

БАНК ДАННЫХ “REETHERM” ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

К.Г.Моргунов, Г.Р.Колонин, Г.П.Широносова

Институт минералогии и петрографии СО РАН, Новосибирск

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 98-05-65299) и Научно-технической программы “Университеты России – фундаментальные исследования” (грант 2787)

Вестник ОГГГН РАН № 5 (15) 2000 т.1

URL: http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/5-2000/hydroterm17a

Развитие баз данных (БД) термодинамических свойств минералов и растворенных частиц [1,2 и др.] создает предпосылки для физико-химического моделирования причин и направлений фракционирования РЗЭ и Y в процессах гидротермального рудообразования. Широко известные БД, входящие в программно-вычислительный комплекс “Селектор” [3], UNITHERM, появившаяся для программы минимизации свободной энергии GIBBS [4], а в настоящее время встроенная в программный комплекс “Hch” [5], SUPCRT92 [6], SUPCRT96 [1] и др., как показывает наш опыт, являются хорошей основой для решения этой задачи. Для обеспечения возможностей моделирования гидротермальных

равновесий с участием РЗЭ авторами создан банк данных REETHERM, в котором в качестве основного алгоритма используется уравнение HKF. Применение программного языка Delphi Client/Server и представление информации в файлах формата dBase позволяет ориентировать банк для работы с информационными сетями. Разработанное программное обеспечение предназначено для использования в операционной системе Windows.

Предлагаемый банк термодинамической информации, включает три программно связанные друг с другом базы данных BASE1, BASE2 и BASE3, структура файлов которых показана на рис. 1.

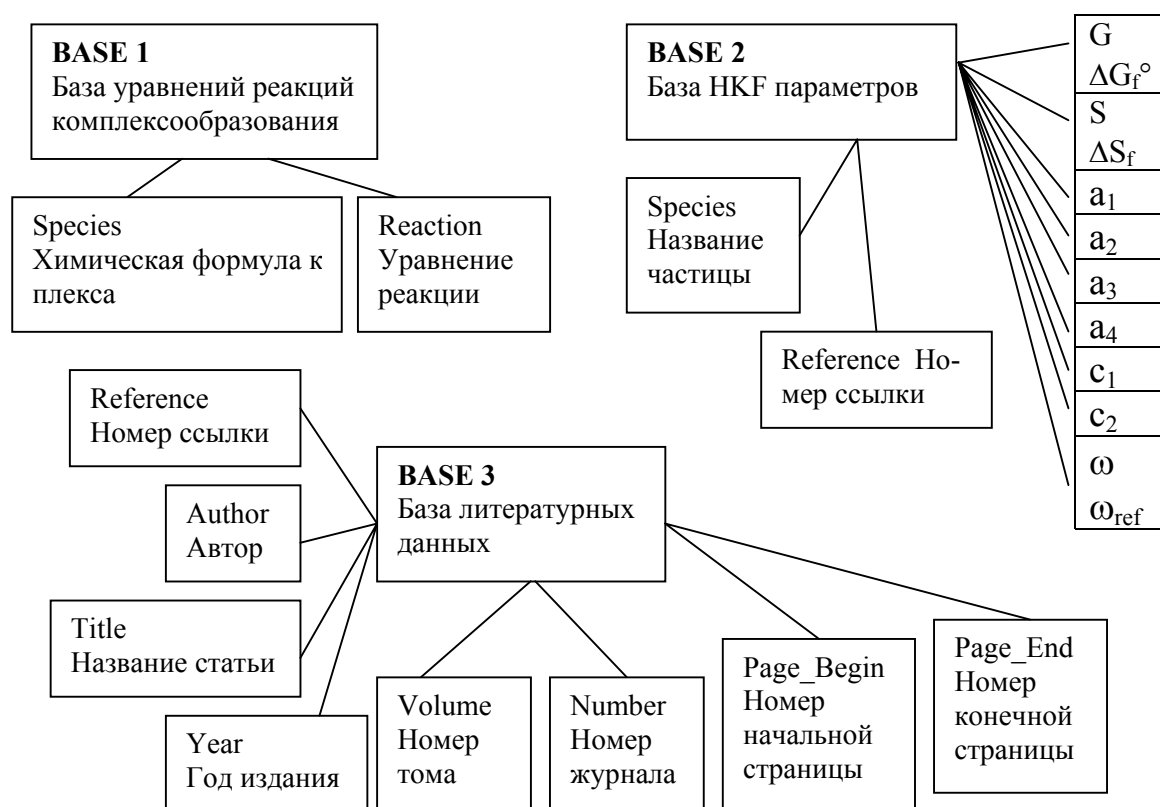


Рис. 1. Структура файлов баз данных BASE1, BASE2, и BASE3 (первая строчка на схеме обозначает название поля базы данных)

На рис. 2 представлена блок-схема программного алгоритма, работа которого состоит из следующих этапов: а) выбор из списка имеющихся в BASE1 данных химической формулы тре-

буемого комплексного соединения; б) поиск подпрограммой SEARCH1 требуемого комплексного соединения в поле SPECIES базы данных HKF параметров; в) поиск подпрограммой SEARCH2

уравнения реакции требуемого комплексного соединения в поле SPECIES, связывающем BASE1 и BASE2; г) выполнение подпрограммой DISTINGUISH операции по выделению из уравнения реакции образования комплекса химических формул всех участвующих в реакции частиц и соответствующих им стехиометрических коэффициентов; д) поиск подпрограммой SEARCH3 компонентов реакции по полю SPECIES в базе данных HKF параметров; е) формирование файла исходных данных и соответствующих им библиографических данных BASE3 поля REFERENCE; ж) выполнение расчета и вывод на экран результата в виде логарифмов констант устойчивости заданного комплекса во всем диапазоне температур и давлений.

На настоящем этапе формирования банка данных REETHERM основное внимание уделялось гидроксильным, фторидным, карбонатным и бикарбонатным комплексным соединениям РЗЭ, играющим главную роль в геохимических процессах с участием лантаноидов. При этом с помощью специальной программы обеспечена возможность коррекции констант для двух последних типов комплексов в связи с изменением диэлектрической проницаемости растворителя в

случае повышенных содержаний в нем углекислоты как неполярного газового компонента [7].

Потенциальные пользователи могут получить более детальные данные о банке данных REETHERM и возможность использования содержащейся в нем информации на Web-странице (<http://www.uiggm.nsc.ru:8082/uiggm/mineralogy/lab454/program.htm>) сайта Объединенного института геологии, геофизики и минералогии СО РАН.

1. Haas J.R., Shock E.L., Sassani D.C. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1995, v.59, p.4329-4350.
2. Shock E.L., Sassani D.C., Willis M., Sverjensky D.A. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 1997, v. 61, №5, p.907-950.
3. Дорогокупец П.И., Карпов И.К. Термодинамика минералов и минеральных равновесий. Новосибирск., Наука, 1984, 184 с.
4. Борисов М.В., Шваров Ю.В. Термодинамика геохимических процессов. М.: Изд-во МГУ, 1992, 256 с.
5. Шваров Ю.В. *Геохимия*, 1999, №6, с.646-652.
6. Johnson J., Oelkers E., Helgeson H. *Computers and Geosciences*, 1992, v.18, p.899-947.
7. Колонин Г.Р., Пальянова Г.А., Широносова Г.П., Моргунов К.Г. *Геохимия*, 1994, №12, с.1725-1733.

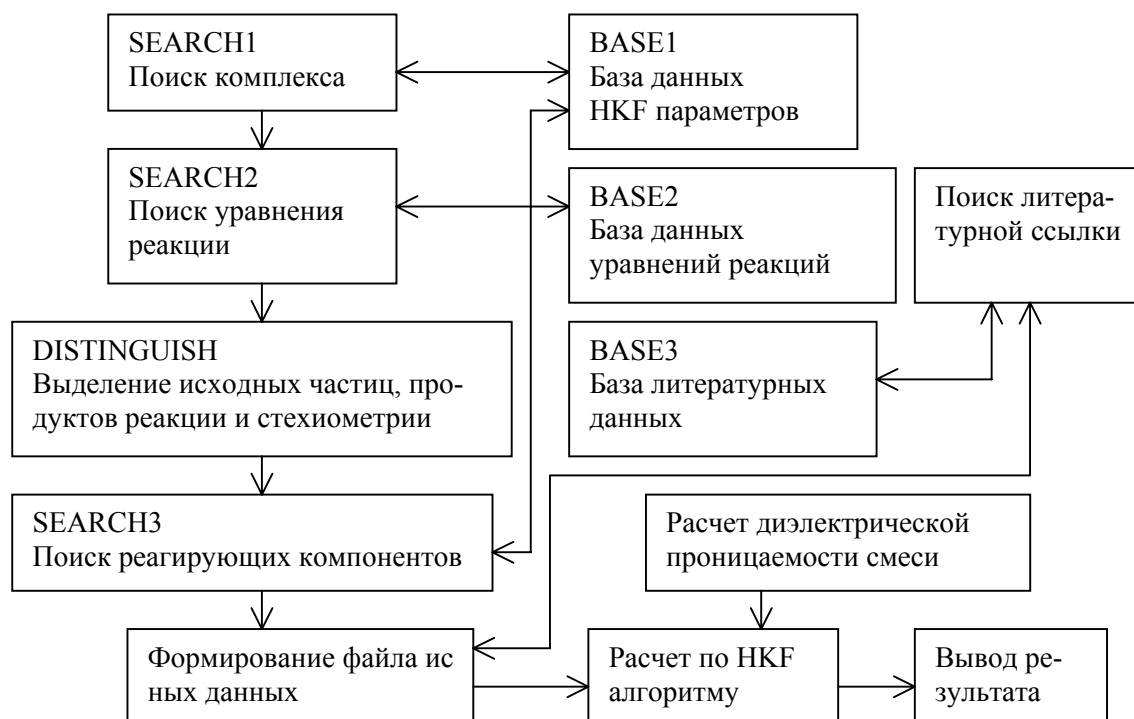


Рис. 2. Блок-схема программного обеспечения