2. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОГЕОХИМИЧЕСКИХ И РУДООБРАЗУЮЩИХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМЕ ВОДА – ПОРОДА

DOI: 10.31554/978-5-7925-0536-0-2018-214-218

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ДОННЫХ ОСАДКОВ

Ощепкова А.В., Бычинский В.А., Чудненко К.В.

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, Россия, e-mail: oshepkova-anasta@mail.ru

АННОТАЦИЯ. На основе данных химического состава осадков программным комплексом «Селектор» рассчитан минеральный состав донных отложений озер Байкал, Хубсугул и Баунт. Установлены тенденции изменения как соотношений минералов в донных осадках, так и состава самих твердых растворов, совпадающие с геологическими и климатическими изменениями в Центрально-Азиатском регионе в позднем кайнозое. Изучение ассоциации слоистых силикатов позволило определить условия выветривания, преобладающие в различные периоды в водосборном бассейне. На основе идеальной модели твердого раствора получены сводные стехиометрические формулы иллитов, хлоритов, иллит-сметитов, полевых шпатов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение осадков озер Байкальской рифтовой зоны позволяет проследить изменение климата и окружающей среды в позднем кайнозое в Центральной Азии. Многочисленные исследования проводились в рамках программ «Байкал-бурение» и «Хубсугул-бурение» и основной акцент был сделан на расшифровку геолого-геохимических сигналов, записанных в донных осадках озер.

Важной частью комплексного подхода к палеоклиматическим реконструкциям является изучение минерального состава осадочных толщ, в том числе их глинистого компонента. К глинистым минералам следует относить слоистые алюмосиликаты, образующиеся преимущественно при химическом выветривании пород, а также при постседиментационном преобразовании донных отложений.

Установлено, что грубозернистые отложения формируются в периоды похолодания, когда преобладают процессы физической эрозии, в условиях теплого климата активизируются процессы химического выветривания, в которых образуются глинистые минералы, содержание которых в осадках определяются трудоемкими и долговременными методами рентгенофазового или петрографического анализов. Методом математического моделирования рентгеновских дифракционных (XRD) профилей в байкальских донных осадках были обнаружены глинистые минералы: иллит-сметит, иллит, хлорит, мусковит, хлорит-сметит, каолинит; и неслоистые – кварц и плагиоклазы (преимущественно альбит). В следовых количествах встречаются калиевый полевой

шпат, амфибол [2, 3]. Было показано, что высокое содержание в осадках обломочных минералов мусковита, хлорита, а также плагиоклазов, свидетельствует о похолодании климата, а возрастание содержания глинистых минералов – иллитов и иллит-сметитов, характерно для теплых климатических эпох. При этом минералогические исследования многометровых осадочных разрезов – очень дорогостоящий и занимающий много времени процесс. К настоящему моменту рентгенофазовым анализом, характеризующим минералогию, исследовано ограниченное число проб [2, 3].

Математические методы позволяют рассчитывать минеральный состав на основании данных химического анализа. Была создана универсальная физико-химическая модель донных осадков, сформированных в котловинах Байкальской рифтовой зоны. Рассчитанный минеральный состав является основой для поиска и расшифровки сигналов, свидетельствующих об изменении климата в прошлом.

2. ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ РАСЧЕТА МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА

Расчет минерального состава озерных осадков выполнен методом физико-химического моделирования (ФХМ) на программном комплексе (ПК) «Селектор» [4].

Используя принцип частичного равновесия, процесс необратимого растворения и замещения горной породы расчленяется на последовательные элементарные этапы. На каждом элементарном этапе процесса решается одна зада-

ча химического равновесия путем численной минимизации свободной энергии мультисистемы, характеризующей весь процесс в целом.

Решение задачи начинается с подготовки исходного химического состава пробы донных отложений к расчету. Состав осадка пересчитывается: удаляются такие элементы, как титан, марганец, присутствующие в виде изоморфных примесей, и содержащиеся в долях процента в исходной пробе.

Начальным этапом работы является подбор вероятных минеральных фаз, реализующихся в модели. Сложные по составу слоистые силикаты представлены в модели в виде списков минералов твердых растворов (иллиты, иллит-сметиты, хлориты).

Проведена модификация существующей модели твердых растворов для глинистых минералов, а также разработано специальное дополнение, автоматически вычисляющее стехиометрические формулы и термодинамические параметры моделируемых глинистых минералов.

Для оценки условий выветривания в водосборном бассейне разработан и применен новый критерий – коэффициент обломочности. Коэффициент обломочности (КО) – это отно-

шения суммы минералов-индикаторов теплого климата иллита и иллит-сметита к сумме минералов-индикаторов холодного климата мусковита и хлорита.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МИНЕРАЛЬНОГО СОСТАВА ОЗЕРНЫХ ОСАДКОВ

Основными объектами исследования явились донные отложения озера Байкал. Также моделировались осадки озер Хубсугул, Баунт и отложения Баргузинской впадины.

ФХМ минерального состава проведено для отложений озера Байкал, полученных при бурении подводных отложений на Академическом хребте (скв. BDP-98) и Селенгино-Бугульдейской перемычки (скв. 24GC).

Установлено преобладание глинистых минералов во всех изученных разрезах. По их соотношению выявлены основные геологические и климатические события в регионе. В изменении соотношения минералов в разрезе скв. BDP-98 отмечаются как климатические события, так и смена геологических условий осадконакопления (рис. 1).

Рис. 1. Схема корреляции орографических движений, вариаций литологического состава отложений и рассчитанного КО в разрезах донных отложений Байкальской впадины.

Для осадков Селенгино-Бугульдейской перемычки (ст. 24GC) отмечен отклик расчетного КО на региональные события на границе плейстоцена-голоцена. Данные моделирования минерального состава сопоставлены с данными рентгенофазового анализа и показали хорошую сходимость.

Рассчитан минеральный состав осадков Баргузинской впадины, вскрытых бурением в 2012 году (скважина 513). Моделирование проведено по 43 пробам. В модель включены карбонаты, отмечающиеся в следовых количествах в нижних интервалах керна. Одной из задач модели-

рования являлось стратиграфическое разделение ановоской и танхойской свит. В результате показано, что микроклин и биотит, являющиеся характерной особенностью ановоской свиты и

переходного слоя, отсутствуют в танхойской свите. Результаты ФХМ минеральных фаз подтверждены рентгеновским исследованием образцов. Результаты расчета приведены на рис. 2.

Рис. 2. Изменение минерального состава (вес. %) осадков из скв. 513 в зависимости от глубины.

Преобладание глинистых минералов в осадках характерно и для голоценовых отложений озера Баунт. Изучение его осадков позволяет реконструировать события голоцена на севере

Байкальской рифтовой зоны. Рассчитанные данные по соотношению минеральных фаз в осадках использовались как индикатор изменения климата (рис. 3).

Рис. 3. Распределение минеральных компонентов в осадках оз. Баунт по данным ФХМ (вес. %). Обозначен линейный тренд изменения содержания минералов.

Увеличение доли иллита (продукта разрушения почв) свидетельствует о преобладании химического выветривания и общем потеплении климата. Сопоставление интервалов, выделенных по расчетной минералогии, с данными палинологического исследования [1] позволило подтвердить существование различных по климату периодов в регионе.

Осадки озера Хубсугул представлены керном ст. HSG-01-01. Моделирование проведено по 8 точкам, включающим плейстоценовые глины и голоценовые диатомовые илы.

Установлена следующая закономерность в распределении минеральных фаз: иллит и иллит-сметтит преобладают в голоценовой части разреза, их количество изменяется от 25 % в сартанских глинах, залегающих в основании разреза, до 50 % в голоценовых диатомовых илах. Содержание хлорита от 11 % в осадках сартанского оледенения снижается до 2-3 % в голоценовых отложениях. Мусковит присутствует только в нижних интервалах разреза – 2,5 %. Содержание полевых шпатов в карбонатных глинах составляют 16 %, а в диатомовых илах не более 8 %. Карбонаты присутствуют повсеместно, но в голоценовых осадках это терригенный доломит, а в ледниковую эпоху это низкомагнезиальный аутигенный кальцит. О холодном климате свидетельствует наличие в осадках карбонатов, мусковита и хлорита. Изменение КО по разрезу отражает общую тенденцию потепления климата от плейстоцена к голоцену.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установленная взаимосвязь вариаций минерального состава осадков с палеоклиматическими событиями свидетельствует о том, что они могут служить неопенимым источником информации об условиях, в которых протекали процессы выветривания, перенос и седиментация вещества в конечных бассейнах сноса, а также диагенетических процессах. Обнаружение таких минералогических индикаторов в летописях осадков – обязательный этап детальной реконструкции палеоклимата. Так, геологические особенности, а именно вещественный состав пород, тектонический режим, отражены на общей структуре и минералогии осадочных разрезов. Однако при неизменном водосборном бассейне климатические изменения оказываются решающим фактором смены минеральной ассоциации.

Оценить изменения минерального состава и выделить наиболее перспективные для дальнейшего изучения интервалы керна позволяет метод ФХМ. С его помощью проанализированы соотношения минералов в осадках озер Байкал, Хубсугул, Баунт. Это позволило выделить основные геологические и климатические события в регионе.

С помощью ФХМ можно получить новую информацию о минеральном составе осадков. Рассчитать общие стехиометрические формулы и определить их термодинамические свойства.

Подобный подход может быть успешно использован для осадочных разрезов любых континентальных водоемов средних и высоких широт, а также для других типов осадочных разрезов. Его применение наиболее перспективно в тех случаях, когда изучаются глубокие, например, нефтеразведочные, скважины и требуется определить источник сноса осадочного вещества.

Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РНФ (грант № 16-17-10079) и в рамках выполнения государственного задания по проекту IX.130.3.2. (0350-2016-0033).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Безрукова Е.В. Изменение природной среды северо-востока Республики Бурятия в пост-оптимальный период голоцена: первые результаты / Е.В. Безрукова [и др.] // Сибирский экологический журнал – 2017. – № 4. – С. 498-511.
2. Кузьмин М.И. Глинистые минералы донных осадков озера Байкал как индикатор палеоклимата / М. И. Кузьмин [и др.] // Геология и геофизика. – 2000. – Т. 41. – № 10. – С. 1347–1359.
3. Солотчина Э. П. Структурный типоморфизм глинистых минералов осадочных разрезов и кор выветривания / Э.П. Солотчина. – Новосибирск : Академ. изд-во «Гео», 2009. – 234 с.
4. Чудненко К.В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения / К. В. Чудненко – Новосибирск : Изд-во «Гео», 2010. – 287 с.

PHYSICOCHEMICAL MODELING OF THE MINERAL COMPOSITION OF BOTTOM SEDIMENTS

Oshchepkova A.V., Bychinskiy V.A., Chudnenko K.V.

Vinogradov Institute of Geochemistry SB RAS, Irkutsk, Russia

АННОТАЦИЯ. The "Selector" software complex calculates the mineral composition of the bottom sediments of Lake Baikal, Lake Khubsugul and Lake Baunt based on the chemical composition of precipitation. Trends in the ratio of minerals in bottom sediments have been established. It coincides with geological and climatic changes in the Central Asian region in the late Cenozoic. The study of the association of layered silicates made it possible to determine the conditions of weathering prevailing at different periods in the catchment basin. Consolidated stoichiometric formulas of illites, chlorites, illite-smectites, feldspars were obtained. They base on ideal model of a solid solution.