0	-0.82	0.14	0.897
ArOH	4.8	4.0	2.0	8.0	3.0	7.0	6.7	0.36	-2.41	0.915
ArH	9.4	10.0	4.0	13.0	9.0	11.0	11.3	-1.17	2.03	0.925
AlkOH	8.2	8.0	6.0	11.0	8.0	8.0	3.2	0.82	2.36	0.863
CHO	29.8	29.0	24.0	36.0	27.0	33.0	22.7	0.21	-1.27	0.978
AlkH	37.8	39.0	34.0	42.0	34.0	40.0	13.2	-0.20	-2.59	0.867
$H_{Ar}$	0.1	0.1	0.1	0.2	0.1	0.1	0.002	-1.43	3.01	0.853
$H_{Carb}$	0.4	0.4	0.3	0.5	0.4	0.4	0.002	0.41	-0.96	0.974

**Объединенная выборка (n = 39)**

COOH	8.5	9.0	4.0	13.0	7.0	10.0	4.2	0.10	-0.09	-
ArOH	7.7	8.0	2.0	17.0	5.0	9.0	10.3	0.41	0.80	-
ArH	12.9	13.0	4.0	20.0	11.0	15.0	10.6	-0.03	0.71	-
AlkOH	7.6	8.0	0.0	21.0	5.0	9.0	16.5	0.91	2.23	-
CHO	32.0	32.0	22.0	43.0	29.0	35.0	23.2	0.03	-0.28	-
AlkH	31.3	31.0	16.0	42.0	29.0	34.0	28.8	-0.33	0.70	-
$H_{Ar}$	0.2	0.2	0.1	0.3	0.2	0.2	0.002	-0.21	1.52	-
$H_{Carb}$	0.4	0.4	0.3	0.6	0.4	0.5	0.004	0.59	0.37	-

$\bar{x}$ ,  $X_{\min}$ ,  $X_{\max}$  и Med – средние, мин. и макс. значения и медиана;

$Q_{25}$  и  $Q_{75}$  – нижние и верхние квартили;

A и E- коэффициенты асимметрии и эксцесса; W - значение критерия Уилка-Шапиро.

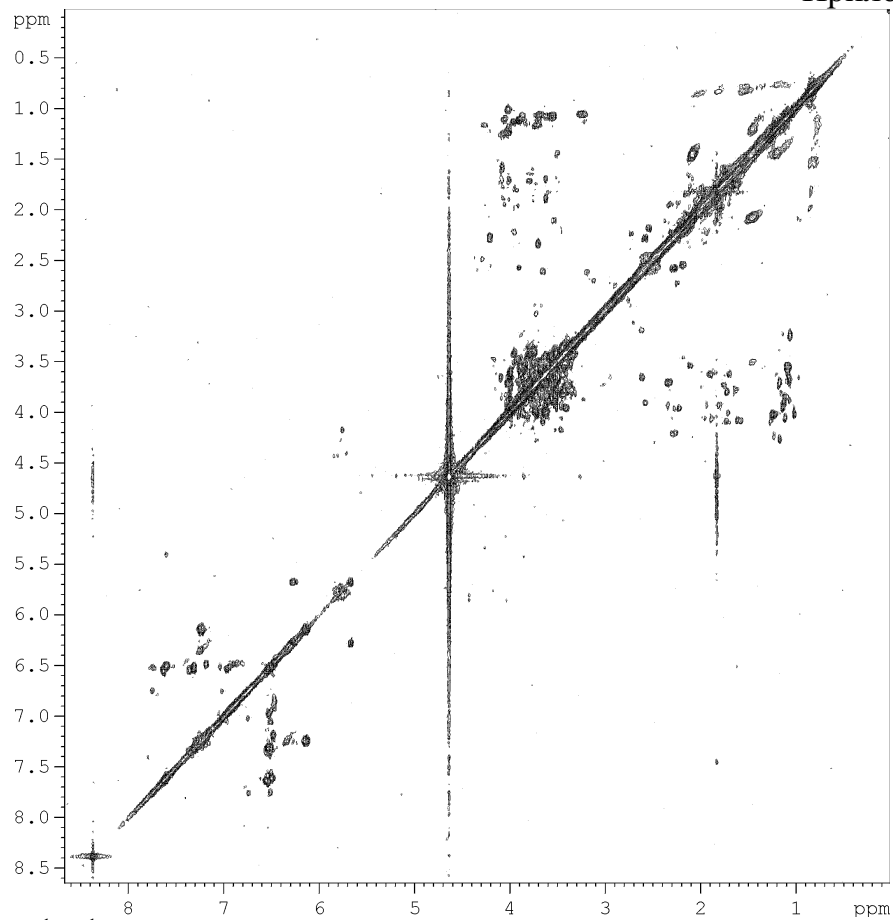
\* Жирным шрифтом выделены  $W < (W_{0.05})_{\text{крит}}$ .

## Фрагментный состав препаратов гумусовых кислот различного происхождения и фракционного состава

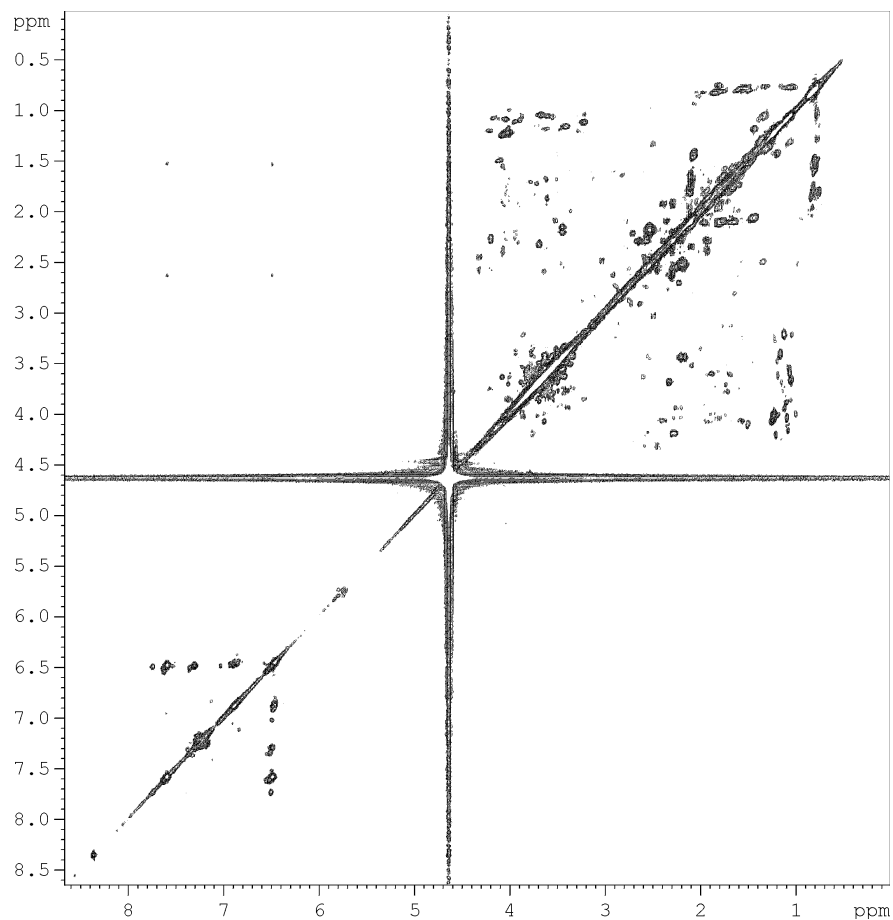
Шифр	CO	COOH	COOR	C <sub>Ar</sub> -OH	C <sub>Ar</sub> -OR	C <sub>Ar</sub> -H	C <sub>Ar</sub> -C	CH <sub>3</sub> O	SH-OH	CH <sub>2</sub> OH	C <sub>Alk</sub>	H/C <sub>Alk</sub>	H/C <sub>Ar</sub>	H/C <sub>Alk-O</sub>
ГК дерново-подзолистых почв														
SHA-Pw94	1.0	9.0	8.0	7.0	5.0	13.4	18.6	3.0	14.3	2.7	18.0	1.88	0.30	1.37
SHA-PwN	2.0	8.2	6.8	7.1	5.9	12.3	17.7	4.5	12.9	2.6	20.0	1.94	0.29	1.48
ГК чернозема														
SHA-Cmg	2.0	9.6	5.4	7.4	3.1	17.5	28.0	3.0	7.5	1.5	15.0	1.87	0.27	1.60
ФК дерново-подзолистых почв														
SFA-Pw94	3.0	13.0	7.0	7.5	4.5	8.5	13.5	3.0	13.5	2.5	24.0	1.62	0.25	1.26
SFA-Pg94	3.0	14.2	3.8	8.4	3.6	10.0	19.0	3.5	13.0	2.5	19.0	1.88	0.26	1.49
ГФК торфа														
PHF-T594	1.0	8.4	7.6	5.3	4.7	10.5	17.5	3.0	16.0	3.0	23.0	1.74	0.29	1.44
PHF-T694	2.0	8.9	5.1	9.4	4.6	14.6	23.4	3.0	12.5	2.5	14.0	1.82	0.26	1.52
PHF-T794	2.0	9.6	7.4	8.7	6.3	15.4	18.6	4.0	11.0	2.0	15.0	1.67	0.30	1.70
PHF-T1094	2.0	8.9	7.1	10.4	4.6	13.4	19.6	4.0	11.5	2.5	16.0	1.79	0.28	1.65
PHF-TH94	2.0	7.9	7.1	7.9	6.1	12.9	18.1	4.0	14.0	3.0	17.0	1.74	0.28	1.51
PHF-TT94	3.0	8.6	6.4	8.6	4.4	12.4	19.6	3.5	13.5	3.0	17.0	1.75	0.26	1.41
PHa-THTo	3.0	7.3	5.7	8.4	4.6	12.6	18.4	5.0	15.8	3.2	16.0	1.96	0.30	1.48
ГФК природных вод														
AHF-RMX8	2.0	13.5	5.5	5.6	5.4	7.9	17.1	5.0	10.0	4.0	24.0	1.87	0.25	1.65
AHF-RI	3.0	14.2	3.8	9.1	2.9	8.5	17.5	5.5	8.5	4.0	23.0	1.78	0.26	1.83
AFA-GFg1	1.0	12.6	3.4	4.6	4.4	7.4	17.6	3.0	15.5	4.5	26.0	1.82	0.25	1.39
AFA-SHo10	1.0	11.0	7.0	9.0	4.0	11.0	19.0	3.0	13.5	4.0	17.5	1.78	0.26	1.42



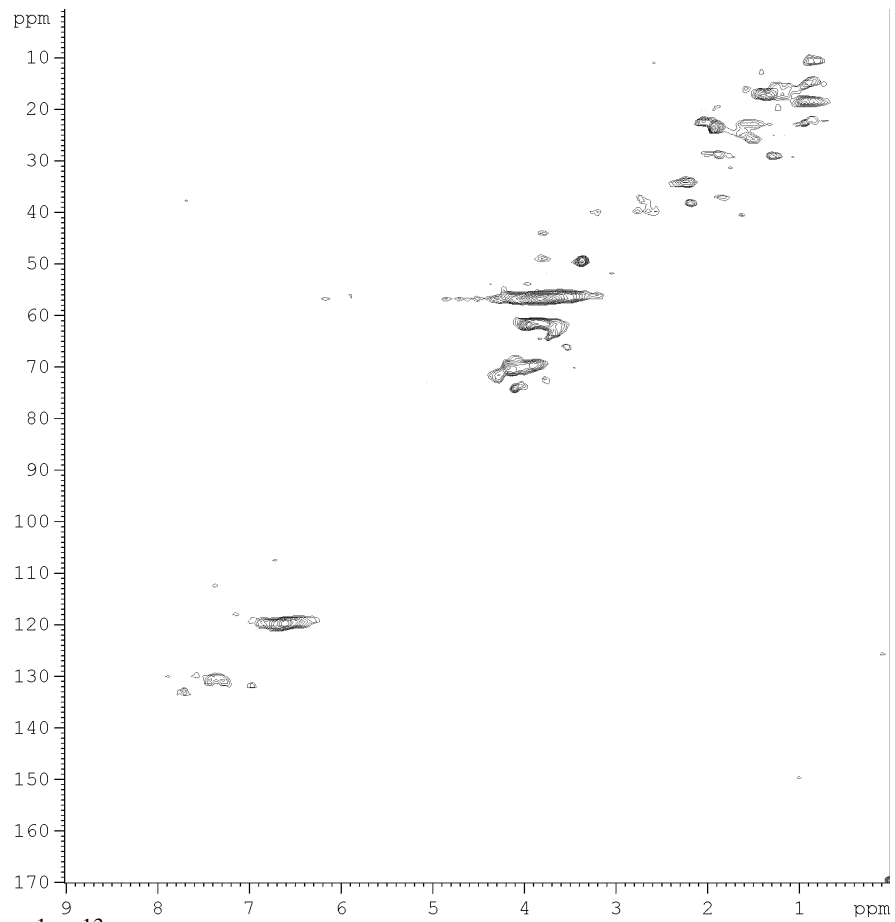
Шифр	CO	COOH	COOR	C <sub>Ar-OH</sub>	C <sub>Ar-OR</sub>	C <sub>Ar-H</sub>	C <sub>Ar-C</sub>	CH <sub>3</sub> O	CH-OH	CH <sub>2</sub> OH	C <sub>Alk</sub>	H/C <sub>Alk</sub>	H/C <sub>Ar</sub>	H/C <sub>Alk-O</sub>
ГК угля														
CHA-AGK	1.0	13.1	2.9	6.1	3.9	21.5	26.5	4.0	0.0	0.0	21.0	1.94	0.35	3.04
CHA-ALD	1.0	12.0	3.5	8.5	4.0	19.5	23.5	6.0	0.0	1.0	21.0	1.88	0.35	2.79
Другое														
SHF-Co94	1.0	10.8	7.2	7.2	5.8	12.9	19.1	4.0	15.0	3.0	14.0	1.92	0.30	1.53
SDFA-BS1	3.0	14.7	2.3	8.6	2.4	12.2	25.8	5.5	8.5	2.0	15.0	2.03	0.25	1.84
PHF-TMu4	2.0	10.8	6.2	8.6	3.4	9.7	16.3	2.0	22.0	6.0	13.0	1.91	0.28	1.29



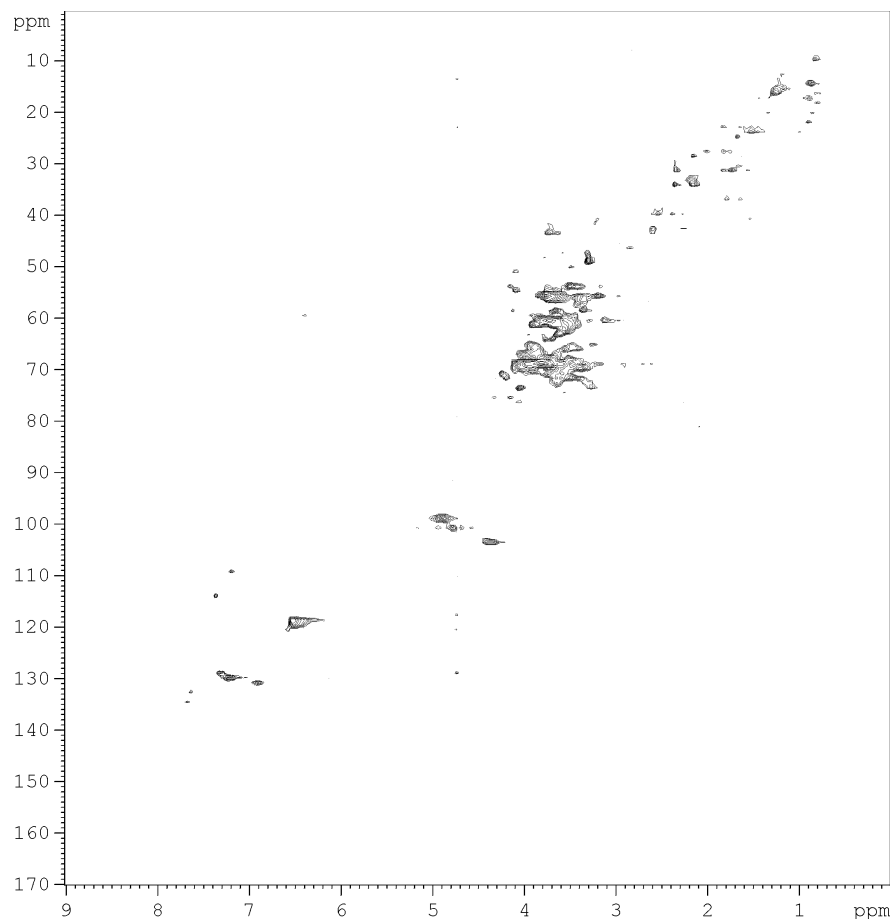
$^1\text{H}, ^1\text{H}$  COSY спектр ГК низинного торфа PHA-T10L98.



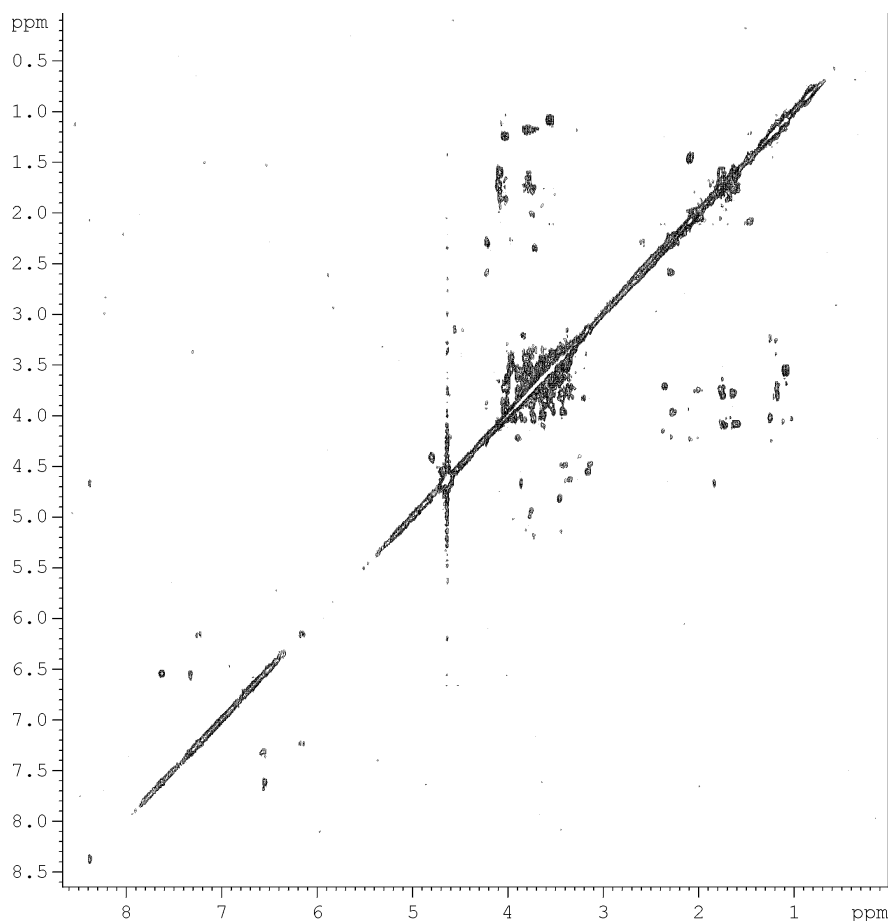
$^1\text{H}, ^1\text{H}$  COSY спектр гидролизующей части (PHHD-T10L98).



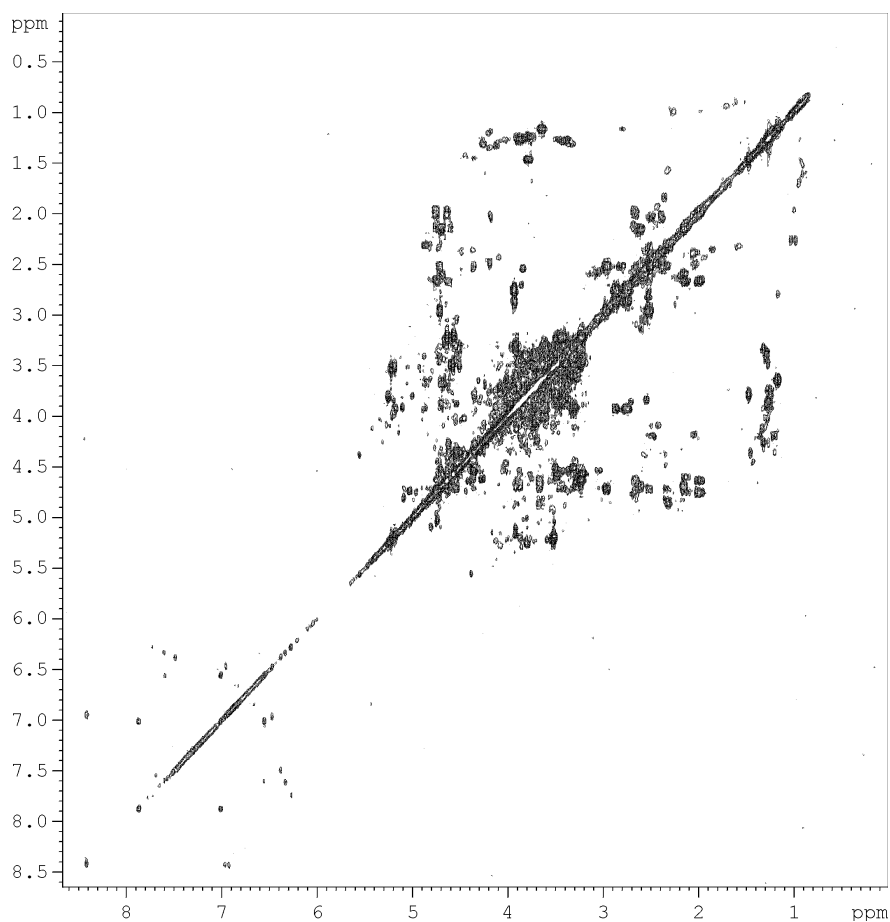
$^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  HSQC спектр ГК низинного торфа РНА-Т10L98.



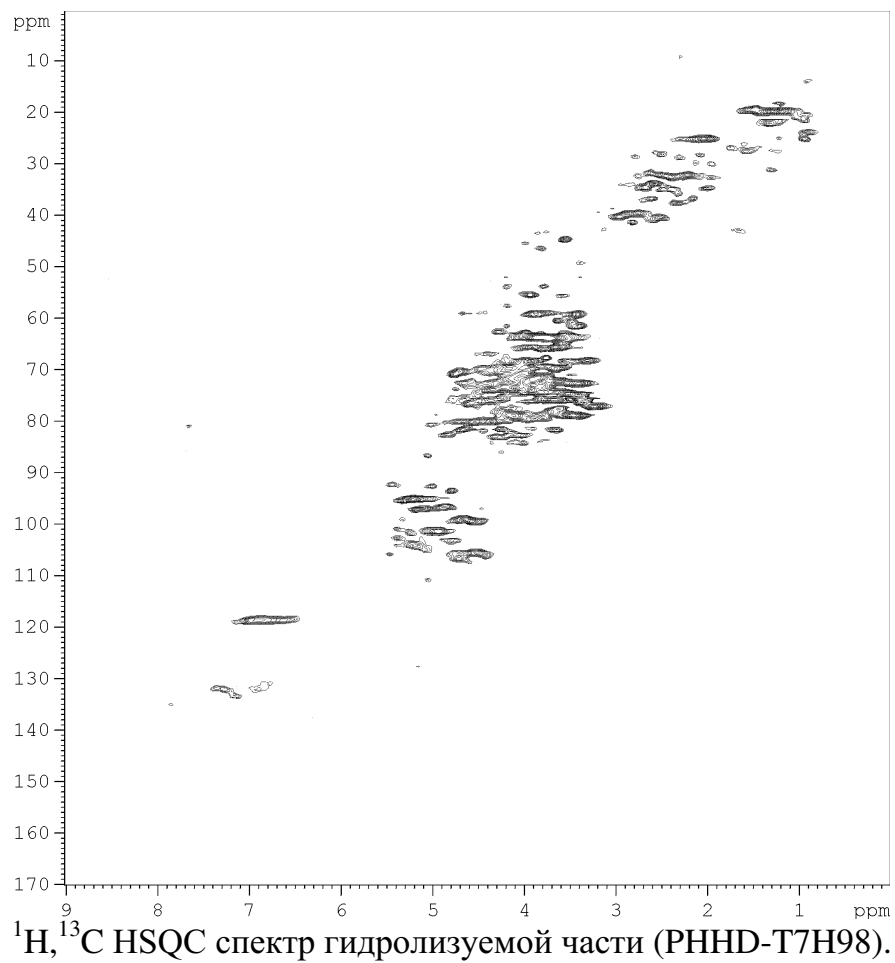
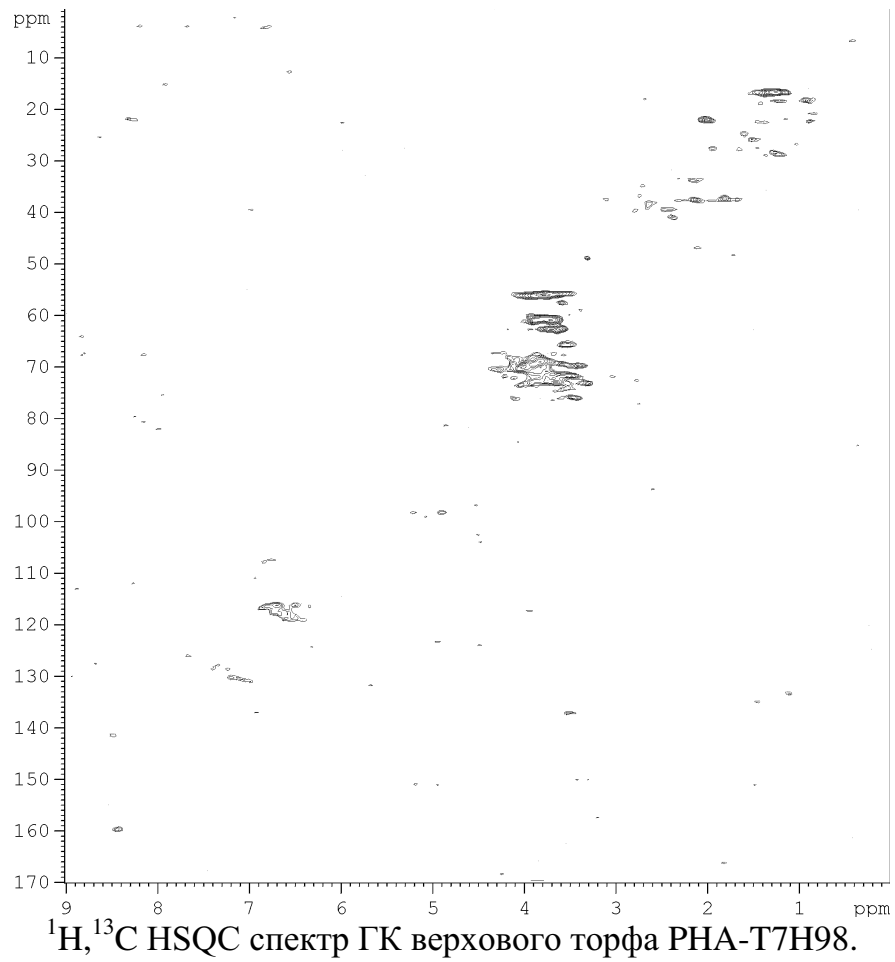
$^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  HSQC спектр гидролизуемой части (PHND-T10L98).



$^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  COSY спектр ГК верхового торфа РНА-Т7Н98.



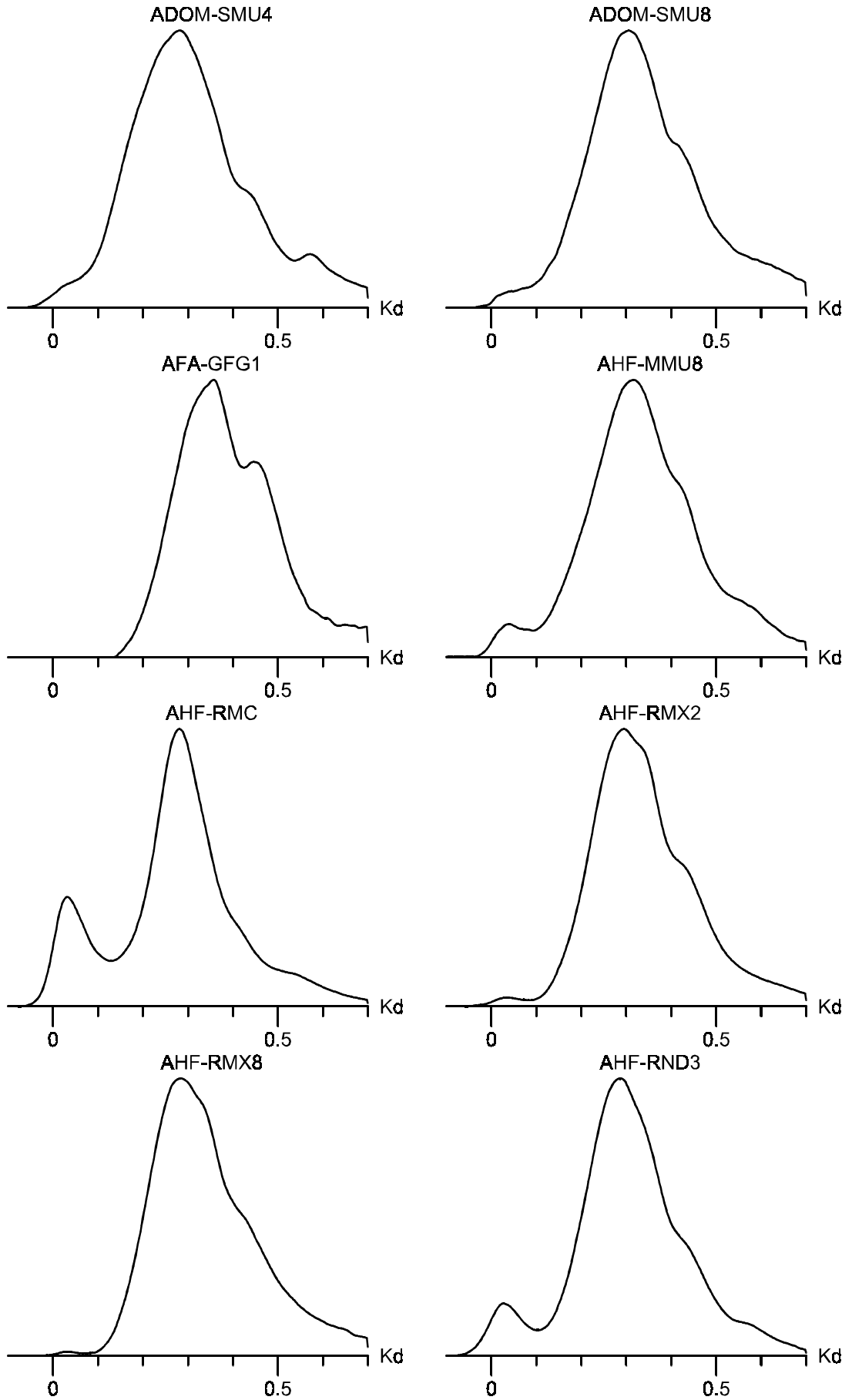
$^1\text{H}$ ,  $^1\text{H}$  COSY спектр гидролизуемой части (PHND-Т7Н98).



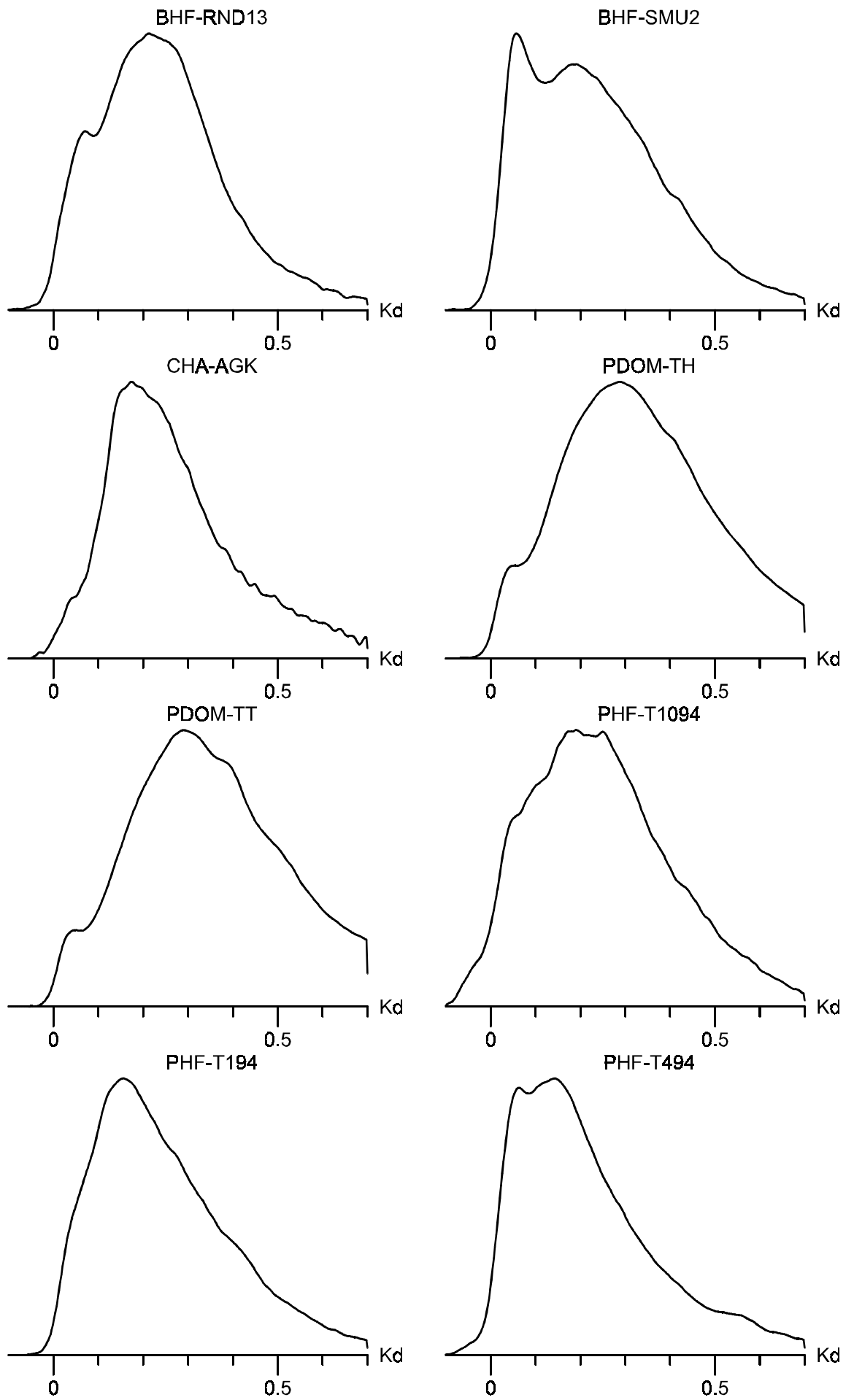
Величина неэксклюзионного эффекта ( $\Delta K_d$ ) для индивидуальных органических соединений в выбранной хроматографической системе

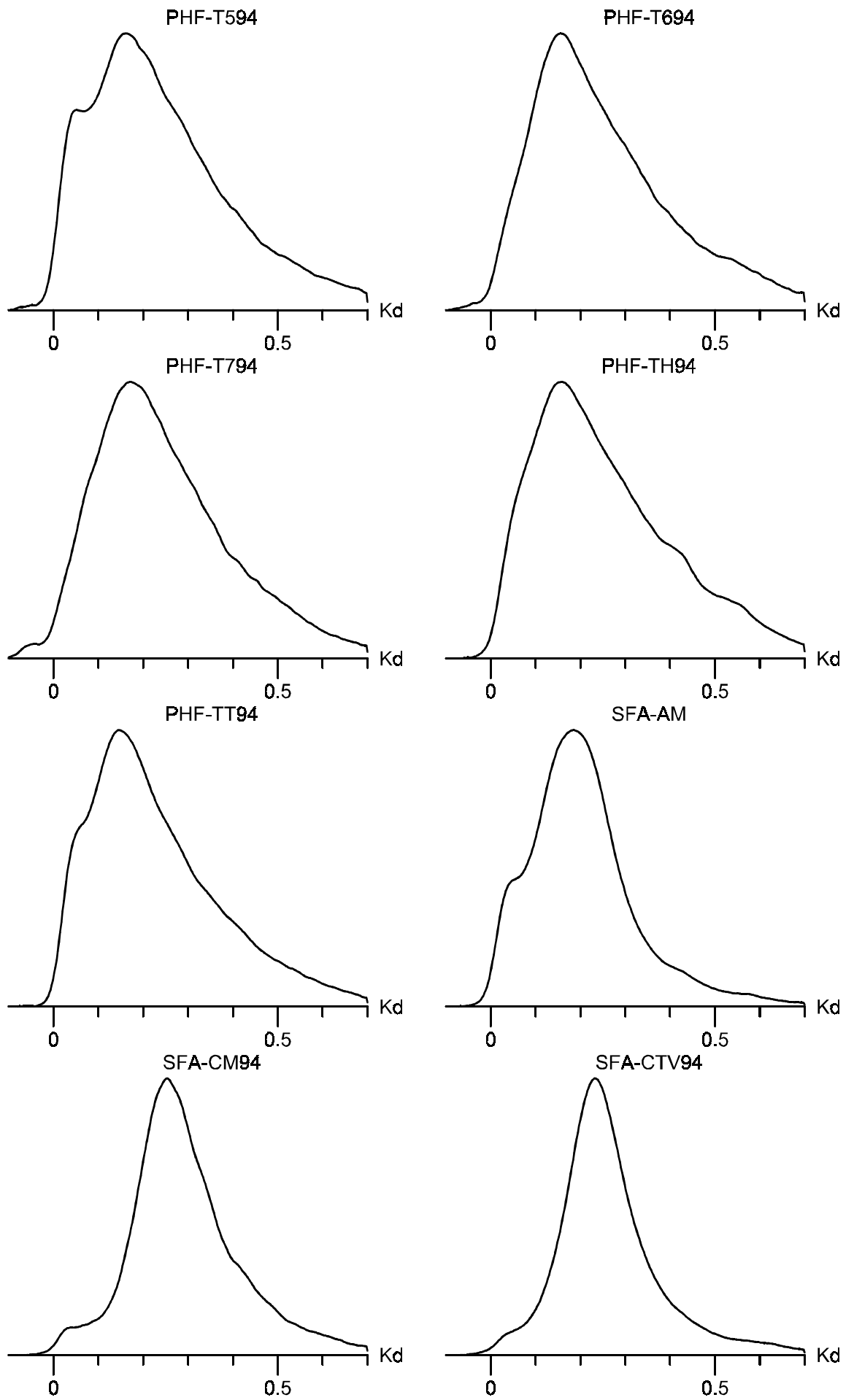
No	Брутто-формула	Соединение	$\Delta K_d$	No	Брутто-формула	Соединение	$\Delta K_d$
1	$C_7H_6O_4$	3,4-Дигидрокибензойная кислота	-2.21	33	$C_7H_{12}O_6$	Хинная кислота	0.23
2	$C_7H_6O_4$	3,5-Дигидрокибензойная кислота	-2.21	34	$C_4H_6O_2$	Кротоновая кислота	0.23
3	$C_9H_{10}O_5$	Сиреневая кислота	-0.41	35	$C_4H_6O_2$	Метакриловая кислота	0.23
4	$C_7H_6O_5$	3,4,5-Тригидроксибензойная кислота	-2.55	36	$C_6H_{10}O_7$	Глюкуроновая кислота	0.24
5	$C_7H_6O_3$	3-Гидрокибензойная кислота	-0.74	37	$C_4H_8O_2$	Масляная кислота	0.25
6	$C_7H_6O_3$	4-Гидрокибензойная кислота	-0.74	38	$C_9H_8O_4$	Карбоксифенил-уксусная к-та	0.27
7	$C_9H_{10}O_2$	Гидрокоричная кислота	-0.31	39	$C_{10}H_8O_4$	2-Карбоксикоричная кислота	0.27
8	$C_9H_{11}O_2N$	Фенилаланин	-0.29	40	$C_{10}H_{10}O_4$	Бензилмалоновая кислота	0.28
9	$C_4H_8O_2$	1,4-Диоксан	-0.19	41	$C_{10}H_{10}O_4$	1,2-Фенилендиуксусная к-та	0.28
10	$C_3H_6O$	Ацетон	-0.15	42	$C_3H_6O_3$	Молочная кислота	0.29
11	$C_7H_6O_2$	Бензойная кислота	-0.14	43	$C_5H_9O_4N$	Глутаминовая кислота	0.30
12	$C_2H_6O$	Этанол	-0.08	44	$C_4H_7O_4N$	Аспаргиновая кислота	0.31
13	$C_5H_{11}O_2NS$	Метионин	-0.05	45	$C_4H_4O_4$	Малеиновая кислота	0.32

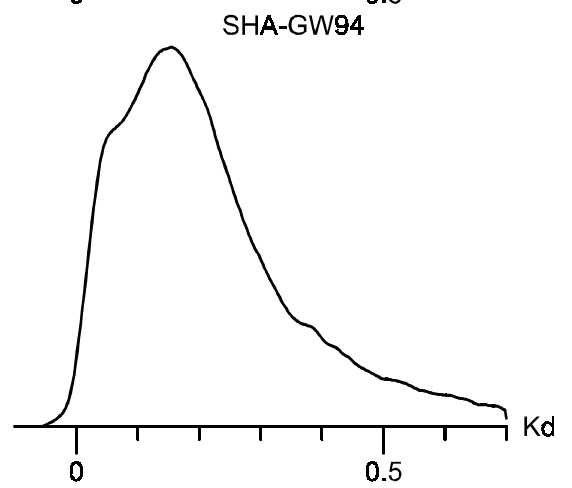
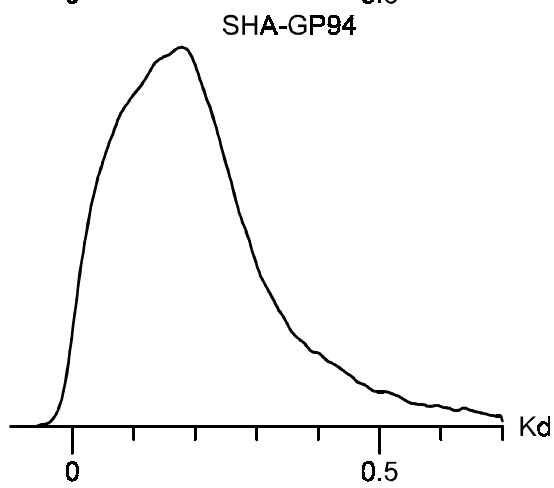
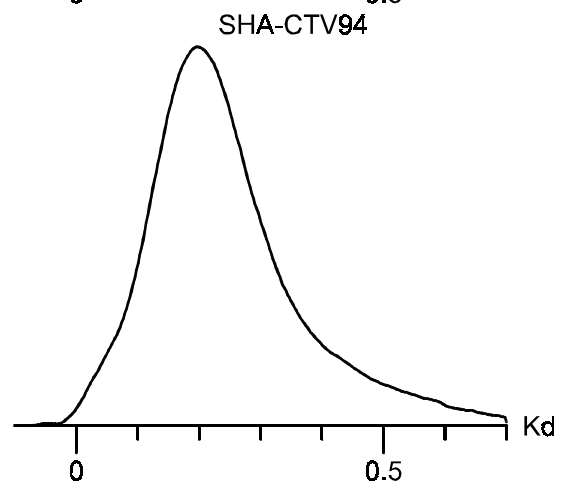
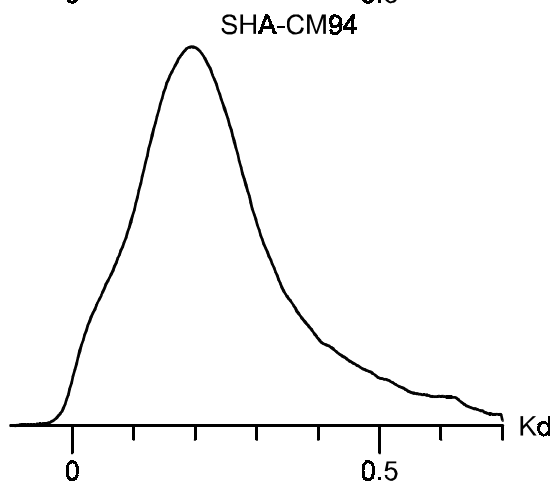
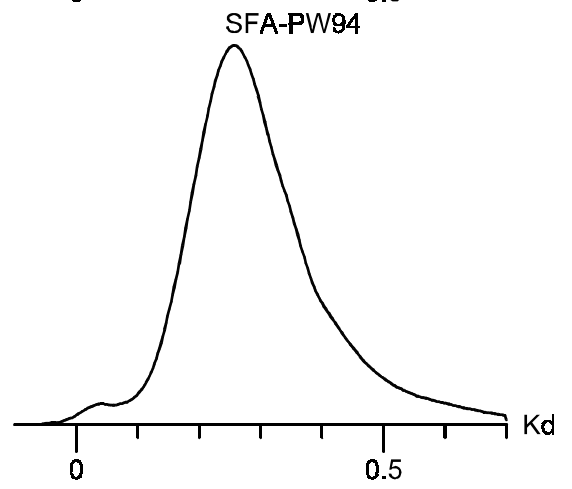
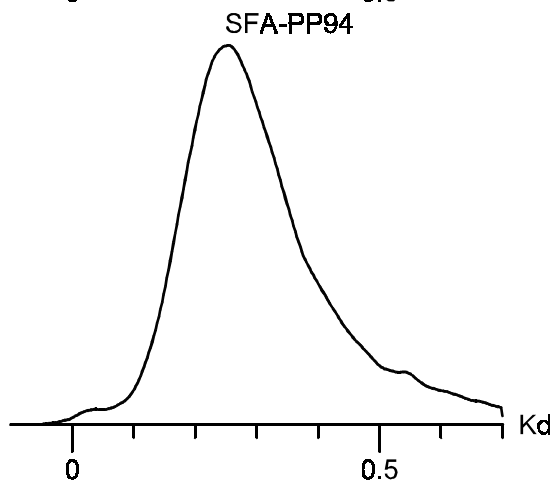
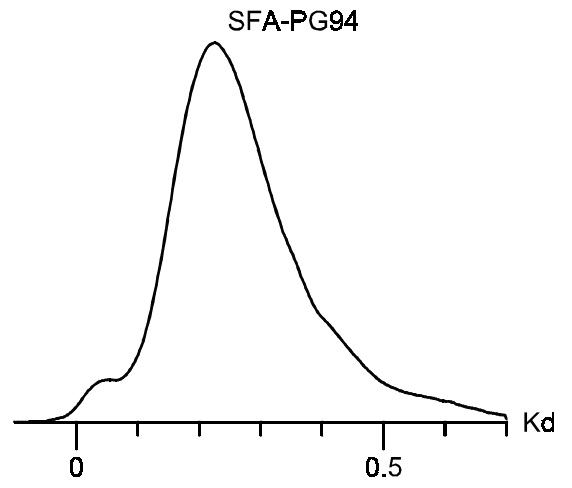
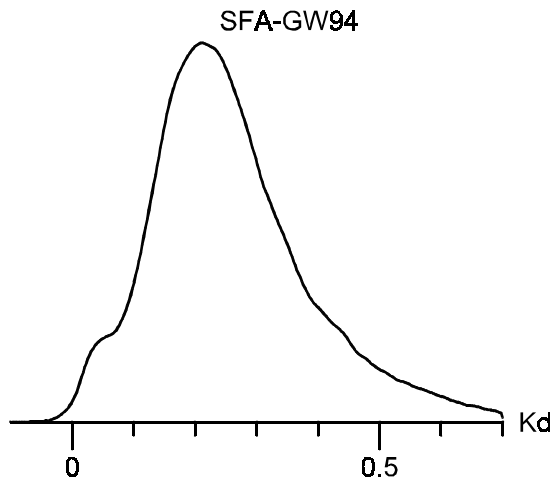
14	$C_8H_8O_2$	Фенилуксусная кислота	-0.04	46	$C_8H_6O_4$	Фталевая кислота	0.32
15	$C_{18}H_{16}O_5$	4-[4-(2-Карбоксибензоил)-	-0.04	47	$C_8H_6O_4$	Терефталевая кислота	0.32
16	$C_{18}H_{16}O_5$	Фенилбутановая кислота	-0.04	48	$C_3H_4O_2$	Акриловая кислота	0.32
17	$C_6H_{13}O_2N$	Лейцин	-0.03	49	$C_2H_2O_3$	Глиоксальная кислота	0.33
18	$C_6H_{12}O_6$	Глюкоза	-0.01	50	$C_3H_6O_2$	Пропионовая кислота	0.34
19	$C_3H_8O_3$	Глицерин	0.00	51	$C_2H_4O_3$	Гликолевая кислота	0.33
20	$CH_4O$	Метанол	0.02	52	$C_2H_4O_2$	Уксусная кислота	0.35
21	$C_9H_8O_4$	Ацетилсалициловая кислота	0.03	53	$C_6H_{10}O_8$	Глукарная кислота	0.35
22	$C_8H_8O_3$	2-Метоксибензойная кислота	0.04	54	$CH_2O_2$	Муравьиная кислота	0.38
23	$C_5H_{11}ONS$	Валин	0.05	55	$C_6H_{10}O_4$	Адипиновая кислота	0.40
24	$C_6H_{12}O_2$	Гексановая кислота	0.05	56	$C_7H_{12}O_4$	Пимелиновая кислота	0.41
25	$C_6H_{12}O_4N_2S_2$	Цистин	0.07	57	$C_5H_8O_4$	Глутаровая кислота	0.41
26	$C_5H_9O_2N$	Пролин	0.07	58	$C_5H_6O_4$	Глутаконовая кислота	0.41
27	$C_4H_9NO_3$	Треонин	0.09	59	$C_4H_6O_6$	Винная кислота	0.42
28	$C_3H_7O_3N$	Серин	0.11	60	$C_6H_8O_7$	Лимонная кислота	0.42
29	$C_3H_7O_2N$	Аланин	0.12	61	$C_4H_6O_5$	Малеиновая кислота	0.42
30	$C_2H_5O_2N$	Глицин	0.15	62	$C_4H_6O_4$	Янтарная кислота	0.43
31	$C_5H_{10}O_2$	Изовалериановая кислота	0.20	63	$C_3H_4O_4$	Малоновая кислота	0.44
32	$C_5H_{10}O_2$	Валериановая кислота	0.20	64	$C_2H_2O_4$	Щавелевая кислота	0.47

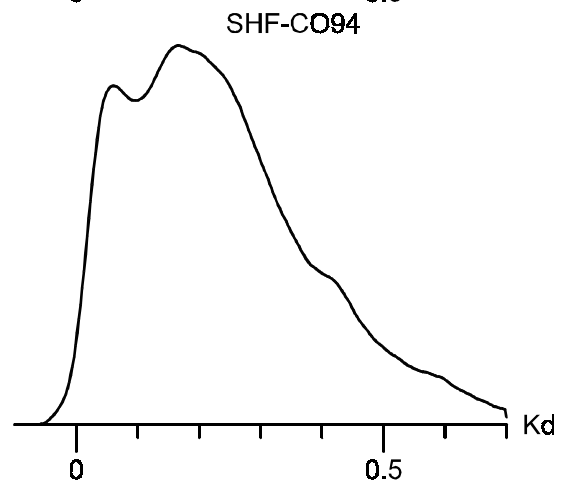
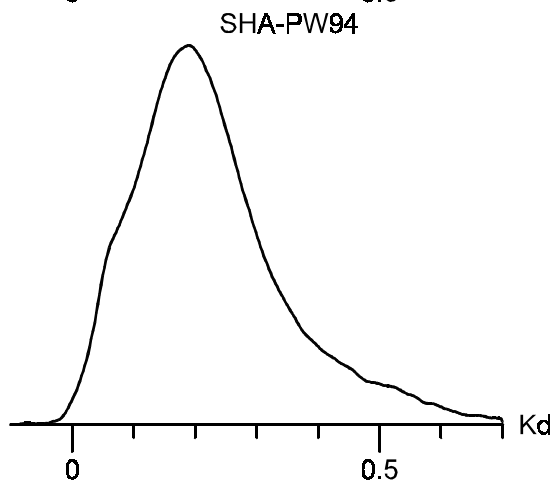
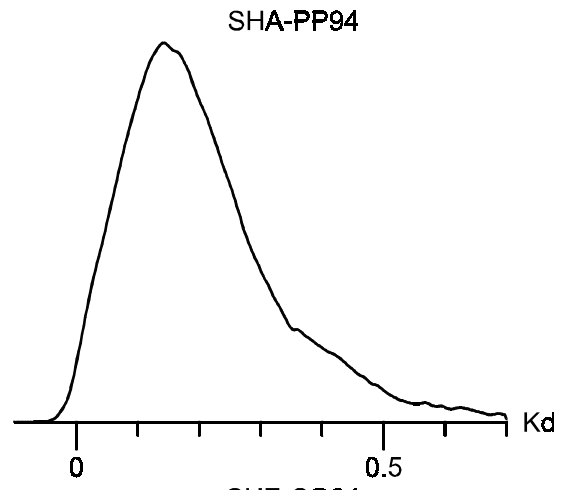
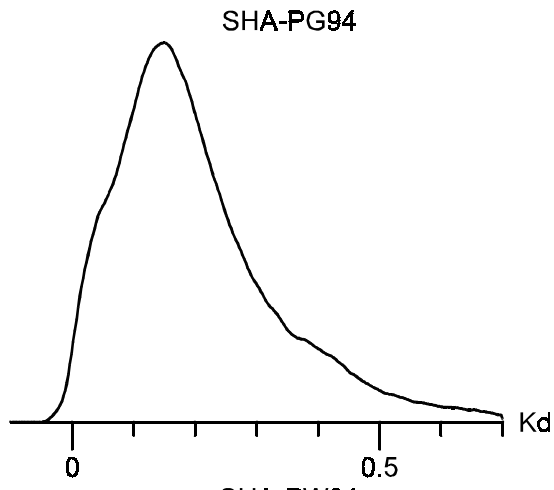


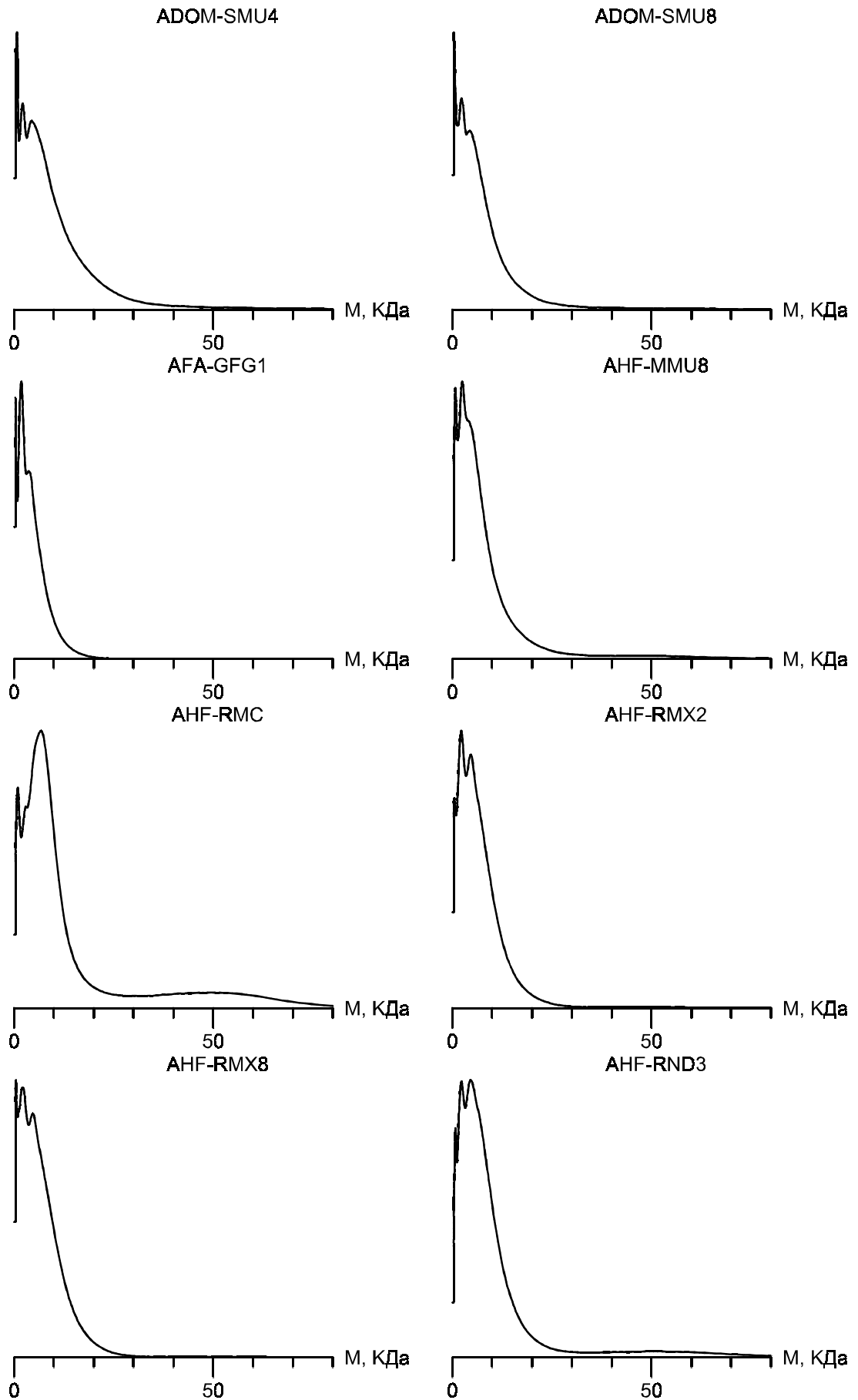




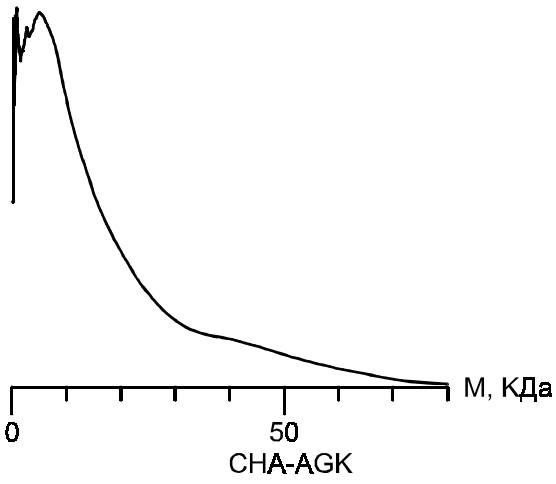




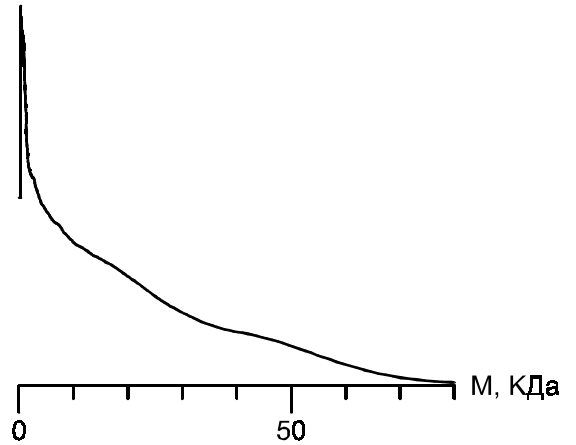
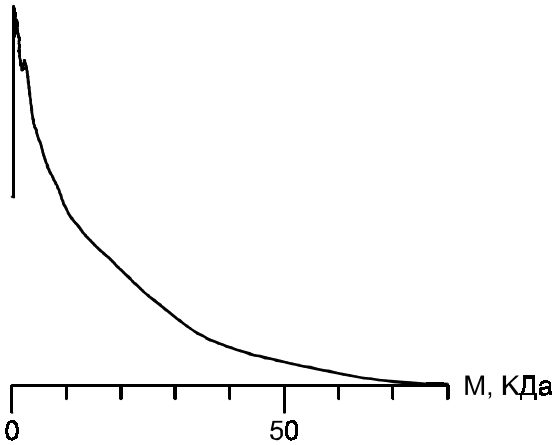
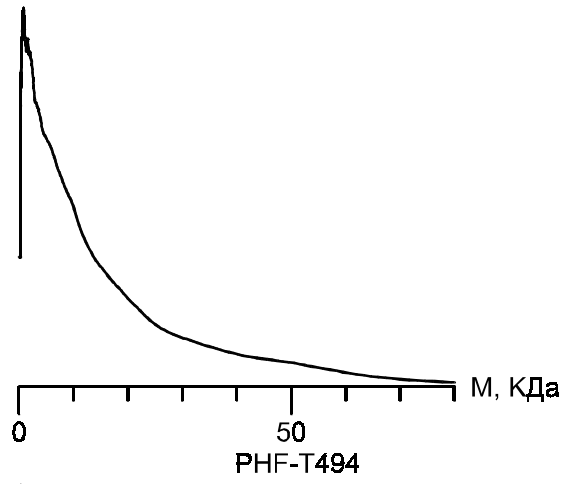
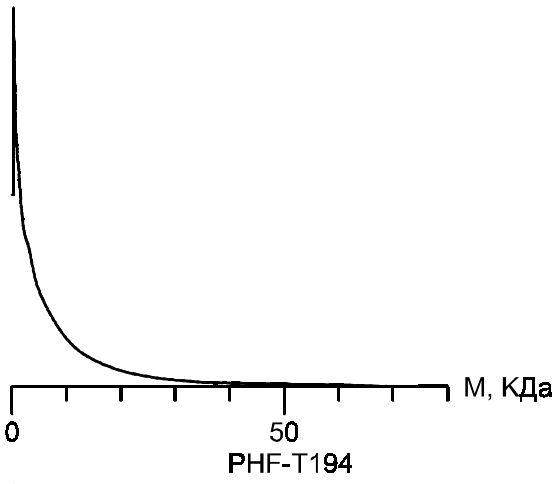
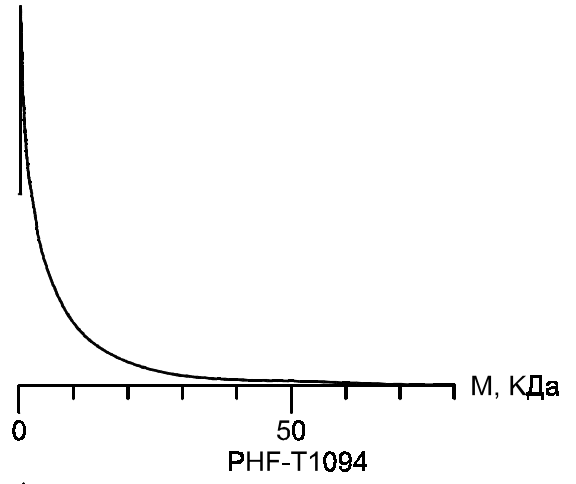
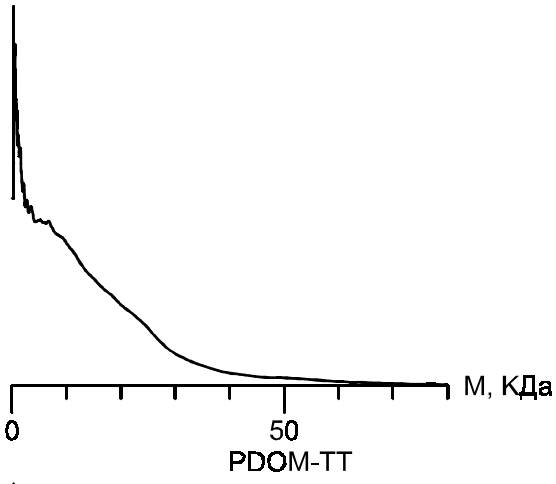
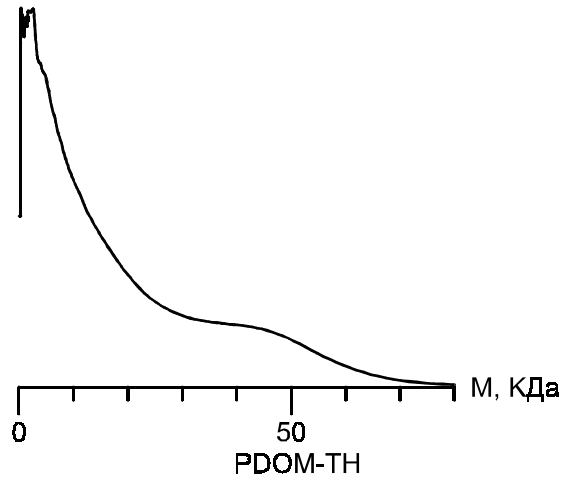




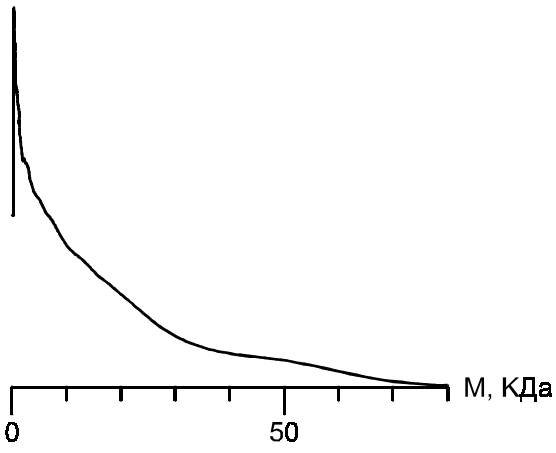
BHF-RND13



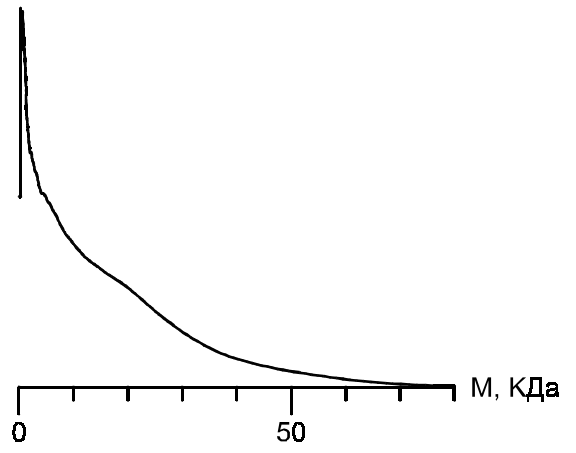
BHF-SMU2



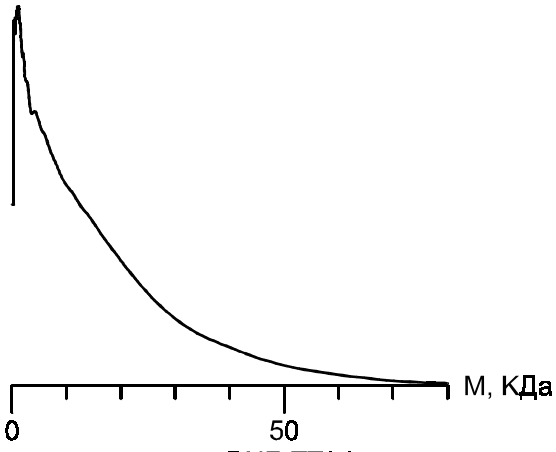
PHF-T594



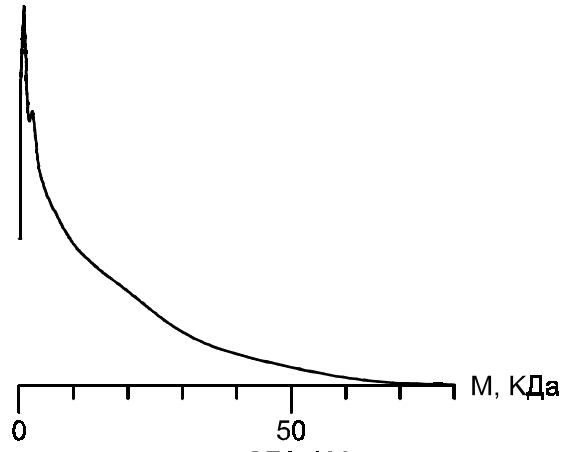
PHF-T694



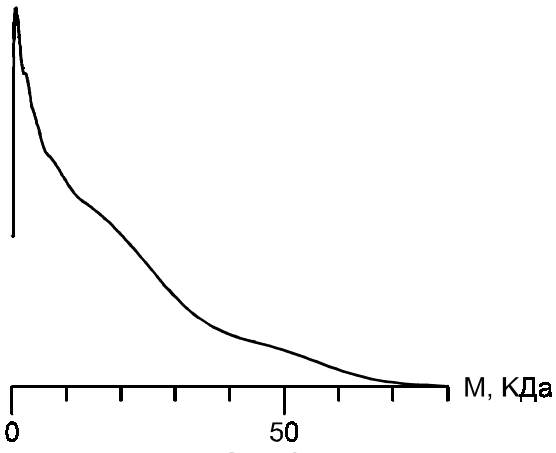
PHF-T794



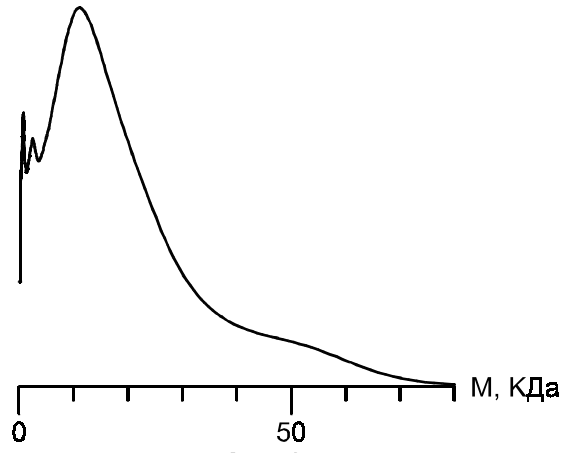
PHF-T894



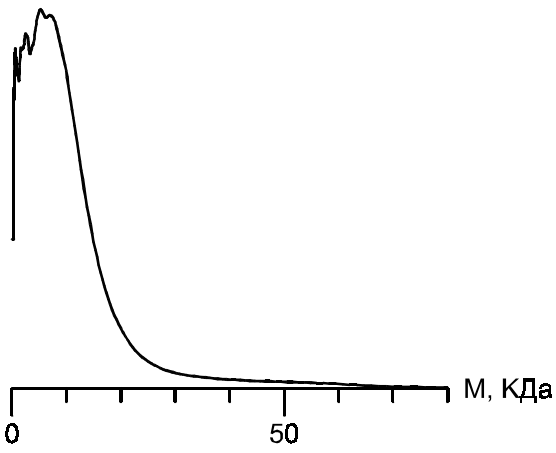
PHF-TT94



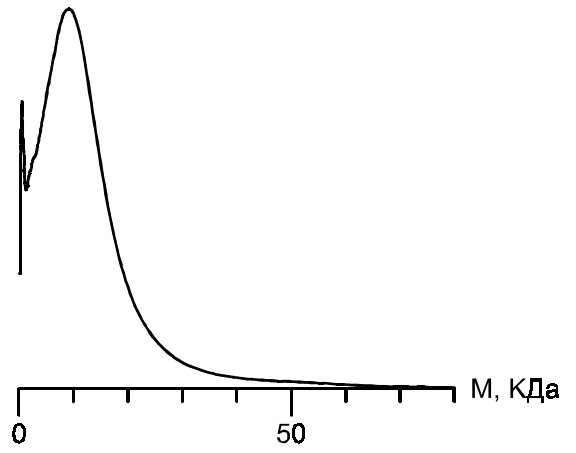
SFA-AM

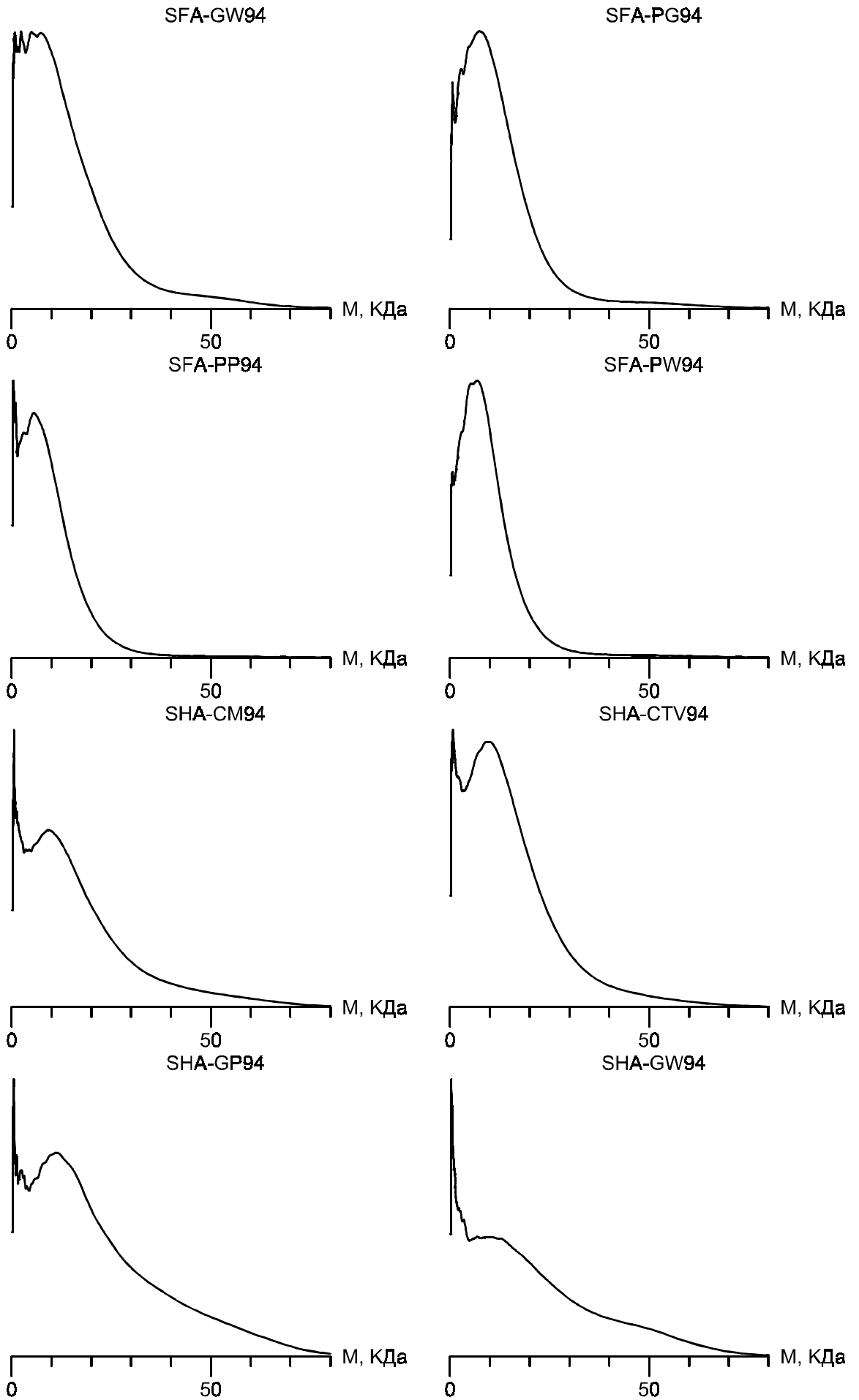


SFA-CM94



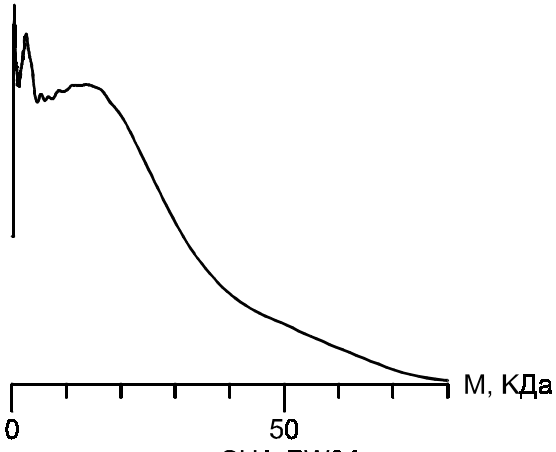
SFA-CTV94



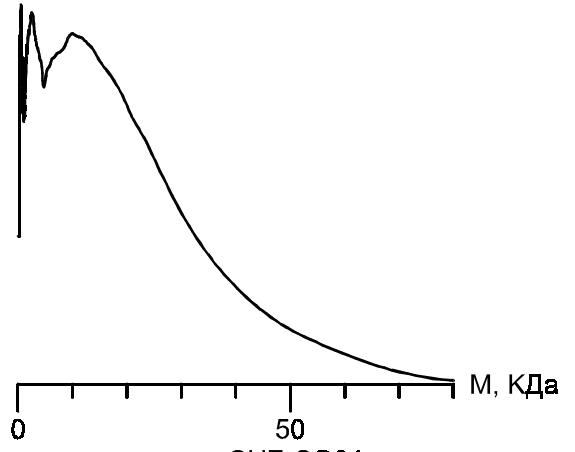




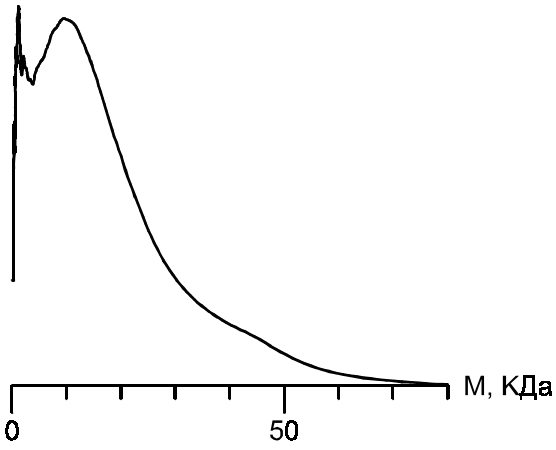
SHA-PG94



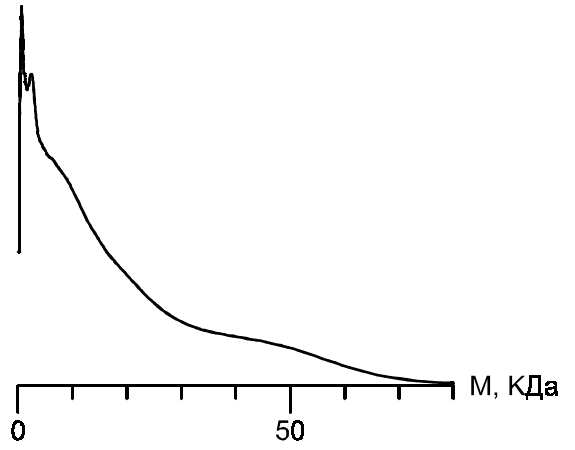
SHA-PP94



SHA-PW94

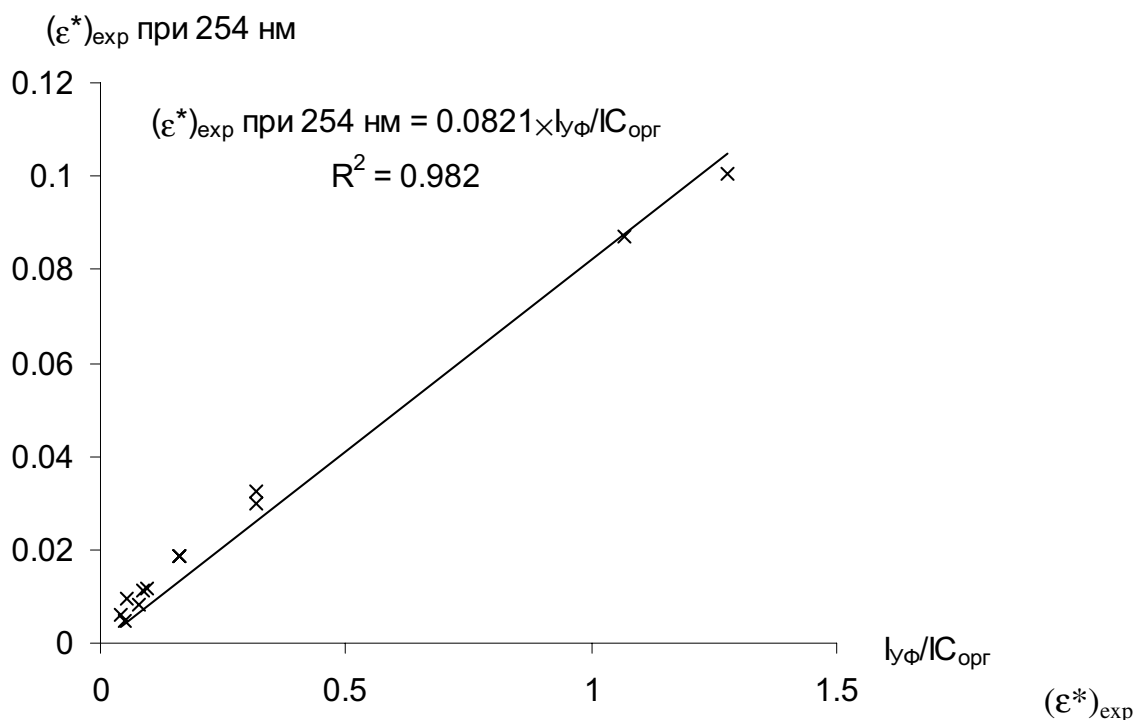


SHF-CO94

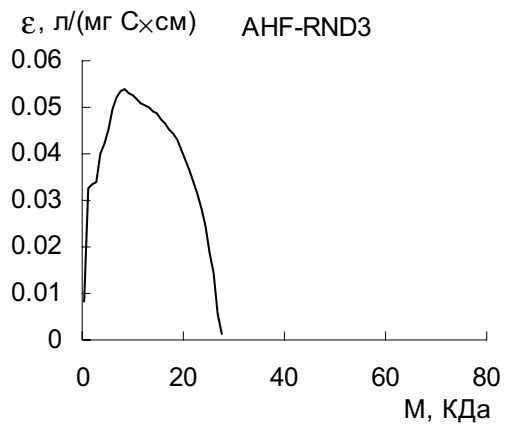
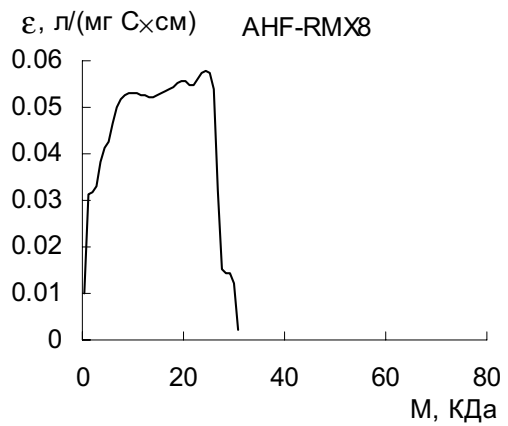
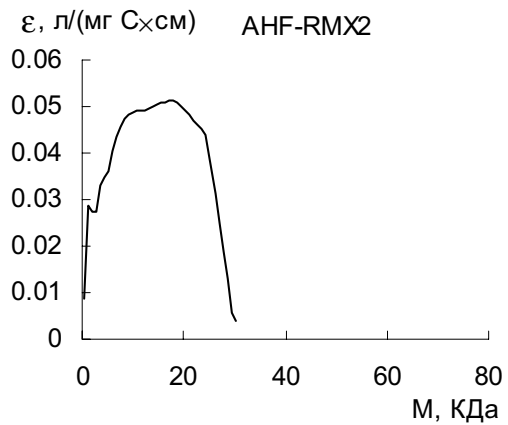
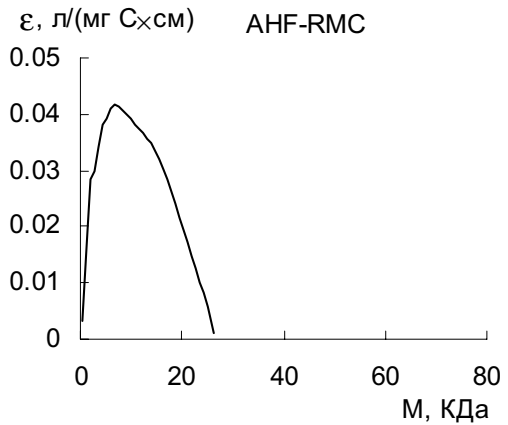
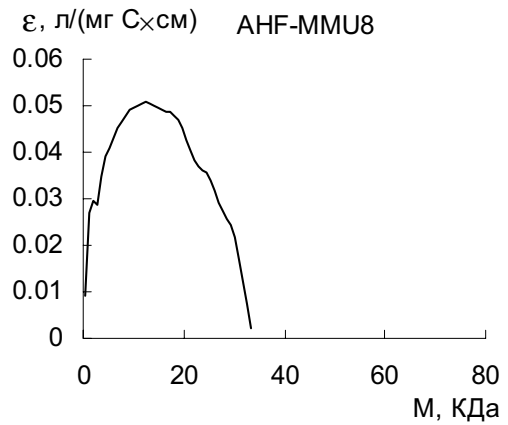
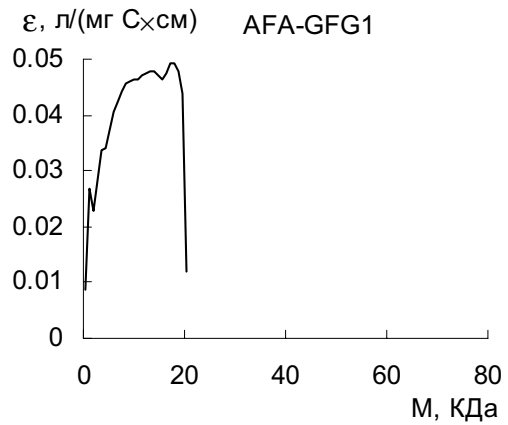
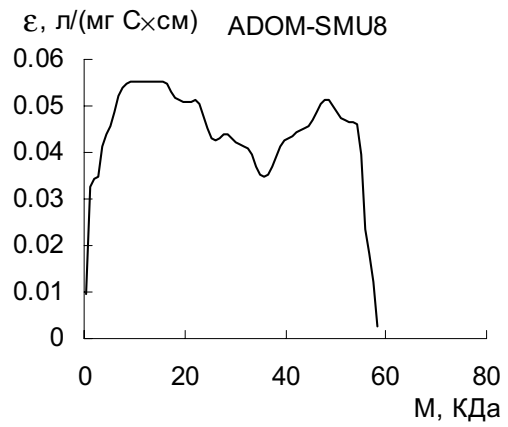
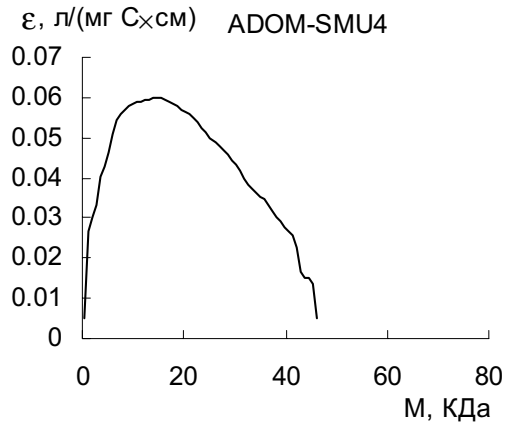


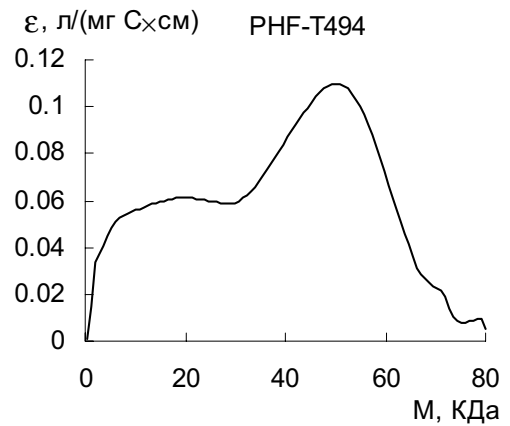
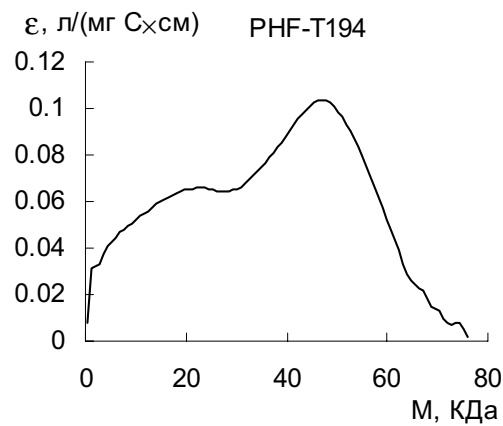
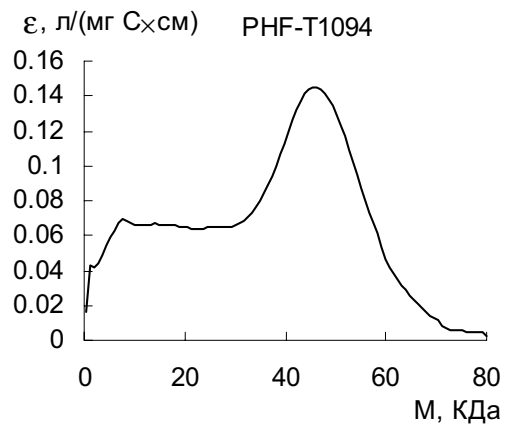
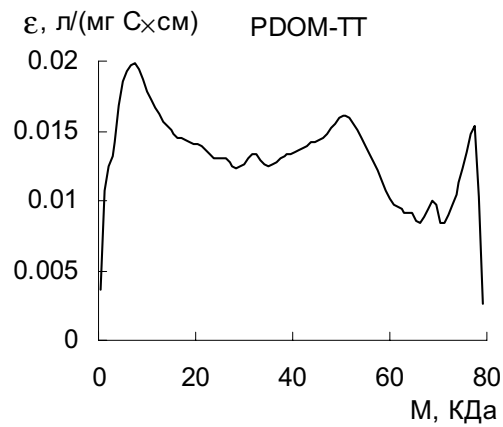
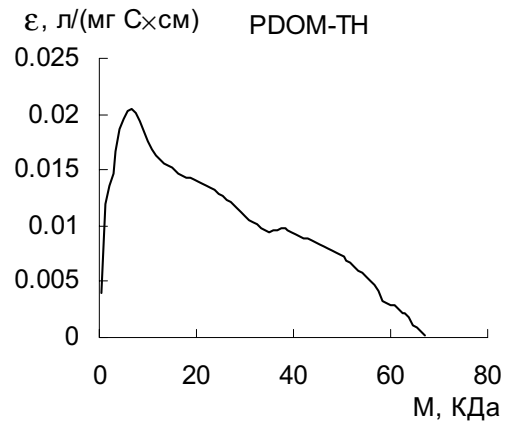
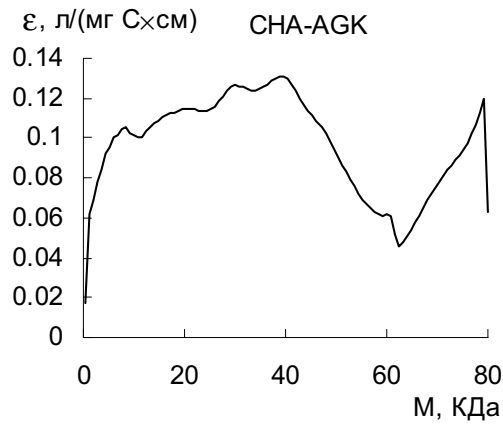
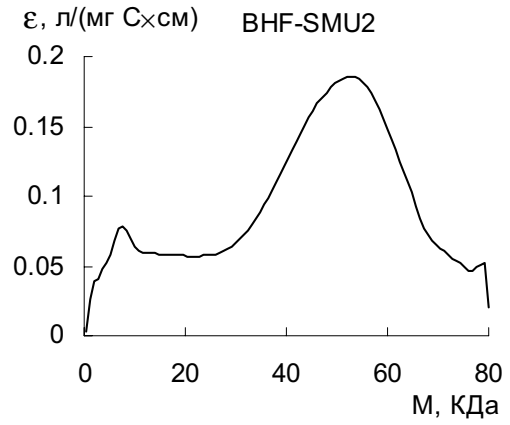
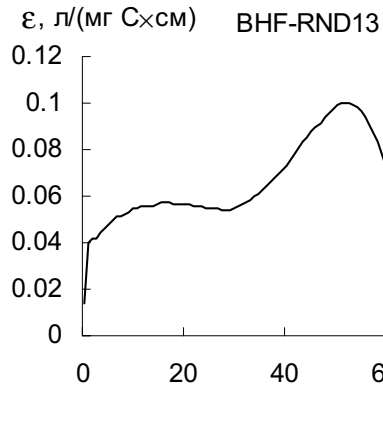
Список индивидуальных соединений использованных для расчета  
 “постоянной ячейки” и соответствующие  $(\epsilon^*)_{\text{exp}}$  при 254 нм

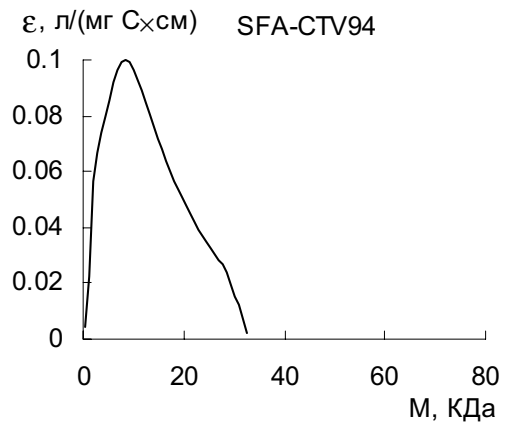
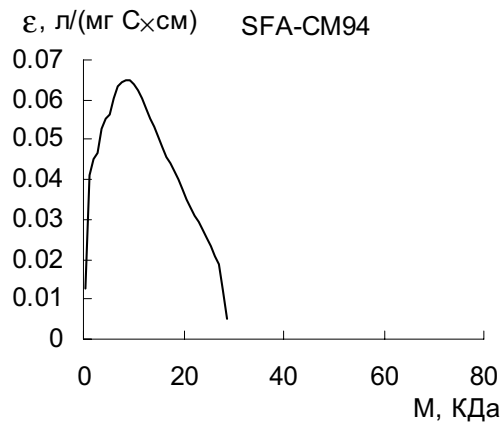
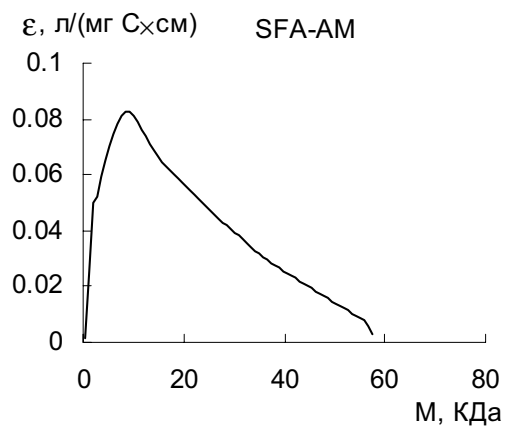
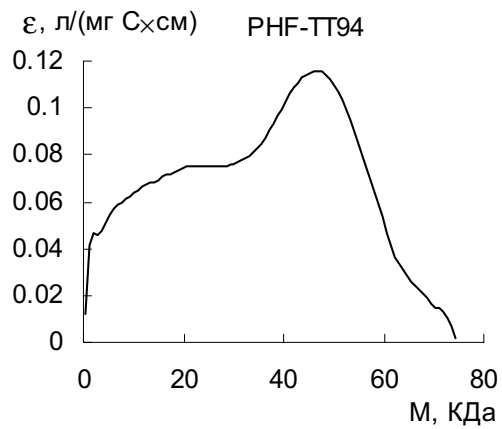
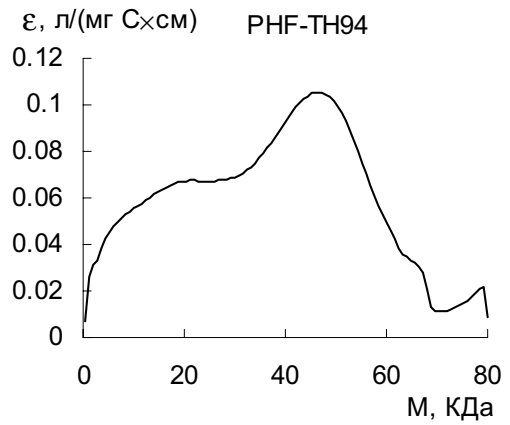
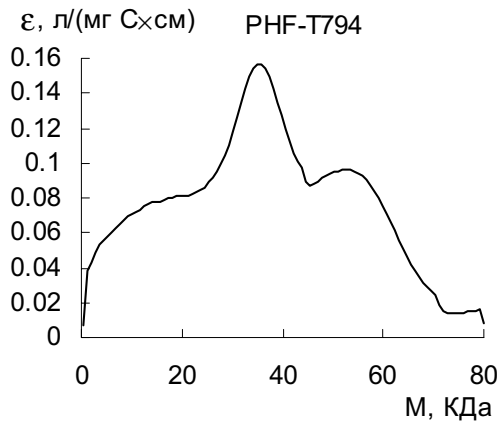
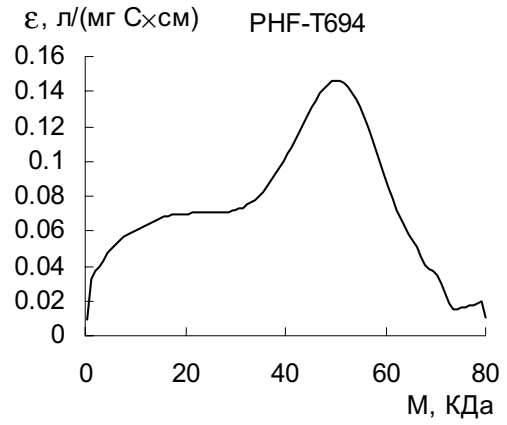
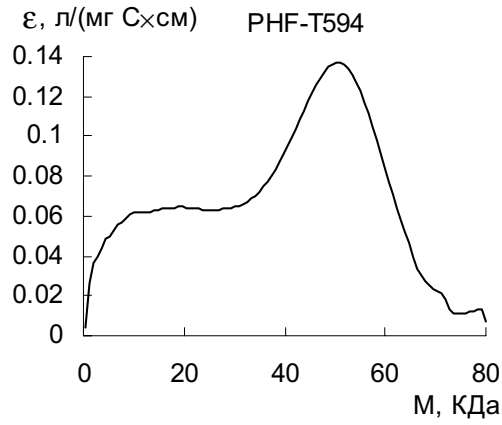
Соединение	Интеграл хр. по УФ / интеграл хр. по $C_{\text{орг}}$	$(\epsilon^*)_{\text{exp}}$ при 254 нм
Бензолсульфоновая	0.0514	0.0048
3-фенилпропионовая	0.0427	0.0061
5-гидроксифенилуксусная	0.0763	0.0083
4-гидроксифенилуксусная	0.0526	0.0097
3-гидроксibenзойная	0.0855	0.0111
2-метоксибензойная	0.0967	0.0117
Фталевая (хр. 1)	0.162	0.0186
Фталевая (хр. 2)	0.162	0.0186
2,3-гидроксibenзойная	0.316	0.0297
3,5-гидроксibenзойная	0.318	0.0326
Ванилиновая	1.068	0.0872
Галловая	1.278	0.1005

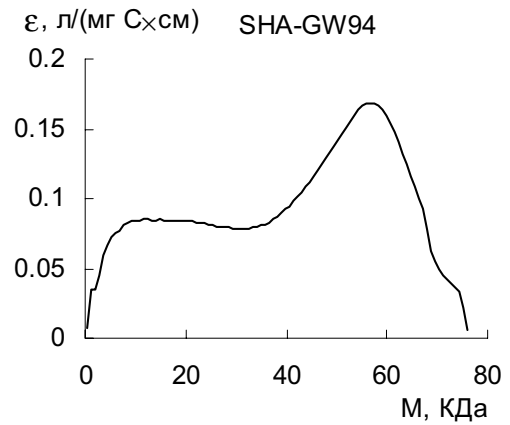
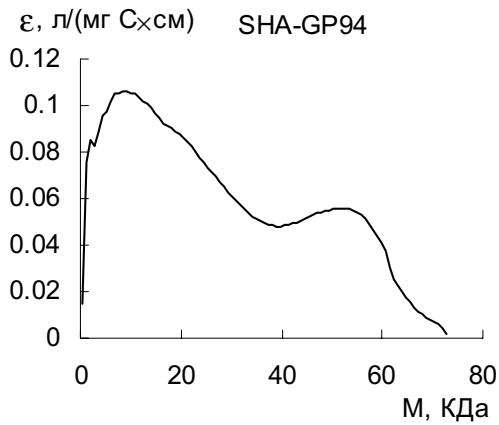
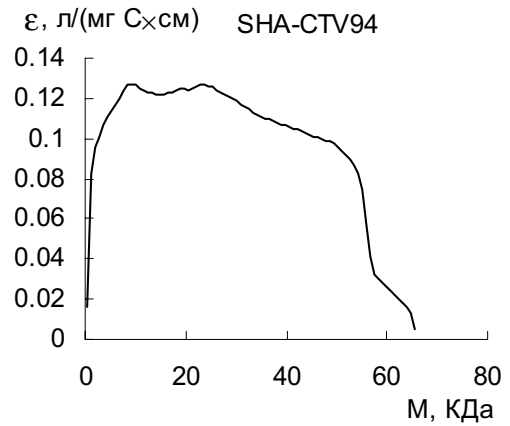
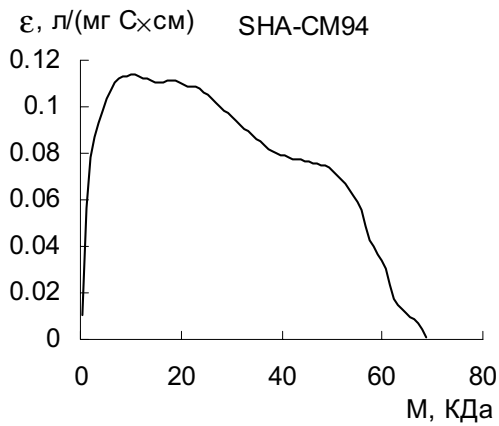
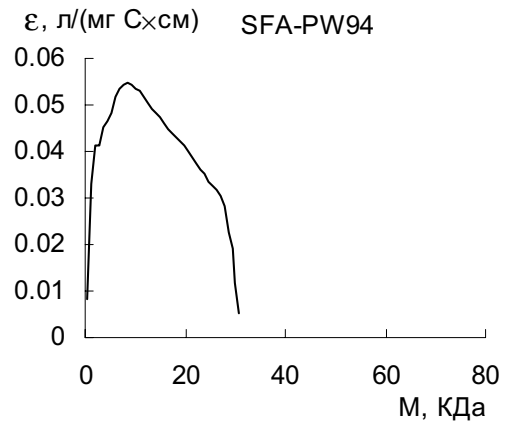
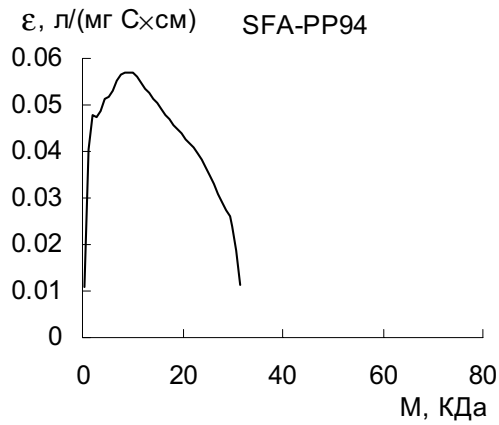
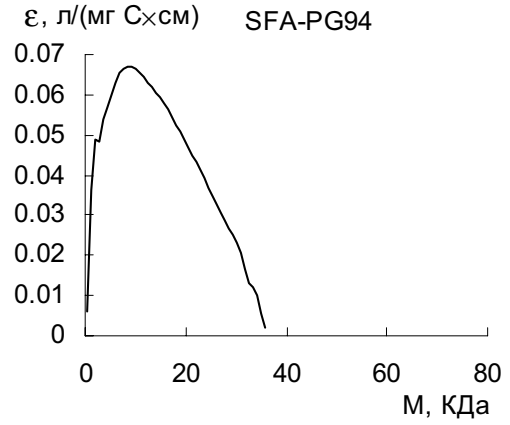
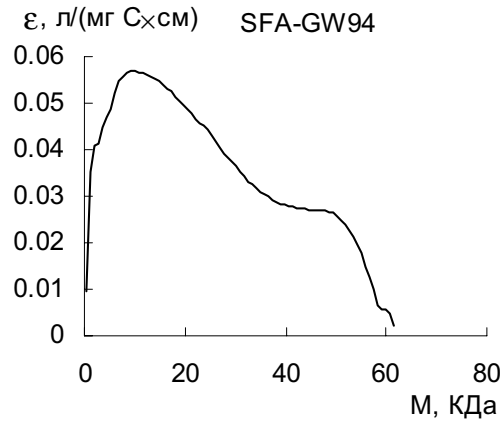


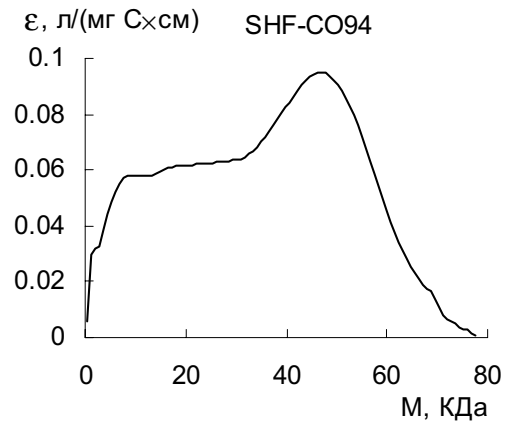
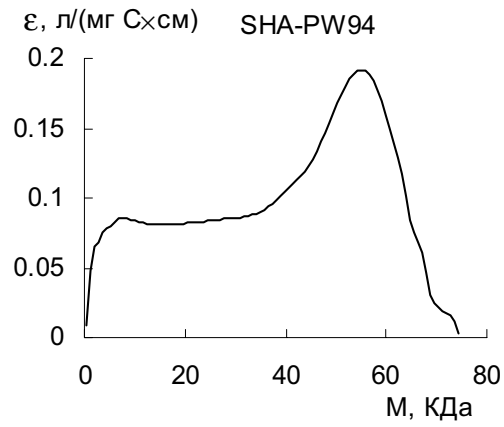
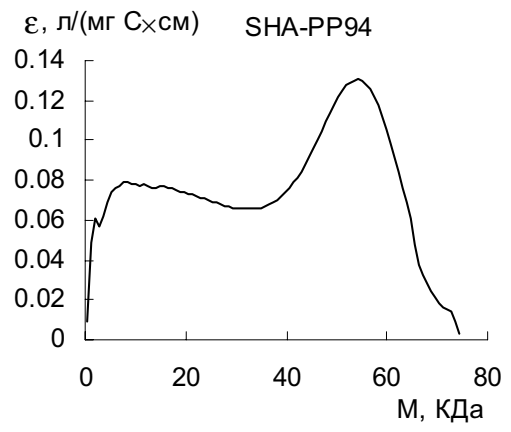
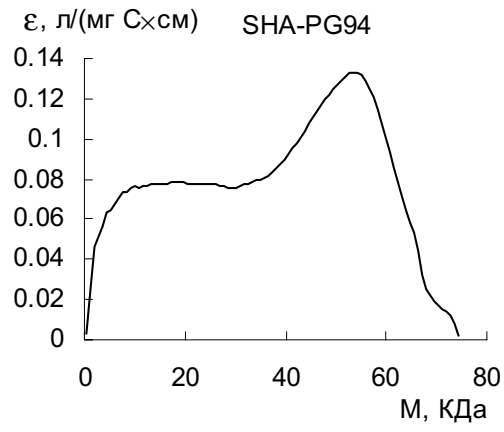
при 254 нм и соответствующее отношение площади под  
 УФ-хроматограммой к площади под  $C_{\text{орг}}$ -хроматограммой  
 $(I_{\text{УФ}}/I_{\text{C}_{\text{орг}}})$  для индивидуальных соединений,  
 использованных при расчете “постоянной ячейки”.











**Формулы для расчета дисперсионных весов**

1) Отношение дисперсии между классами (SD между) к дисперсии внутри классов (SD внутри) ( $w_1$ ):

$$\text{SD между} = \frac{\sum_{j=1}^m n_j (\bar{x}_j - \bar{x})^2}{m-1}$$

$$\text{SD внутри} = \frac{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ji} - \bar{x}_j)^2}{n-m}$$

$$w_1 = \text{SD между} / \text{SD внутри}$$

где

$m$  – число всех классов;

$n_j$  – число хроматограмм класса  $j$ ;

$n = \sum n_j$  – число всех хроматограмм;

$\bar{x}$  – общее среднее дескриптора (усредненное по хроматограммам)

$\bar{x}_j$  – среднее дескриптора для хроматограмм класса  $j$ ;

$x_{ji}$  – значение дескриптора для хроматограммы  $i$  класса  $j$ .

2. Дисперсионный вес ( $w_2$ ):

$$w_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} x_{ji}^2 / n_j - 2 \sum_{i=1}^{n_j} x_{ji} \sum_{i=1}^{n_k} x_{ki} / n_j n_k + \sum_{i=1}^{n_k} x_{ki}^2 / n_k}{\sum_{i=1}^{n_j} (x_{ji}^2 - \bar{x}_j) / n_j + \sum_{i=1}^{n_k} (x_{ki}^2 - \bar{x}_k) / n_k}$$

$$w_2 = \left( \prod w_{jk} \right)^{2/(m(m-1))}.$$

3. Дисперсионный вес Фишера ( $w_3$ ):

$$w_{jk} = \frac{|\bar{x}_j - \bar{x}_k|}{\sum_{i=1}^{n_j} (x_{ji}^2 - \bar{x}_j) / n_j + \sum_{i=1}^{n_k} (x_{ki}^2 - \bar{x}_k) / n_k}$$

$$w_3 = \frac{\sum w_{jk}}{m(m-1)}.$$



### **Методика определения ртути (II) в присутствии гумусовых кислот**

Ртуть в растворе в присутствии гумусовых кислот определяли методом атомно-абсорбционной спектрометрии холодного пара (ААСХП). В качестве восстановителя использовали  $\text{NaBH}_4$  в кислой среде. Для определения ртути при рН7 проводили предварительную пробоподготовку, заключающуюся в окислении гумусовых кислот персульфатом калия.

**Реактивы и оборудование.** Определение  $\text{Hg(II)}$  проводили с использованием прибора SpectrAA-30 с приставкой VGA-76 фирмы "Varian". Для измерения поглощения паров ртути использовали кварцевую кювету с длиной оптического пути 15.5 см.

Для определения  $\text{Hg(II)}$  в растворах в качестве восстановителя использовали 0.3% раствор  $\text{NaBH}_4$  в 0.1 М  $\text{NaOH}$ . Для приготовления указанного восстановительного раствора навеску твердого  $\text{NaOH}$  растворяли в дистиллированной воде и добавляли  $\text{NaBH}_4$ . Раствор готовили не более, чем за сутки до употребления. Для создания кислой среды непосредственно при восстановлении  $\text{Hg(II)}$  использовали 5 М  $\text{HCl}$ .

Калибровочные растворы  $\text{Hg(II)}$  готовили разбавлением стандартного в 3%-ном растворе  $\text{HNO}_3$ . Концентрация калибровочных растворов  $\text{Hg(II)}$  составляла 10, 20, 30, 40, 50 мкг/л. В качестве стандартного использовали раствор  $\text{Hg(NO}_3)_2$  1 г/л (по  $\text{Hg}$ ) (ГСО 3497-86, приготовлен в СКБ ФХИ им. А.В. Богатского, г. Одесса).

**Пробоподготовка.** К 10 мл пробы, предварительно нагретой на кипящей водяной бане в высокой (для предотвращения испарения) пробирке добавляли 100 мг  $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$  и продолжали нагревание в течение трех минут. Через 3 минуты пробирку извлекали из бани и добавляли 2 капли  $\text{HNO}_3$  конц. (для разложения остатков персульфата). Когда раствор остывал до комнатной температуры, в нем определяли содержание  $\text{Hg(II)}$  методом ААСХП.

**Определение методом ААСХП.** Анализируемый раствор, 0.3% раствор  $\text{NaBH}_4$  и 5 М раствор  $\text{HCl}$  прокачивают через смеситель, после чего пары ртути из реакционной смеси выдувают аргоном и определяют поглощение при 253.7 нм. Скорость прокачки растворов через смеситель составляет: для пробы – 6 мл/мин, для реагентов – 2 мл/мин.

Относительная ошибка определения указанным методом не превышает 3%.