

ЧАСТЬ 2. МОДЕЛИ И УСЛОВИЯ РУДООБРАЗОВАНИЯ

А. А. Оболенский, Л. В. Гущина

Институт геологии и минералогии СО РАН, г. Новосибирск

obolensk@uiggm.nsc.ru

Компьютерное термодинамическое моделирование процессов гидротермального рудообразования минеральных месторождений (прикладные аспекты)

Разработка критериев поиска и оценки источников новых минеральных ресурсов остается одной из актуальных проблем, решаемых мировым геологическим сообществом [Ores..., 2009; Pirajno, 2008; The challenge..., 2010]. Успешное решение этой проблемы предусматривает развитие как теоретических, так и прикладных направлений геологических исследований, обеспечивающих прогресс. Как известно, основой современной методологии металлогенической оценки известных и еще не открытых минеральных ресурсов является региональный тектоно-металлогенический анализ, предусматривающий выявление закономерностей размещения и условий образования важнейших **модельных типов** минеральных месторождений, в том числе, в первую очередь, крупных и уникальных [Nokleberg et al., 2007]. Тектонические построения базируются на теории литосферных плит и глубинной геодинамики, а металлогенический анализ выполняется с использованием палеогеодинамических реконструкций и террейнового анализа. Разработанная методология позволяет выделять металлогенические пояса, специализированные на определенные модельные типы месторождений в пределах тектоно-стратиграфических террейнов, различных по геодинамической обстановке формирования: кратонных, пассивной и активной окраин, островодужных, аккреционного клина, задуговых бассейнов, внутриплитного рифтогенеза и др.

Важнейшим элементом металлогенического анализа является систематика всех известных месторождений с выделением их **модельных типов**, как естественных ассоциаций или групп близких по минеральному составу, генезису и геологическим условиям образования, сформировавшихся в **определенных геодинамических обстановках**. Именно это отличает «модельный тип» от «рудной формации» как понятия более широкого, объединяющего «группу месторождений со сходными по составу устойчивыми минеральными ассоциациями, образующихся в близких геологических условиях» [Кузнецов и др., 1983]. С позиций геосинклинальной теории положение рудной формации в истории развития тектонических структур было невозможно определить более точно и конкретно, что еще в то время вызывало острые дискуссии об объеме и границах отдельных рудных формаций, их соотношении и соответствии определенной магматической или геологической формации, тектоническому событию.

В ходе металлогенических исследований последних лет, выполненных на основе тектонических реконструкций с позиций теории литосферных плит, рудно-формационная систематика минеральных месторождений была преобразована в си-

стематику их модельных типов [Obolenskiy et al., 2006]. Было установлено, что, в основном, рудные формации соответствуют главным модельным типам месторождений, хотя в отдельных случаях такое соответствие имело место для субформаций, а чаще для минеральных типов месторождений в рудно-формационной систематике. В сущности, рудно-формационная систематика нуждается в некоторой ревизии, уточнении и конкретизации геодинамических обстановок проявления конвергентных рудных формаций. Объект моделирования должен отвечать требованиям единства, исключая широко развитые в природе явления конвергенции, что позволяет создать обобщенный модельный образ процесса рудообразования для конкретного модельного типа месторождений или класса гидротермальной рудно-магматической системы (вулканогенно-гидротермальный; гидротермально-осадочный, плутоногенный, метаморфогенно-гидротермальный и т.д.).

Для построения имитационных количественных генетических моделей процессов рудообразования используется компьютерное термодинамическое моделирование на основе современных программных комплексов [Алексеев и др., 2005]. Физико-химическое моделирование процессов в системе вода–порода–газ стало широко применяться в геохимических исследованиях после появления работ Р. М. Гаррелса о минеральных равновесиях в водных растворах [Garrels, Christ, 1968]. Первая компьютерная программа по расчету равновесного состояния системы вода–порода была создана Г. Хелгесоном [Helgeson, 1969]. Позже в России были разработаны более универсальные и быстродействующие программы «Селектор» И. К. Карповым и др. (1981) и «Gibbs» Ю. В. Шваровым (1988), «Hydrogeo» М. Б. Буканты, «Geochem» М. В. Мироненко с соавторами и др. Численные термодинамические программы предназначены для водных систем, в которых изменения химического состава зависят от происходящих в них физико-химических процессов на геохимических барьерах. Применение компьютерного термодинамического моделирования позволяет полнее понять и реконструировать процесс рудообразования различных гидротермальных рудных месторождений, в том числе месторождений мирового класса, проследить развитие рудообразующей системы от ее зарождения до концентрированного рудоотложения и затухания, в каждом конкретном рудном узле или месторождении. Модели применимы к равновесным гидротермальным системам, а расчеты основаны на константах равновесия (химическое взаимодействие описывается набором уравнений для заранее заданного списка химических реакций) или «минимизации свободных энергий» Гиббса. Все полученные характеристики (рН, Eh концентрации, химические формы и минеральные ассоциации) равновесного состояния системы при данных T, P, выполненные методом минимизации свободной энергии или путем решения системы уравнений констант равновесия химических реакций, являются результатом химических взаимодействий между водой, газами и породой.

Следует отметить, что если в России наиболее известные программные пакеты основаны на методике минимизации свободной энергии (программы «Gibbs», «Селектор», «Geochem»), то за рубежом заметно доминирует применение метода констант равновесия (Chiller, Reed; Geochemist's Workbench, Bethke и др.), причем, часто последние вводятся по данным экспериментальных исследований, а не рассчитываются на основе справочных термодинамических параметров. Для применения сложных компьютерных моделирующих систем всегда необходим анализ корректности применяемого алгоритма и получаемых результатов, для чего обычно применяются процедуры, называемые верификацией. Таким образом, практическое применение численных физико-химических моделей системы вода–порода и соответствующую

щих им программных средств требует обязательной проверки путем сравнения получаемых с их помощью результатов друг с другом и с имеющимися экспериментальными данными, в том числе, с результатами геолого-геохимического изучения реальных природных систем. При этом особое внимание должно быть уделено качеству предварительного параметрического описания объекта моделирования, чтобы избежать или максимально уменьшить влияние погрешностей исходных аналитических данных на результаты моделирования. Очевидно и то, что моделируемые системы и процессы должны по возможности адекватно учитывать протекающие в реальных природных системах процессы и не должны выходить за границы теоретически оправданной области их применения.

К настоящему времени выполнены многочисленные работы по моделированию разнообразных геохимических процессов, детально описанные в специальных монографиях и многочисленных статьях [Алексеев и др., 2005; Reed, 1998; Карпов, 1981 и др.]. В общем случае, моделирование – это описание объекта или процесса в отношении некоторых его свойств. Совокупность этих выбранных свойств и описание взаимосвязей между ними и образует модель. Очевидно, что модель не может полностью описывать сложную природную систему во всем ее многообразии. Для создания модели всегда требуются определенное упрощение и формализация реального объекта. В частности, при моделировании химических взаимодействий вода–порода в пространстве выделяется некоторый изолированный объем, заполненный минералами, водным раствором и, возможно, газовой фазой – так называемая система. Минералы рассматриваются как твердые вещества, имеющие определенный химический состав или состав, меняющийся в определенных пределах. Водный раствор рассматривается как жидкая фаза, составленная растворителем – водой и растворенными частицами, газовая фаза – как смесь газов. Если система не находится в состоянии химического равновесия, в ней протекают химические реакции, проявляющиеся в изменении качественного и количественного минерального состава породы и концентраций компонентов водного и газового растворов.

Как уже отмечалось, гидротермальные рудообразующие системы являются динамическими. За счет фильтрации и смешения водной фазы, сопровождаемых химическими взаимодействиями раствор–порода, в отдельных участках этих систем постоянно меняется валовой химический состав, имеются значительные градиенты температуры и давления. Применение аппарата равновесной термодинамики для расчета химических взаимодействий в таких системах базируется на принципе локального или мозаичного равновесия [Коржинский, 1969]. Согласно этому принципу, в неравновесной в целом системе вода–порода выделяются некоторые пространственные блоки, характеризующиеся на некоторое время определенными температурой, давлением и постоянным валовым химическим составом. Полагается, что в каждом из этих блоков достигается полное или частичное химическое равновесие, после чего водный раствор перемещается в следующий блок, а его место занимает раствор, пришедший из предыдущего блока. Таким образом, из последовательности блоков, в которых происходят химические взаимодействия, образуется «проточный химический реактор». Собственно расчет равновесного состава гетерогенной многокомпонентной системы вода–порода или вода–порода–газовая фаза в каждом таком блоке и является ключевой составляющей термодинамического моделирования гидротермальных процессов.

В России наиболее популярны программные комплексы «Селектор» [Карпов, 1981] и «GIBBS», включающие базы данных UNITHERM [Шваров, 1988]. Следует

отметить, что база термодинамических данных, используемая комплексом «Селектор» внутренне согласована, но не согласована со всеми прочими общеупотребимыми базами термодинамических данных. Кроме того, для расчета точечных равновесий может быть использован достаточно удобный авторский программный комплекс GEOSHEM, использующий базу данных SUPCRT-98 [Mironenko et al., 2000].

Нами в Институте геологии и минералогии СО РАН используется американский программный комплекс «Chiller», разработанный профессором Орегонского университета в США М. Ридом [Reed, 1982]. Он базируется на методе констант равновесия с использованием сопутствующей ему термодинамической базы данных «Soltherm-98» [Johnson et al., 1992], дополненной нашими данными по хлоридным, сульфидным и смешанным комплексам сурьмы. Этот программный комплекс позволяет рассчитывать различные модели: простого охлаждения, изознтальпического кипения, смешения растворов, взаимодействия раствор–порода. Такой набор модельных подходов позволяет осуществить имитационное моделирование процессов гидротермального рудообразования различных модельных типов минеральных месторождений, однако его возможности ограничиваются верхним температурным пределом 300 °С и отсутствием некоторых термодинамических параметров протекания гидротермальных процессов в природных условиях.

В данной работе приводятся конкретные результаты модельных построений для хорошо изученных ртутных, сурьмяно-ртутных, золото-ртутных, золото-кварцевых малосульфидных и других месторождений и отдельных многокомпонентных систем, опубликованные в журнале «Геология и Геофизика» № 12, 2006; № 12, 2007; 2009 (в печати) и др.

Литература

Алексеев В. А., Рыженко Б. Н., Шварцев С. А. и др. Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода–порода, т. Система вода–порода в земной коре: взаимодействие, кинетика, равновесие, моделирование. Новосибирск: СО РАН, 2005. 243 с.

Карпов И. К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск, Наука СО, 1981. 248 с.

Шваров Ю. В. Расчет равновесного состава гидрогеохимических систем методом минимизации свободной энергии // Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. М.: Недра, 1988. С. 109–154.

Johnson J. W., Oelkers E. H., Helgeson H. C. SUPCRT92: A software package for calculation the standard molar thermodynamic properties of mineral, gases, aqueous species of reactions from 1 to 5000 bar and 0 to 1000 C // Computers and Geosciences. Vol. 18. P. 899–947.

Mironenko M. V., Akinfiyev N. N., Melikhova T. Yu. GEOCHEQ – the complex for thermodynamic modeling of geochemical systems // Herald of DGGGMS RAS, 2000. Vol. 25 (15). P. 96–98.

Nokleberg W., Bundzen T., Dawson et al. Overview of Methodology of Combined Regional Metallogenic and Tectonic Analysis // Proc. For a workshop on deposit modeling mineral resources assessment, and their role in sustainable development. USGS, Reston, Virginia, Circular 1294, 2007. P. 85–99.

Obolenskiy A., Rodionov S., Arimbeleg S. et al. Mineral deposits models of North East Asia // Tectonic and Metallogenesis of NE Asia, USGS Prof. paper, 2009 (in press).

Ores and Orogenesis. A Symposium honoring the career of W.R. Dickinson. Tucson, Arizona, USA, 2007. 198 p.

Pirajno F. Hydrothermal processes. Springer, Heidelberg, Germany, 2008. 700 p.

The Challenge of Finding New Mineral Resources: Global Metallogeny Innovative Exploration and New Discoveries. SEG 2010 Conference, October 2-5, Keystone, Colorado, USA. www.seg2010.org

В. В. Масленников¹, Г. А. Третьяков², И. Ю. Мелекесцева¹

¹ – *Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс
mas@mineralogy.ru*

² – *Институт геологии и минералогии СО РАН, г. Новосибирск*

Физико-химическое моделирование минералообразования при субмаринном гипергенезе сульфидно-серпентинитовых обломочных отложений

На колчеданных месторождениях устанавливаются многочисленные находки сульфидных песчаников и продуктов их преобразования. При этом в каждом типе месторождений они имеют свою последовательность минералообразования, зависящую от состава рудокластитов и примесей осадочного материала [Масленников, 1999; 2006; Сафина, Масленников, 2007; 2008]. Кобальт-медноколчеданные месторождения (Ишкининское, Дергамышское) в зоне Главного Уральского разлома, залегающие в серпентинитах, имеют своеобразную историю преобразования обломочных сульфидных отложений [Мелекесцева, 2007].

Обломочные руды главного рудного тела Дергамышского месторождения, не содержащие примесного хромит-серпентинитового материала, сложены рудокластами колломорфного или зернистого грубозонального пирита с вкрапленностью халькопирита и сфалерита [Зайков и др., 2001]. Колломорфный пирит нередко преобразован и превращен в зернистые агрегаты, индивидуумы которого характеризуются грубой зональностью ангедральных кристаллов, что типично для массивных колчеданных руд, испытавших диагенез [Ярош, 1973]. Рудный слой мощностью 20 см среди серпентинитов, залегающий на северном фланге рудного поля, содержит обломки пирротина и пирита, а также угловатые обособления халькопирита, по форме напоминающие обломки и образующие сростания с изокубанитом [Мелекесцева, 2007]. Замещение первичных минералов халькопиритом характерно для многих колчеданных месторождений кипрского и уральского типов, богатых дисульфидами железа [Масленников, 1999; 2006].

В серпентинит-сульфидных гравелитах Дергамышского месторождения обломки колломорфных и массивных агрегатов пирита обычно почти полностью замещены халькопиритом и пирротинном. Псевдоморфный пирротин цементирует реликтовые зерна пирита или образует решетчатые сростания пластинчатых кристаллов, нередко частично замещенных кварцем либо обросших более поздними конкреционными агрегатами пирита. В отличие от кластогенного конкреционный пирит травится плохо. Травление этих конкреций в $\text{HNO}_3 + \text{CaF}_2$ не обнаруживает осцилляторной зональности роста. В некоторых зернах после травления проявляется секториальность и своеобразные «перистые» скульптуры поверхности срезов, типичные для