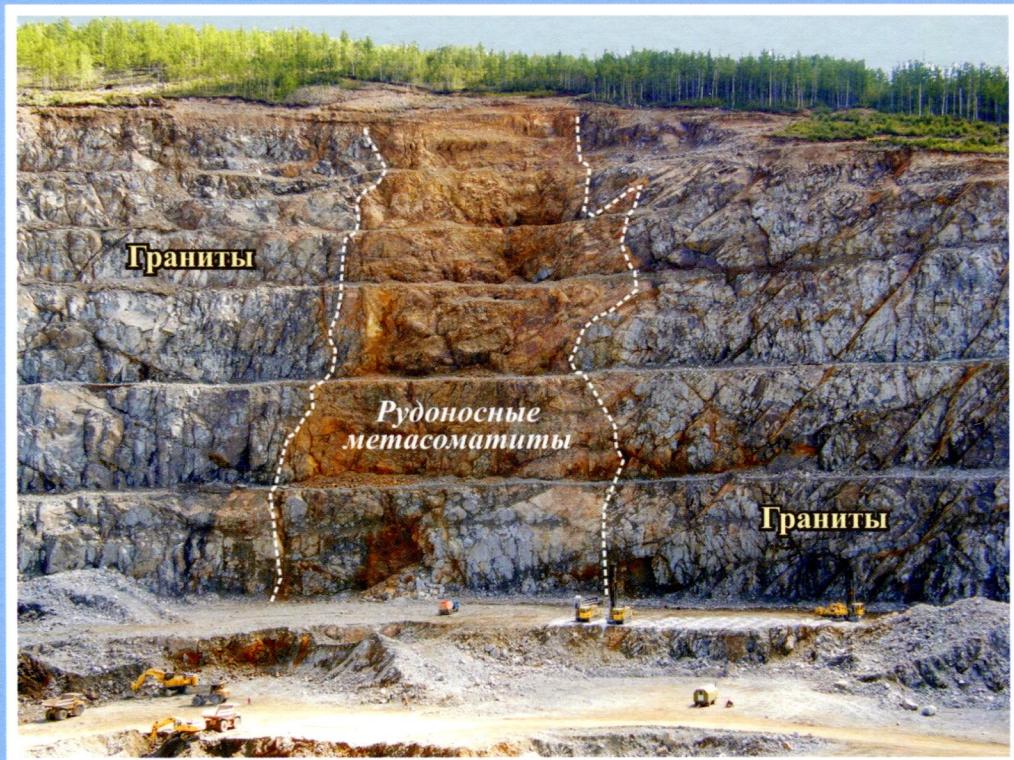


О.В. Авченко, К.В. Чудненко, А.С. Вах

# АНАЛИЗ МИНЕРАЛЬНЫХ ПАРАГЕНЕЗИСОВ МЕТОДОМ МИНИМИЗАЦИИ ПОТЕНЦИАЛА ГИББСА



Дальневосточный геологический институт ДВО РАН

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН

**О.В. Авченко, К.В. Чудненко, А.С. Вах**

---

---

**АНАЛИЗ МИНЕРАЛЬНЫХ ПАРАГЕНЕЗИСОВ  
МЕТОДОМ МИНИМИЗАЦИИ  
ПОТЕНЦИАЛА ГИББСА**

---

---

Москва  
ГЕОС  
2018

УДК 552.1:552.13

ББК 26.323

А 6

**О.В. Авченко, К.В. Чудненко, А.С. Вах**

**Анализ минеральных парагенезисов методом минимизации потенциала Гиббса.** – М.: ГЕОС, 2018. 254 с.

ISBN 978-5-89118-782-5

Монография посвящена дальнейшему развитию известного в России программного средства ПК «Селектор», предназначенного для компьютерного моделирования равновесных и неравновесных физико-химических процессов в геохимии и петрологии. Рассматриваются новые модели минеральных твердых растворов клино- и ортоамфиолов, биотитов, титанитов, ортопироксенов, ильменитов, омфацитов, хлоритов и сапфиров, оригинальный способ верификации получаемых решений на основе сравнения модального и химического составов модельных и реальных минеральных парагенезисов. Решаются задачи образования реальных минеральных ассоциаций метапелитов Охотского гранулитового комплекса с определением возможных объемов метаморфогенных флюидов, вопросы эволюции, термобарометрии и вероятной перекристаллизации минеральных парагенезисов Березитового месторождения. Разобраны вопросы петрогенезиса и полиметаморфизма уникальных метаультрамафитов Омolonского массива Ауланджинского выступа, содержащих реакционные сапфирин-шпинелевые и ортопироксен-плагиоклазовые структуры. Показаны особенности формирования природных сплавов Au, Ag, Cu и Hg в гидротермальных условиях на примере двух модельных объектов. Компьютерное моделирование минеральных ассоциаций на основе принципа минимизации потенциала Гиббса позволяет получить новую информацию по минеральным ассоциациям.

Для широкого круга петрологов, минералогов, специалистов-рудников и студентов.

Издание осуществлено при финансовой поддержке  
Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ)  
Проект № 18-15-00034



Издание РФФИ не подлежит продаже

Far East Geological Institute (FEGI FEB RAS)

Vinogradov Institute of Geochemistry SB RAS

**O.V. Avchenko, K.V. Chudnenko, A.S. Vakh**

---

---

**THE ANALYSIS OF MINERAL PARAGENESIS  
IN METAMORPHIC AND METASOMATIC  
ROCKS BY THE ENERGY MINIMIZATION  
METHOD GIBBS**

---

---

Moscow  
GEOS  
2018

УДК 552.1:552.13

ББК 26.323

A 6

**Avchenko O.V., Chudnenko K.V., Vakh A.S.**

**The Analysis of Mineral Paragenesis in Metamorphic and Metasomatic Rocks by the Energy Minimization Method Gibbs.** – Moskow, GEOS, 2018. 254 p.

ISBN 978-5-89118-782-5

The book aims at further developing a well-known in Russia SELECTOR Program Package intended for a computer modeling of both equilibrium and non-equilibrium physical-chemical processes in geochemistry and petrology. The first part familiarizes the readers with new models of solid solutions of such minerals as clino- and ortho-amphiboles, biotite, orthopyroxene, ilmenite, omphacite, chlorite, and sapphirine. Verification of the solutions received is done with the help of specially designed MS computer program which compares the mode and chemical composition of modeling and real mineral parageneses. Problems include formation of real mineral associations of metapelitic rocks from the Okhotsk granulite complex and evolution, thermobarometry and probable recrystallization of mineral paragenesis, as well as composition, source of melts and mechanism of formation of metasomatic rocks from the Berezitovoe deposit. Issues of petrogenesis and polymetamorphism of the unique metatramafites from the Omolon massif of the Aulandzhha block which contain sappharine-spinel and orthopyroxene-plagioclase reactionary structures were also addressed. The features of formation of natural alloys of Au, Ag, Cu, and Hg were shown on the example of two model objects. The computer modeling of mineral associations on a principle of Gibbs potential minimization can provide new information on the mineral associations.

To a wide range of specialists in petrology, mineralogy, and students.

Published at financial support of Russian Foundation for Basic Research

Grant 18-15-00034



The edition of RFBR isn't subject for sale

© O.V. Avchenko, K.V. Chudnenko, A.S. Vakh, 2018

© GEOS, 2018

# ОГЛАВЛЕНИЕ

---

---

<b>Введение.....</b>	5
<b>Индексы минералов .....</b>	7
<b>ГЛАВА 1. Термодинамика минеральных твердых растворов .....</b>	8
1.1. Общие положения и некоторые уравнения .....	8
1.2. Механическая энергия минерального твердого раствора .....	11
1.3. Идеальная конфигурационная энтропия идеального раствора .....	12
1.4. Коэффициент нормализации и его природа .....	15
1.5. Молекулярная модель твердого раствора.....	16
1.6. Идеальная модель неупорядоченного твердого раствора .....	16
1.7. О выводе формул идеальной активности миналов по модели неупорядоченного твердого раствора .....	17
1.8. Модель локального электробаланса .....	20
1.9. Примеры оценки идеальной активности миналов в некоторых минералах по разным моделям .....	21
1.9.1. Идеальная активность компонентов граната в системе CaO–FeO–MgO–MnO–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> –Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> –SiO <sub>2</sub> .....	21
1.9.2. Идеальная активность компонентов плагиоклаза в системе CaO–Na <sub>2</sub> O–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> –SiO <sub>2</sub> .....	22
1.9.3. Идеальная активность компонентов клинопироксена в системе CaO–FeO–MgO–Na <sub>2</sub> O–Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> –SiO <sub>2</sub> с компонентами диопсид, геденбергит, кальциевый чермакит, жадеит.....	24
1.10. Регулярный раствор, симметричный раствор, простая смесь.....	25
1.11. Многокомпонентные однопозиционные регулярные растворы.....	26
1.12. Модель квадратичного формализма Даркена (DKF) .....	27
1.13. Взаимные твердые растворы.....	29
1.14. Модель симметричного формализма .....	32
1.15. Модель асимметричного формализма.....	34
1.16. Твердые растворы на основе формализме Редлиха–Кистера .....	35
<b>ГЛАВА 2. Термодинамические модели минеральных тврдых растворов.....</b>	39
2.1. Биотит.....	39
2.2. Хлорит .....	48

2.3. Сапфирин .....	56
2.4. Титанит.....	59
2.4.1. Кристаллохимия и структурная формула титанита .....	60
2.4.2. Термодинамическая модель бинарного раствора титанита $\text{CaTiOSiO}_4 - \text{CaAlFSiO}_4$ .....	61
2.5. Амфиболы .....	64
2.5.1. Модель твердого раствора клиноамфиболов .....	65
2.5.2. Модель твердого раствора ортоамфиболов .....	68
2.6. Ортопироксен .....	70
2.7. Шпинель .....	73
2.8. Омфацит .....	74
2.9. Ильменит.....	77

**ГЛАВА 3. Новые разработки (алгоритмы и программы)  
для ПК «Селектор» .....** 80

3.1. Программа МС – петрологический инструмент для вычисления реальных количеств минералов в горной породе .....	80
3.1.1. Описание программы МС .....	81
3.1.2. Пример расчета модального состава обр. 138 .....	83
3.1.3. Оценка точности алгоритма расчета модального состава .....	85
3.1.4. Тестирование МС на природном материале .....	86
3.1.5. Особенности работы МС сравнительно с MINSQ.....	87
3.2. Новый подход к определению условий формирования метаморфических пород методом термодинамического моделирования.....	89

**ГЛАВА 4. Решение проблем образования метаморфических  
и метасоматических пород на основе компьютерного  
моделирования минеральных ассоциаций .....** 96

4.1. Минеральные ассоциации Охотского комплекса как доказательство принципа локального равновесия .....	96
4.1.1. Геологическое положение.....	97
4.1.2. Минеральные парагенезисы и вариации состава минералов .....	100
4.1.3. О выборе минеральных ассоциаций пика метаморфизма .....	106
4.1.4. О расчете модальных количеств минералов и эффективного химического состава породы .....	107
4.1.5. Результаты решения поставленной задачи по определению условий образования минеральных парагенезисов методом физико-химического моделирования .....	109
4.1.6. О моделировании минеральных ассоциаций при инертном и вполне подвижном поведении $\text{H}_2\text{O}$ и вероятной оценке весового отношения флюид/порода.....	113

4.2. Минералогия, петрология и условия образования рудоносных метасоматических пород Березитового месторождения .....	116
4.2.1. Геологическое строение месторождения .....	118
4.2.2. Краткая характеристика гранитоидов Хайктинско-Оргжанского массива .....	125
4.2.3. Минеральные парагенезисы, метасоматическая зональность, состав минералов и $P$ , $T$ параметры формирования гранатсодержащих пород.....	130
4.2.4. Изменение химического состава гранодиоритов при образовании метасоматических пород.....	142
4.2.5. Основные гипотезы образования метасоматитов месторождения.....	145
4.2.6. Результаты физико-химического моделирования гранатсодержащих минеральных ассоциаций .....	146
4.2.7. Специфика проявления метаморфических процессов при формировании гранатсодержащих пород.....	149
4.2.8. Изотопный возраст цирконов из вмещающих рудную зону гранитоидов и рудоносных пород Березитового месторождения.....	151
4.2.8.1. Методика аналитических исследований цирконов .....	152
4.2.8.2. Результаты геохронологических исследований цирконов .....	153
4.2.8.3. Обсуждение полученных результатов.....	157
4.2.9. Особенности изотопного состава свинца и серы галенитов в рудах месторождения .....	160
4.2.9.1. Методика аналитических работ .....	160
4.2.9.2. Результаты изучения изотопного состава свинца и серы.....	161
4.2.9.3. Изотопный состав стабильных изотопов углерода и кислорода в метасоматитах и его интерпретация на основе модального состава изучаемых пород .....	163
4.2.9.4. Методика анализа стабильных изотопов углерода и кислорода .....	164
4.2.9.5. Модальный состав метасоматических зон .....	164
4.2.9.6. Результаты изучения изотопного состава кислорода и углерода .....	165
4.2.10. О механизме метасоматоза, возможных объемах и составе флюидов по данным моделирования и результатам изучения газово-жидких включений .....	167
4.2.10.1. Концептуальная модель моделирования.....	167
4.2.10.2. Постановка задачи .....	168
4.2.10.3. Методика моделирования .....	169
4.2.10.4. Результаты моделирования метасоматоза.....	170
4.2.10.5. Результаты анализа газово-жидких включений .....	175

4.2.10.6. К вопросу о природе флюида и механизме его взаимодействия с гранодиоритами .....	178
4.2.10.7. К вопросу о формационной принадлежности гранатсодержащих метасоматических пород Березитового месторождения.....	179
4.3. Титанитовый (сфеновый) фториметр.....	181
4.3.1. Методика исследований.....	182
4.3.2. Минеральные парагенезисы гротитсодержащих пород.....	182
4.3.3. Особенности состава Al-F титанита и вероятные $P$ , $T$ условия его образования .....	185
4.3.4. О максимальном содержании компонента $\text{CaAlFSiO}_4$ в твердом растворе титанита при $P$ , $T$ условиях образования метасоматических пород Березитового месторождения .....	188
4.3.5. Уравнение фториметра.....	189
4.3.6. О фтористости флюида при формировании рудоносных пород Березитового месторождения.....	193
4.4. Физико-химические условия образования диаспора .....	194
4.4.1. Геологическая обстановка .....	194
4.4.2. Методы изучения флюидных включений и их состав .....	195
4.4.3. Условия образования диаспора во включениях по данным физико-химического моделирования .....	196
4.4.3.1. Результаты моделирования.....	197
4.5. Шпинель-сапфировые реакционные структуры в гранатовых метаультрамафитах Омolonского массива: петрогенезис и геологическая интерпретация (Северо-Восток Азии) .....	199
4.5.1. Введение .....	199
4.5.2. Геологическое положение гранатовых метаультрамафитов .....	200
4.5.3. Аналитические исследования .....	202
4.5.4. Петрофотография и петрохимия гранатовых и сапфировых жедрититов .....	203
4.5.5. Термобарометрия гранатовых жедрититов .....	214
4.5.6. Условия образования сапфирин-шпинелевых реакционных структур по окислительному потенциалу и температуре.....	215
4.5.7. О причинах образования шпинель-сапфировых реакционных структур, возрасте и природе протолита метаультрамафитов .....	217
4.6. Моделирование равновесных условий формирования природных твердых растворов Au, Ag, Cu и Hg .....	222
4.6.1. Месторождение Айтик .....	223
4.6.2. Месторождение Уитон-Крик .....	226
<b>Заключение .....</b>	<b>230</b>
<b>Литература .....</b>	<b>234</b>