

Таким образом, изучение макро- и микроэлементного состава живецко-фаменских пород юго-востока Русской плиты показало, что живецкие песчаники и алевролиты являются мелководно-морскими и сформировались в условиях речной дельты. Предполагаемым источником шитового материала, питавшего дельту, могли быть докембрийские комплексы Воронежского кристаллического массива [1]. Колганские терригенные породы отнесены к двум фаціальным зонам – зоне глубоководных конусов выноса и прибрежной зоне. Установлено, что тектоническая позиция и тип питающей провинции при накоплении колганской толщи были иными, чем в живецкое время: в бассейн седиментации поступал дифференцированный материал из областей островодужного вулканизма. Одной из таких областей была, вероятнее всего, активная в фамене Магнитогорская островная дуга [1].

Литература

1. Казьмин В.Г., Натапов Л.М. (Отв. ред.) Палеогеографический Атлас Северной Евразии. – М.: Институт тектоники литосферных плит, 1998. 26 листов.
2. Макарова С.П., Макаров Г.В. Геологическое строение девонских отложений северной прибортовой зоны Прикаспийской впадины // Геологическое обоснование поисков скоплений нефти и газа в Прикаспийском нефтегазоносном районе. – Саратов: НВНИИГ, 1983. – С. 99 – 104.
3. Никитин Ю.И., Рихтер О.В., Вилесов А.П., Махмудова Р.Х. Структура и условия формирования колганской толщи на юге Оренбургской области // Нефтегазовая геология. Теория и практика. – 2014. – 13 с.
4. Резников А.Н. Железо-марганцевый коэффициент как показатель обстановки осадконакопления // Изв. Вузов. Нефть и газ. Интерпретация геохимических данных. – 1961. – № 1. – С. 19 – 22.
5. Фомина Г.В., Кайдалов В.И., Борисова Е.В., Хусаинов Ш.З., Хоментовская О.А. Поиск неантиклинальных ловушек в терригенных отложениях Оренбургской области // Геология нефти и газа. – 1988. – № 10. – С. 14 – 6.
6. Фортунатова Н.К., Зайцева Е.Л., Бушуева М.А. и др. Унифицированная субрегиональная стратиграфическая схема верхнедевонских отложений Волго-Уральского субрегиона. Объяснительная записка. – М.: ФГБУ ВНИГНИ, 2018. – 64 с.
7. Bhatia M.R., Crook K.A.W. Trace element characteristics of greywackes and tectonic setting discrimination of sedimentary basins // Contributions to Mineralogy and Petrology. – 1986. – V. 92. – P. 181 – 193.
8. Cullers R.L. Implications of elemental concentrations for provenance, redox conditions, and metamorphic studies of shales and limestones near Pueblo, CO, USA // Chemical Geology. – 191. – P. 305 – 327.
9. Floyd P.A., Leveridge B.E. Tectonic environment of the Devonian Gramscatho basin, south Cornwall: framework mode and geochemical evidence from turbiditic sandstones // Journal of the Geological Society. – 1987. – V. 144. – P. 531 – 542.
10. Taylor S.R., McLennan S.M. The Composition and evolution of the continental crust – Rare-earth element evidence from sedimentary rocks // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. – 1981. – V. 301. – P. 381 – 399.

ВЫЯВЛЕНИЕ КЛАСТЕРОВ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В УГЛЕФИЦИРОВАННОМ ВЕЩЕСТВЕ НА ИК-СПЕКТРЕ

А.А. Дмитриенко

Научный руководитель доцент В.П. Иванов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Возможность применения метода инфракрасной спектроскопии (ИКС) для выявления металлоорганических соединений в углефицированных веществах (УФВ) была рассмотрена в работе [2]. В продолжение предыдущей работы были проанализированы справочные данные авторов [1, 4, 5, 6], которые выделяют диапазоны и отдельные частоты ИК-спектра неорганических и металлоорганических связей. В частности, авторы [1] выделяют 15 интервалов разных видов соединений, объединяя их в группы валентных и деформационных связей. Авторы другой работы [5] группируют связи элементов C, N, O, H, Si, P, S между собой в 20 групп, например, C-N, C-H, C-O, C-C, N-H, C-S, C-Si, C-P, N-S и т.д. Автор [4] группирует виды связи по металлоорганическим и биоорганическим соединениям, а автор [6] систематизирует связи по аналогии с авторами [5], уделяя больше внимания отдельным видам связей характерных соединений, например, углеводородные, гидроксильные и т.д.

При исследовании методом ИК-спектроскопии углефицированных веществ, к которым относятся уголь, кероген, фитолейм, торф, герба, химические связи C, N, O, H, Si, P, S, по сути, являются основообразующими тканевую материю растений-углеобразователей и структурообразующими материю углефицированного вещества [3]. В диапазоне 0,01 нм до 1000 мкм выделяют разные организации материи на атомарном, молекулярном, надмолекулярном уровнях, в видимой области выделяют наноструктуры, микроструктуры (агрегаты или кристаллы), макроструктуры (зёрна мацералов или минералов).

Однако в инфракрасной спектроскопии средней области выделяют функциональные связи или их группы применительно к химическим соединениям. Систематизация связей по соединениям (химический подход) и систематизация по организации материи (физический подход) плохо согласуется, если рассматривать в указанном выше иерархическом ранжировании. Поэтому автором была предпринята попытка подойти иначе к систематизации справочных данных химических связей, применяя кластерный анализ [7], то есть группировки связи элементов в кластеры по интервалам, в которых выделять функциональные связи ярко выраженных по энергии связи на отдельных частотах ИК-спектра.

На примере соединений Si, P, и S рассмотрим, как они выглядят по результатам предлагаемой систематизации (табл. 1 и 2).

Таблица 1

Кластерная систематизация интервалов частот ИК-спектра соединений Si, P и S

Элемент	Вид кластера и интервалы, см ⁻¹				
	оксидный	углеводородный	амидный	галогенный	комплексный
Si	3700...3200; 900...800; 700...500; 400...100	745...420; 2100...2000	3500...3300; 1200...1000; 900...800	1000...800; 600...400	500...400
P	2700...2250; 1100...800	1310...1280;	1500...1200; 1400...1170; 1390...1300; 1100...680	1100...760; 600...435; 355...285	800...600; 500...400
S	1660...800; 665...500			800...600	800...600; 700...500; 500...300

Таблица 2

Функционалы, выявленные при кластерной систематизации соединений Si, P и S

Элемент	Функционалы и интервалы, см ⁻¹				
	оксидный	углеводородный	амидный	галогенный	комплексный
Si		SiH ₂ – 745...420; Si(CH=CH ₂) ₄ – 1592, 732 и 583; Si(C≡CH) ₄ – 2053, 708 или 687, 534	Si ₂ NH st – 3400; SiN-H ₂ st – 3570; 3390; Si-NH ₂ δ – 1500	Cl < 625; < 670; SiF ₆ ²⁻ – 725	
P	RO(HO) ₂ P=O – 1250; P-OH δ – 1280		P-N – 960	Cl < 600	
S	SO ₃ ²⁻ – 1100 и 880...840				S-Sst – 500; P-Sst – <600

В табл. 1 приведены интервалы ИК-спектров соединений по элементам Si, P и S, выделяемые в справочниках [1, 5, 6], как органические – оксидные (O-H), углеводородные (C-H), амидные (NH), и неорганические – галогенные (F, Cl) соединения. Неорганические соединения типа SiS, SiP авторами характеризуются как комплексные. Данные интервалы в нашем случае рассматриваются в виде кластеров. В табл. 2 по элементам и кластерам выделены отдельные виды функциональных связей, которые являются маркерами в кластерах.

Физический смысл кластеров [7] обусловлен группами близко расположенных и тесно связанных друг с другом атомов, молекул, ионов; т.е. кластерные соединения – это соединения с общим структурным признаком. Например, либо по основному элементу – кластер-образователю, или по виду связи – гетероциклы, углеводороды и т.д., которые являются структурными фрагментами, а по сути, кластерными частицами. Систематизация справочных химических связей на основе кластерного анализа направлена на разработку диагностических таблиц для интерпретации ИК-спектров углеродизированных веществ [3]. Кроме этого, кластеризацию связей можно проводить по местоположению связи: плоскостные и межплоскостные валентные и деформационные, внутримолекулярные, межмолекулярные.

Практическую значимость данного подхода рассмотрим, в качестве примера, на соединении кремния с кислородом. В справочных данных выделяется четыре интервала частот, два из которых соответствуют одному соединению, то есть являются дуплетными. В интервале 3700...3200 см⁻¹ выписывается спектр Si-OH – валентная связь, а также в интервале 900...800 см⁻¹; в интервале 700...500 см⁻¹ с дуплетом 400...100 см⁻¹ – алкил силаны.

В некоторых случаях в одном диапазоне частот могут выписываться несколько различных соединений. Так, в интервале частот 800...600 см⁻¹ выписываются пики галогенов серы, комплексных соединений серы и фосфора, а в интервале 500...400 см⁻¹ – комплексных соединений кремния и фосфора. При интерпретации таких спектров необходимо учитывать, какое вещество подвергается исследованию, и сопровождать спектрометрический анализ геохимическими или другими физическими анализами, например, рентгено-флуоресцентным анализом.

Литература

1. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. Физико-химические свойства, методики, библиография – М.: Мир, 1976. – 541 с.
2. Дмитриенко А.А. Применение инфракрасной спектроскопии для определения металлосоединений в углеродизированном веществе пласта // Проблемы геологии и освоения недр: труды XXIII Международного

симпозиума имени академика М.А. Усова студентов и молодых учёных, посвящённого 120-летию со дня рождения академика К.И. Сатпаева, 120-летию со дня рождения профессора К.В. Радугина. В 2-х томах. – Томск: Изд-во ТПУ, 2019. – Т. 1. – С. 99 – 101.

3. Дмитриенко А.А., Исаева Е.Р. Структурные признаки углефикации органических веществ // Окс и химия, 2019. – № 12. – С. 9 – 13.
4. Накамото К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений. – М.: Мир, 1991. – 536 с.
5. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных. – М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 438 с.
6. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы. – М., 2012. – 55 с.
7. Тюрин А.Г., Зуев И.О. Кластерный анализ, методы и алгоритмы кластеризации // Вестник МГТУ МИРЭА, 2014. – № 2. – С. 86 – 97.

МИНЕРАЛОГО-ПЕТРОГРАФИЧЕСКИЕ ЧЕРТЫ ХРОМИТИТОВ МЕСТОРОЖДЕНИЯ ДУБЕРСАЙ КЕМПИРСАЙСКОГО РУДНОГО ПОЛЯ (РЕСПУБЛИКА КАЗАХСТАН)

Ф.В. Закиров, И.Ю. Собянин, Т.Ю. Якич

Научный руководитель доцент Т.Ю. Якич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Введение. В основе работы лежит минералого-петрографическое изучение серии образцов хромититов месторождения Дуберсай Кемпирсайского массива. Кемпирсайский хромитоносный массив имеет площадь более 900 км² и входит в состав Главного Уральского ультрамафитового пояса. Он сложен метаморфизованными (тектонизированными) ультрамафитами офиолитовой ассоциации, располагающимися в крупном Сакмарском аллохтоне (реликте океанической коры раннепалеозойского возраста), шарьированном в позднем палеозое на восточную окраину Восточно-Европейского палеоконтинента при закрытии Уральского палеоокеана [1]. Кемпирсайский ультрамафитовый массив имеет в плане узкую вытянутую форму, резко расширяющуюся в южной части (от 0.6 км на севере до 32 км на юге); он протягивается на 82 км в меридиональном направлении. Контакты массива с вмещающими породами девона, ордовика и докембрия тектонические. В северной и центральной частях Кемпирсайский массив сложен преимущественно гарцбургитами и энстатитовыми дунитами, реже плагиодунитами, пироксенитами, верлитами и плагиоверлитами. По периферии массива картируются габброиды (габбро, габбро-нориты и оливиновые габбро). В южной и юго-восточной частях массива выделяются две субмеридиональные зоны (западная и восточная), сложенные крупными телами массивных дунитов, залегающих среди пород шпирово-полосчатого комплекса, энстатитовых дунитов и гарцбургитов при подчиненной роли верлитов и лерцолитов [5]. По химическому составу руды Южно-Кемпирсайских месторождений относятся к высокосортным с низким содержанием оксида двухвалентного железа, кремнезема, оксида кальция, серы и фосфора.

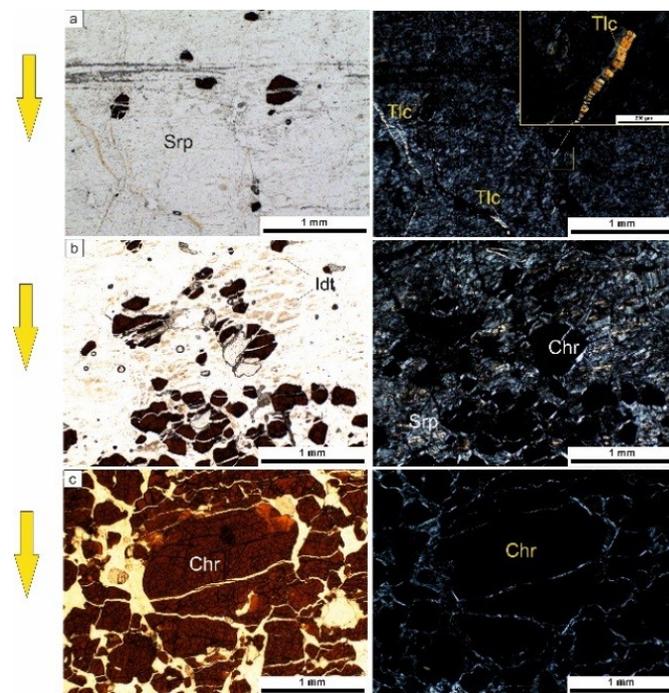


Рис. 1. Текстуры хромититов месторождения Дуберсай. а) редкоокрапленные; б) густоокрапленные; в) сплошные. Tlc – тальк, Chr – хромит, Srp – серпентин, ldt – идингсит

Методика исследований. В соответствии с задачами настоящего исследования был использован традиционный подход минералого-петрографического исследования породообразующих и минералогического изучения рудных минералов с применением метода растровой электронной микроскопии. Использовалась аппаратура: поляризационный микроскоп фирмы Zeiss, электронный микроскоп TESCAN Vega 3 SBU с энергодисперсионным детектором фирмы Oxford. Перед исследованием из отобранных образцов хромититов были изготовлены плоскопараллельные шлифы для изучения на поляризационном микроскопе и аншлифы толщиной 3...4 мм, с последующим напылением на их изучаемые поверхности слоя углерода толщиной 25...30 нм. Измерения проводились на вольфрамовом катоде при ускоряющем напряжении 20 кВ, текущем токе 15 нА и времени набора спектра 120 с. Все анализы выполнены в Томском политехническом университете.

Результаты исследований. Объемное содержание хромита в изученных образцах различно и изменяется от первых процентов до 95%. В зависимости от этого проявляется различная текстура хромовых руд от редкоокрапленных через густоокрапленные,