

АКТУАЛЬНЫЕ
МОНОГРАФИИ

О. В. Авченко, К. В. Чудненко,
И. А. Александров

Физико-химическое
моделирование
минеральных систем

Монография
2-е издание



О. В. Авченко, К. В. Чудненко, И. А. Александров

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИНЕРАЛЬНЫХ СИСТЕМ

МОНОГРАФИЯ

2-е издание, исправленное и дополненное

**Книга доступна
на образовательной платформе «Юрайт» urait.ru**

Москва ■ Юрайт ■ 2020

УДК 552.1(075.8)
ББК 26.31я73
А18

Авторы:

Авченко Олег Викторович — доктор геолого-минералогических наук, главный научный сотрудник Дальневосточного геологического института ДВО РАН;

Чудненко Константин Вадимович — доктор геолого-минералогических наук, главный научный сотрудник Института геохимии имени А. П. Виноградова СО РАН;

Александров Игорь Анатольевич — кандидат геолого-минералогических наук, директор Дальневосточного геологического института ДВО РАН.

Рецензенты:

Мартынов Ю. А. — доктор геолого-минералогических наук;

Котельников А. Р. — доктор геолого-минералогических наук.

Авченко, О. В.

А18 Физико-химическое моделирование минеральных систем : монография / О. В. Авченко, К. В. Чудненко, И. А. Александров. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2020. — 232 с. — (Актуальные монографии). — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-534-08840-3

Монография посвящена проблемам физико-химического моделирования минеральных систем. Рассмотрен метод минимизации термодинамических потенциалов для решения вопросов петрологии метаморфических горных пород. На основе применения этого метода показаны возможности моделирования систем для анализа минеральных парагенезисов. Приведены примеры моделирования реальных минеральных ассоциаций в метаморфических породах.

Для студентов высших учебных заведений, обучающихся по естественнонаучным направлениям, аспирантов, преподавателей и всех интересующихся.

УДК 552.1(075.8)
ББК 26.31я73

Все права защищены. Никакая часть данной книги не может быть воспроизведена в какой бы то ни было форме без письменного разрешения владельцев авторских прав.

© Чудненко К. В., Авченко О. В.,
Александров И. А., 2009

© Чудненко К. В., Авченко О. В.,
Александров И. А., 2009, с изменениями

© ООО «Издательство Юрайт», 2020

ISBN 978-5-534-08840-3

Оглавление

Предисловие	7
Введение	8
Условные сокращения.....	11
Глава 1. Основные понятия термодинамики.....	13
1.1. Некоторые определения.....	13
1.2. Свойства функции многих переменных.....	16
1.3. Первый закон термодинамики	16
1.4. Второй закон термодинамики	17
1.5. Термодинамические потенциалы	17
1.6. Интегральные выражения для термодинамических потенциалов.....	21
1.7. Принцип возрастания энтропии и общие условия равновесия сложных систем	23
1.8. Дополнительные условия равновесия	25
1.9. Правило фаз Гиббса Коржинского.....	25
1.10. Еще раз об отличиях потенциала Коржинского от потенциала Гиббса	27
Глава 2. Основные уравнения расчета химического потенциала в твердых, газообразных и водных растворах.....	29
2.1. Химический потенциал однокомпонентной системы	30
2.2. Идеальные и реальные растворы	31
2.3. Определение активности и стандартного состояния	32
2.4. Функции смешения	33
2.5. Характеристика термодинамических моделей твердых растворов, принятых в программном комплексе «Селектор-С»	35
2.5.1. Субрегулярная модель	35
2.5.2. Модель Даркена	36
2.5.3. Модель неупорядоченного твердого раствора.....	36
2.5.4. Модель симметричного формализма для учета неконфигурационных факторов	40
2.6. Формулировка принятых моделей твердых растворов.....	40
2.6.1. Ставролит	40
2.6.2. Ильменит.....	41
2.6.3. Титаномагнетит	41
2.6.4. Тальк.....	42
2.6.5. Гранат.....	43

2.6.6. Оливин	44
2.6.7. Амфибол	44
2.6.8. Кордиерит	47
2.6.9. Ортопироксен	48
2.6.10. Клинопироксен	50
2.6.11. Доломит-анкерит	51
2.6.12. Кальцит-магнезит-сидерит-родохрозит	51
2.6.13. Хлоритоид	52
2.6.14. Шпинель	52
2.6.15. Биотит	53
2.6.16. Эпидот	55
2.6.17. Плаггиоклаз	55
2.6.18. Щелочные полевые шпаты (КПШ)	56
2.6.19. Мусковит	57
2.7. Расчет изобарно-изотермического потенциала чистого компонента	59
2.8. Особенности газообразного состояния вещества	63
2.9. Уравнение химического потенциала газового компонента в идеальном газе	64
2.10. Стандартное состояние газовой фазы и смесь идеальных газов	64
2.11. Фугитивность, активность, коэффициент фугитивности	65
2.12. Стандартное состояние компонентов водного раствора и потенциал компонента	67
2.12.1. Уравнение Дебая-Хюккеля	67
2.12.2. Уравнения Хельгесона для экстраполяции термодинамических свойств ионов в область повышенных температур и давлений	69
2.12.3. Определение рН, редокс-потенциал, E _h	69
2.13. Константа равновесия	70
2.14. Уравнения для оценки фугитивности флюидных компонентов	74
2.15. Некоторые итоги	77

Глава 3. Эволюция термодинамического описания минеральных систем: от качества к количеству 78

3.1. О неполноте описания закономерностей изменения состава минеральных парагенезисов на основе диаграмм химических потенциалов и диаграмм состав-парагенезис. «Проклятие размерности»	78
3.2. Схемы метаморфических фаций	82
3.3. Минеральная геотермометрия	89
3.3.1. Историческая справка	89
3.3.2. Уравнения некоторых геотермометров и геобарометров	91
3.4. Система гранат-кордиерит-ганит-силлиманит (кианит)-кварц	96

3.5. Программа PET.....	96
3.6. Программа QUILF.....	98
3.7. Программа THERMOCALC.....	99
Глава 4. Программный комплекс «Селектор-С».....	101
4.1. Основные функциональные возможности.....	101
4.1.1. Общие характеристики.....	101
4.1.2. Структурная схема.....	104
4.2. Базы термодинамических данных.....	108
4.2.1. Водные компоненты.....	111
4.2.2. Газы и жидкие углеводороды.....	112
4.2.3. Минералы и расплавы.....	112
4.2.4. Внутрисистемное согласование основных термодинамических функций.....	112
4.2.5. Переаппроксимация уравнения теплоемкости.....	113
4.3. Термодинамическое моделирование в условиях неопределенности и основные ошибки термодинамических моделей.....	116
Глава 5. Геологическая позиция изученных образцов.....	120
5.1. Гранулиты Сутамского блока (юг Алданского блока).....	120
5.2. Фундамент Охотского массива.....	123
5.2.1. Общие особенности геологического строения.....	123
5.2.2. Последовательность образования минеральных ассоциаций и количественная оценка их условий образования.....	124
5.2.3. О возрасте минерагенических стадий.....	126
5.2.4. Возможные корреляции.....	126
5.3. Джугджуро-Становая складчатая область (Становой блок).....	127
5.3.1. Общие особенности геологического строения.....	127
5.3.2. Условия метаморфизма пород Станового блока.....	132
5.3.3. Возрастные оценки.....	133
Глава 6. Решение некоторых петрологических задач с помощью программного комплекса «Селектор-С».....	135
6.1. Особенности решения основной задачи анализа минеральных парагенезисов методом минимизации.....	135
6.1.1. Последовательность моделирования минеральной ассоциации.....	138
6.1.2. Пример моделирования гранулитовой минеральной ассоциации.....	139
6.2. Окислительный потенциал и возможный состав флюида, режим поведения кислорода.....	144
6.2.1. Анализ хроматографических данных.....	144
6.2.2. Электрохимические измерения.....	151

6.2.3. Сопоставление оценок окисленности минеральных парагенезисов методами газовой хроматографии, электрохимии и фазового соответствия. Величина потенциала кислорода «внешнего» и «внутреннего» метаморфогенного флюида	154
6.2.4. Минералогическое свидетельство	157
6.2.5. Состав внешнего флюида и его окислительный потенциал по данным газовой хроматографии.....	159
6.2.6. Определение окислительного потенциала метаморфогенного флюида методом компьютерного моделирования	161
6.3. Растворимость компонентов породы в надкритическом флюиде.....	173
6.4. Решение геотермобарометрических задач методом минимизации ...	178
6.4.1. Оценка условий образования метаморфических пород на правом берегу р. Гилюй (иликанская серия)	180
6.4.2. Определение <i>P-T</i> условий образования амфиболитов бассейна р. Ньюжа (западная часть Джугджуро-Станового блока)	188
6.5. О буферировании потенциала CO_2 минеральными ассоциациями.....	193
6.6. Определение <i>P-T</i> условий реакции $Gr \rightarrow Orx + Pl + Sp$	198
6.7. Задача анализа распределения FeO , MgO , Al_2O_3 между минеральными парами	204
6.8. Замечания по оценке состава флюида методом минимизации	208
6.9. Режим поведения кислорода, воды и углекислоты при метаморфизме	209
6.10. Компьютерное моделирование минеральных парагенезисов и принцип локального равновесия	210
Заключение.....	214
Литература	217