

УДК 551

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ  
ЭЛЕМЕНТОВ В УЛЬТРАОСНОВНЫХ ПОРОДАХ  
ГОМЕЛЬСКОЙ СТРУКТУРНОЙ ПЕРЕМЫЧКИ****Корепанов Николай Игоревич**

магистрант

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины  
Гомель (Беларусь)*author@apriori-journal.ru*

**Аннотация.** Рассматривается моделирование содержания редкоземельных элементов в породах конкретного геологического региона. Для исследований используются два вида функциональных зависимостей. На основании полученных модельных функций проводится типизация пород региона.

**Ключевые слова:** ионный потенциал; функциональная зависимость; дивариантный график; содержание элемента.

---

**MODELLING OF DISTRIBUTION OF RARE EARTH ELEMENTS  
IN ULTRABASSIC ROCKS OF THE GOMEL STRUCTURAL DAM****Korepanov Nikolay Igorevich**

undergraduate

Francisk Skorina Gomel State University, Gomel (Belarus)

**Abstract.** Modeling of the contents of rare-earth elements in rocks of the concrete geological region is considered. For researches two types of functional dependences are used. On the basis of the received model functions typification of breeds of the region is carried out.

**Key words:** ionic potential; functional dependence; bivariant plot; content of an element.

## **Введение**

Содержание редких элементов в породах является сравнительно малой величиной, к тому же концентрации элементов отличаются иногда на несколько порядков. В виду этих обстоятельств расчеты, связанные с такими элементами проводятся с применением нормализации содержания элемента по стандарту [1; 2]. Далее полученные данные отражаются в дивариантных графиках (нормированное содержание – элемент).

В работе рассматривается возможность проведения количественного представления оси абсцисс, которое обычно представляет собой качественную вариацию. Сходимость результатов исследований проверяется в сравнение с «классическим подходом», используемым в науке.

## **Математическое моделирование**

Возможность проведения математического моделирования основывается на том, что распределение редкоземельных элементов (РЗЭ) в породах в основном однородно, а отличия обуславливаются изменением ионного радиуса по мере роста атомного номера [3]. На основании данного положения была выдвинута гипотеза о том, что распределение редкоземельных элементов в рамках изучаемого региона зависит от ионного потенциала. Под ионным потенциалом (ИП) понимается отношение степени окисления, которую проявляет элемент в соединении, к величине соответствующего ионного радиуса (единицы измерения ИП – радиус<sup>-i</sup>). Данный параметр должен точно отражать характеристику атома химического элемента и потому следует рассмотреть такие приближения как распределение заряда в одномерном, двухмерном и трехмерном объекте (т.е. использовать отношение степени окисления к радиусу в *i*-той степени).

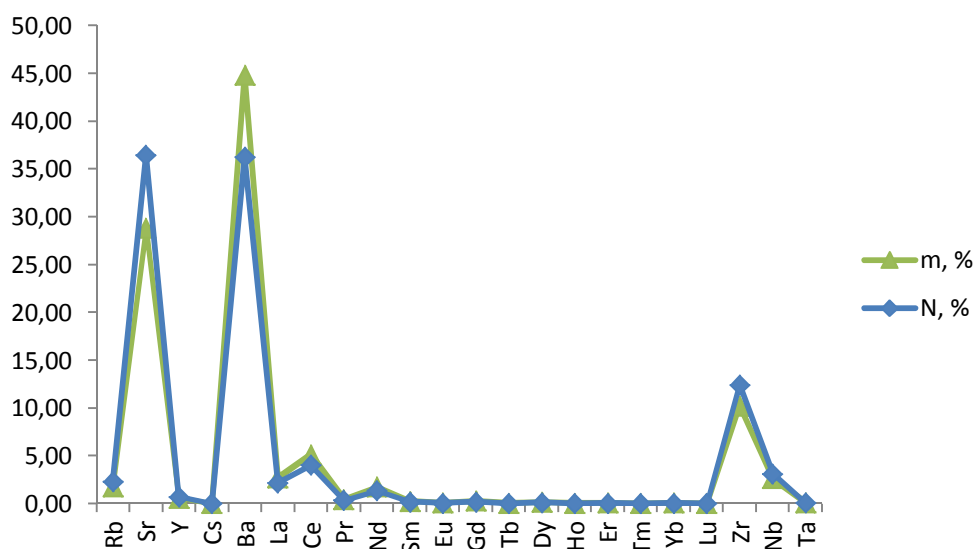
**Величины ионных потенциалов РЗЭ**

Элемент	Степень окисления	Радиус иона, пм	ИП1•10 <sup>2</sup> , пм <sup>-1</sup>	ИП2•10 <sup>4</sup> , пм <sup>-2</sup>	ИП3•10 <sup>6</sup> , пм <sup>-3</sup>
La	3	101,6	2,95	2,91	2,86
Ce	3	103,4	2,90	2,81	2,71
Pr	3	101,3	2,96	2,92	2,89
Nd	3	99,5	3,02	3,03	3,05
Sm	3	96,4	3,11	3,23	3,35
Eu	3	95,0	3,16	3,32	3,50
Gd	3	93,8	3,20	3,41	3,64
Tb	3	92,3	3,25	3,52	3,82
Dy	3	90,8	3,30	3,64	4,01
Ho	3	89,4	3,36	3,75	4,20
Er	3	88,1	3,41	3,87	4,39
Tm	3	87,0	3,45	3,96	4,56
Yb	3	85,8	3,50	4,08	4,75
Lu	3	85,0	3,53	4,15	4,88

Исходя из данных приведенных в таблице 1 видно, что по величине ионного потенциала любой степени лантан имеет большее значение, чем церий, несмотря на меньшее значение атомного номера. Это позволяет исключить рассмотрение в качестве аргумента именно величину атомного номера и массы, так как распределение элементов будет зависеть от способности образовывать устойчивые соединения, а также принимая во внимание то, что РЗЭ являются редкими элементами и не образуют в достаточных количествах собственные минералы, а существуют в виде структур, изоморфных другим веществам. Из трех рассчитанных ионных потенциалов в виду наличия общих закономерностей их изменения для проведения дальнейших расчетов использовался ионный потенциал 1 (т.е. по физическому смыслу относящийся к линейному

распределению заряда). Остальные потенциалы, в особенности третий, разумно использовать при одновременном рассмотрении элементов, проявляющих различные степени окисления, например, крупноионные литофилы и РЗЭ.

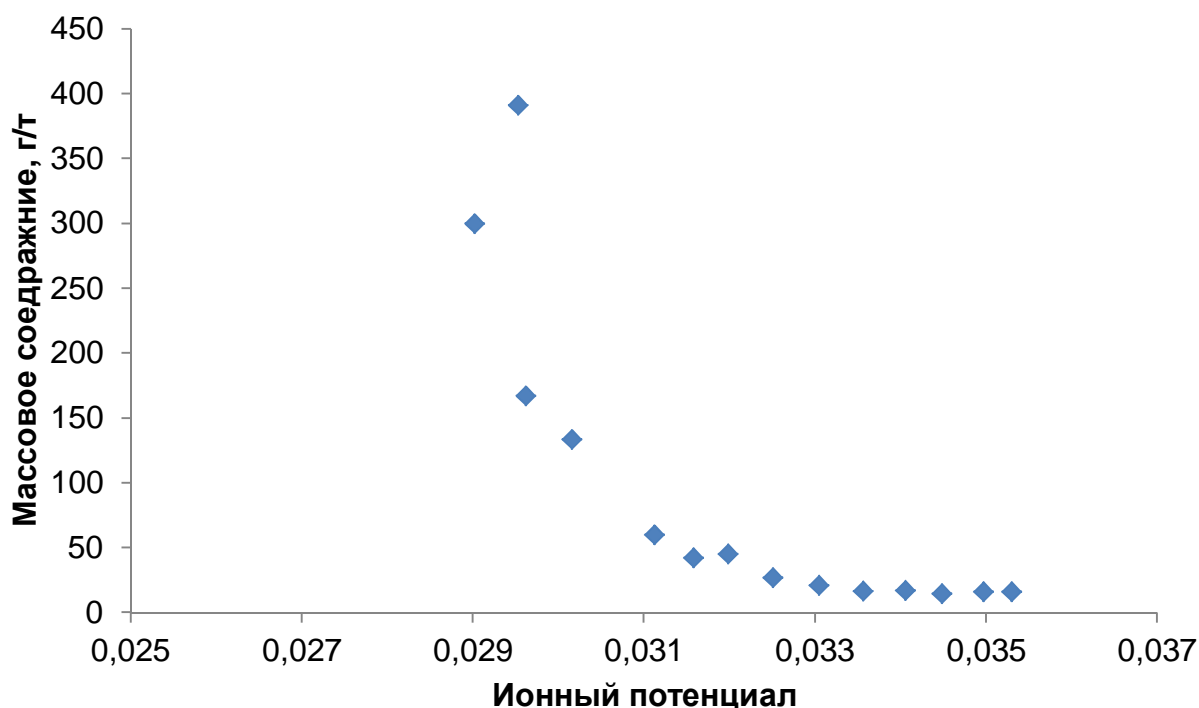
Параметр, исследуемый при помощи модели, это содержание элемента, среди которого различают массовое и количественное (представляющее собой отношение массового содержания к относительной атомной массе). В виду одинакового вида кривых (рисунок 1) оба варианта проведения расчетов равносильны и при дальнейших расчетов построение проводилось на основе массового содержания.



**Рис. 1. Сравнение величин массового и количественного содержания редких в породах**

Выбор функции, на основании которой проводится построение модели, определяется видом эмпирических точечных диаграмм, построенных координатах «содержание элемента – ионный потенциал» (рисунок 2).

Исходя из вида графика можно заключить, что наиболее вероятными функциональными зависимостями будут являться степенная ( $y = ax^b$ ) и экспоненциальная ( $y = a \exp(bx)$ ). Данное обстоятельство хорошо согласуется с фактом о широкой распространенности такого рода зависимостей в природе, например, рост популяций в биологии, кинетика радиоактивного распада в физике.



**Рис. 2. Эмпирическая точечная диаграмма**

Для определения численных значений параметров **a** и **b** в функциональных зависимостях использовались линии тренда. Далее на основании полученных функций рассчитывалось содержание элемента в породе (таблица 2) и сравнивалось с эмпирическим значением при помощи метода хи-квадрат (число степеней свободы 13, величина  $\chi^2_{st} = 27,69$ ).

### **Результаты моделирования**

В ходе проведения расчетов получены функциональные зависимости:

- степенная зависимость:  $y = 1,0 \times 10^{-25}x^{-17,57}$ , ( $R^2 = 0,9353$ );
- экспоненциальная зависимость:  $y = 7,0 \times 10^8 \exp(-545,2x)$ , ( $R^2 = 0,9250$ ).

Значение  $R^2$  показывает, что данные зависимости проявляются в большинстве случаев.

Использование метода хи-квадрат позволяет разделить породы исследованного геологического региона на следующие группы:

- образцы, удовлетворяющие нулевой гипотезе (т.е. содержание элементов не отличается от рассчитанного);

- образцы, удовлетворяющие нулевой гипотезе после исключения одного химического элемента (лантан). Это объясняется высоким содержанием последнего в породах;
- образцы, имеющие высокие концентрации нескольких элементов, чаще всего это легкие РЗЭ;
- образцы с высоким содержанием РЗЭ и соответственно имеющие высокие значения хи-квадрата.

Таблица 2

**Содержание редкоземельных элементов  
в исследованных образцах**

Элемент	Эмпирическое			Рассчитанное	
	min	max	среднее	$y = ax^b$	$y = a \exp(bx)$
La	11,8	471,3	160,74	75,53	71,39
Ce	9,0	335,7	116,90	102,83	94,48
Pr	6,7	185,1	66,49	71,70	68,07
Nd	5,7	144,2	52,22	52,33	50,83
Sm	3,1	60,7	23,56	30,01	29,96
Eu	1,8	45,8	18,07	23,21	23,33
Gd	2,5	48,9	18,23	18,56	18,72
Tb	1,8	28,7	10,48	13,98	14,10
Dy	1,4	23,2	8,08	10,48	10,52
Ho	1,2	19,1	6,98	7,98	7,94
Er	1,2	20,6	6,24	6,17	6,06
Tm	1,1	18,4	4,97	4,95	4,79
Yb	1,1	21,1	5,62	3,88	3,68
Lu	1,1	21,2	5,17	3,29	3,08

Для равноправности использования любой из рассматриваемых функций результаты полученные при расчетах должны совпадать, т.е. одни и те же образцы должны образовывать одну и ту же группу. Такая картина наблюдается во всех случаях (образцах) кроме одного, для ко-

того отклонение по церию немногим превосходит допустимое для включения в группу. Этот факт объясняется именно небольшим отклонением и дальнейшее разрешение вопроса заключается в более детальном рассмотрении параметров **a** и **b**, используемых в функциях.

Полученные данные по содержанию элементов в породах согласуются с видом трендов распределения [4], среди которых выделяются кривые, лежащие выше и ниже определенного среднего уровня, а также кривые, имеющие слабый L-образный изгиб (указывает на небольшое концентрирование элемента или группы элементов).

### **Заключение**

Закономерности в изменении ионного радиуса и степени окисления редкоземельных элементов, приводящие к сходному геохимическому поведению, позволяют проводить моделирование содержания элемента в породе. В качестве параметров модели возможно использование величин ионных потенциалов, а из функциональных зависимостей наиболее подходящими являются степенная и экспоненциальная.

На основании проведенных расчетов среди образцов исследуемого геологического региона (Гомельская структурная перемычка) можно выделить четыре различных типа, отличающихся по содержанию РЗЭ, среди которых имеются породы, обогащенные одним или несколькими элементами (лантан, церий, неодим).

### **Список использованных источников**

1. Хендерсон П. Неорганическая геохимия. М.: Мир, 1985. 339 с.
2. Чертко Н.К. Геохимия. Мн.: БГУ, 2008. 170 с.
3. Интерпретация геохимических данных / Е.В. Скляр и др. М.: Интерметинжиниринг, 2001. 288 с.
4. Михайлов Н.Д. Геохимические и изотопные вариации щелочных пород двух областей развития палеозойского магматизма Беларуси // Литосфера. 2008. № 1. С. 147-157.