

## ОСНОВЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ БАЗЫ ДАННЫХ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ИК-ЭКСПЕРТ

Дерябина Ю.М., Тихова В.Д., Корнакова Т.А.

ФГБУН Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН,  
Новосибирск, Россия  
dyulik@mail.ru

DOI: 10.26902/ASFE-11\_74

Гуминовые кислоты (ГК) представляют собой сложную смесь высокомолекулярных природных органических соединений, извлекаемых щелочными растворами из почв, торфа, угля и сапропеля. Важность систематизации данных о ГК обусловлена их необычайным разнообразием и широким использованием в различных областях. В настоящее время накоплено огромное количество фактического материала для гуминовых кислот, полученного различными аналитическими методами. На основе представленных и накопленных в течение многих лет данных по исследованию ГК возможно создание базы данных по гуминовым кислотам – с оцифрованными спектрами, отражающими их состав по структурным фрагментам, физико-химическими характеристиками и другой соответствующей информацией. Для этого предлагается использовать систему ИК-ЭКСПЕРТ, созданную в НИОХ СО РАН.

Особенность создания базы данных гуминовых кислот состоит в том, что невозможно создать записи соответствия «спектр-структура», поскольку структура ГК варьируется в зависимости от большого количества параметров, например, от времени формирования или территориального происхождения. Система ИК-ЭКСПЕРТ позволяет связать спектр с комбинацией структурных фрагментов, а не с точной структурой и работать с таким оригинальным представлением, как с обычной структурой: выполнять поиск по подструктуре, сравнивать наборы структурных фрагментов друг с другом. Количественная оценка структурного сходства двух наборов структурных фрагментов может быть полезна, например, при сравнительном анализе гуминовых кислот разных территорий или генезиса.

Еще одним интересным направлением исследований гуминовых кислот может быть проверка возможности «получения» ИК-спектра путем суммирования ИК-спектров соединений (набора структурных фрагментов), предположительно входящих в структуру исследуемого образца.

База данных по гуминовым кислотам может содержать:

- название, почвенно-географическое районирование, тип, горизонт почвы, глубина отбора проб и т. д.
- элементный состав, зольность, содержание воды;
- электронные, инфракрасные, спектры поглощения, спектры ЯМР и др.
- термогравиметрические данные;
- любые другие данные, имеющиеся на данный момент.

Создание базы данных ГК различного генезиса не только позволило бы по-новому подойти к фундаментальной проблеме анализа их структуры, моделирования и прогнозирования их свойств, но и упростила бы оценку полезности коммерческих гуминовых препаратов.

