

УДК 556.314

РАВНОВЕСНО-НЕРАВНОВЕСНОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИРОДНЫХ ВОД ТЕРРИТОРИИ ТОРЕЙСКИХ ОЗЕР (ВОСТОЧНОЕ ЗАБАЙКАЛЬЕ) С ВЕДУЩИМИ МИНЕРАЛАМИ ВМЕЩАЮЩИХ ПОРОД

Дребот Валерия Витальевна^{1,2},
DrebotVV@ipgg.sbras.ru

Лепокурова Олеся Евгеньевна^{1,2},
LepokurovaOY@ipgg.sbras.ru

¹ Томский филиал Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН,
Россия, 634055, г. Томск, пр. Академический, 4.

² Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

Актуальность работы связана с вопросами формирования химического состава подземных вод в природных обстановках, решение которых, в рамках рассматриваемой гипотезы о взаимодействии воды с породами, невозможно без понимания степени равновесия вод с минералами вмещающих пород. Особую специфику этой проблеме придает широкое распространение на территории трещиноватых вулканогенных структур и соленых озер, а также засушливый климат. При этом существующие гипотезы выделяют испарительные процессы как ведущий фактор, приводящий к засолению вод, игнорируя все прочее. Между тем для подземных вод это неочевидно. Общая теория взаимодействия в системе вода–порода может раскрыть механизм формирования вод разного состава, выделить разные этапы соленакопления, включая содовый этап, который нельзя объяснить только процессами испарения. Для этого необходимо провести расчеты степени насыщенности вод относительно минералов вмещающих пород.

Цель: оценить равновесно-неравновесное состояние природных вод территории с минералами вмещающих пород на разных этапах эволюционного развития, определить возможный набор вторичных минералов на каждом этапе и выделить необходимые гидрогеохимические параметры для их образования. В дальнейшем результаты будут использоваться для изучения механизмов формирования подземных вод.

Объекты. На пути формирования химического состава подземные воды проходят несколько этапов своего развития, среди них: атмосферный (атмосферные воды как источник питания), литогенный (при взаимодействии с вмещающими породами) и испарительный (при взаимодействии с озерными водами, подвергающимся испарению). Чтобы проследить всю эволюцию состава, кроме непосредственно подземных вод верхней динамической зоны (родники, колодцы и скважины глубиной до 70 м, всего 69 проб), также были изучены атмосферные (6 проб), речные (9 проб) и озерные (10 проб) воды.

Методы. Макрокомпонентный состав воды определялся современными стандартными методами: титриметрическим, потенциометрическим, фотометрическим, атомно-абсорбционной спектрометрией с пламенной атомизацией и пламенной атомно-эмиссионной спектрометрией в ИПРЭК СО РАН, микрокомпонентный – методом ICP-MS в ТПУ. Петрографические и минералогические исследования вмещающих пород проводились при помощи растровой электронной микроскопии в ТГУ. Физико-химическое моделирование равновесий в системе вода–порода рассчитывалось с использованием программного комплекса HydroGeo. Затем результаты расчетов сравнивались с натурными наблюдениями.

Результаты. Термодинамические расчеты в системе вода–порода показали, что все природные воды района Торейских озер от атмосферных осадков до соленых озер неравновесны относительно первичных алюмосиликатов (в особенности базальтов, встречаемых на севере района исследований), которые они непрерывно растворяют на всем протяжении этого взаимодействия, и равновесны относительно вторичных минералов, которые они формируют (гипс, каолинит, монтмориллониты, различные карбонаты, хлориты, альбит, микроклин, мусковит и др.). Приведены полученные нами при расчетах основные физико-химические параметры (химический состав, pH и соленость воды), контролирующие образование определенного вторичного минерала.

Ключевые слова:

Поверхностные и подземные воды верхней динамической зоны, система вода–порода, вторичное минералообразование, формирование химического состава, Торейские озера, Восточное Забайкалье.

Введение

Формирование химического состава подземных вод – это сложный гидрогеохимический процесс, который учитывает в себе огромное количество всевозможных факторов – от природных условий территории до состава водовмещающих пород [1–4], и даже антропогенного воздействия [5, 6]. Именно поэтому последние десятилетия ученые по всему миру на примерах различных территорий и экспериментальных данных пытаются установить соподчиненность этих факторов, чтобы объяснить образование того

или иного химического состава воды [7–14]. Все это делает изучение процессов формирования состава природных вод важной задачей как фундаментальной, так и прикладной гидрогеохимии. В рамках развиваемого авторами положения о равновесно-неравновесном характере взаимодействия в системе вода–порода, сформулированного С.Л. Шварцевым [15], степень равновесия воды с минералами вмещающих пород является основополагающим фактором этих процессов. Вода в природных условиях, независимо от глубины залегания и скорости движения, все-

гда неравновесна с одними минералами, растворяя их (при участии газов и органического вещества), но одновременно равновесна с другими, которые формирует. Это приводит к изменению химического состава вод и геохимической среды в системе. Такое взаимодействие воды с горными породами является стадийным процессом, каждый этап которого характеризуется определенным составом вод и набором образованных вторичных минералов (или геохимическим типом вод), а также определенной геохимической средой, всё это можно объединить одним термином – гидрогенно-минеральный комплекс [16]. Это положение базируется на известных работах по физико-химическому моделированию и экспериментальным исследованиям Х.К. Хелгесона, Р.М. Гаррелса, Ч.Л. Крайста, Т. Пачеса, И. Тарди, М.Е. Томсона, И.К. Карпова, В.А. Жарикова, С.П. Крайнова, Г.Б. Наумова, Б.П. Рыженко, а также многократно подтверждается расчетами на реальных примерах в многочисленных работах как российских [17–23], так и зарубежных ученых [24–33].

Территория юго-восточного Забайкалья известна прежде всего широким распространением небольших соленых озер различного состава, геохимические особенности формирования которых были детально изучены в работах С.В. Борзенко [22, 34–37]. В то же время наши предыдущие исследования показали [38, 39], что и локально имеющие гидравлическую связь с поверхностными подземные воды территории отличаются не меньшим разнообразием. Здесь, в пределах сравнительно небольшой площади, благодаря засушливому климату, существующим геолого-геоморфологическим условиям, наличию трещиноватых вулканогенных структур, обеспечивающих смешение вод, при непрерывном взаимодействии системы вода–порода формировались разные типы подземных вод. К тому же интерес представляют широко развитые здесь выходы раннемеловых андезитобазальтов тургинской свиты. Базальты изначально образовывали нашу планету, и как показали последние исследования [40–42], равновесие с ними в принципе невозможно. Поэтому можно считать их начальной точкой эволюции состава вод. Таким образом, территория исследований является уникальным полигоном изучения формирования состава подземных вод в условиях засушливого климата, распространения озер и базальтов.

С целью изучения условий формирования состава подземных вод основными задачами работы было: 1) с помощью физико-химических расчетов выявить степень равновесия природных вод территории Торейских озер с ведущими минералами вмещающих пород (определение индексов насыщения и нанесение результатов на диаграммы равновесий), 2) определить набор вторичных минералов на разных этапах эволюционного развития вод, 3) сравнить полученные результаты с имеющимися данными по составу вмещающих пород, 4) установить необходимые гидрогеохимические параметры (общая минерализация, pH, концентрации ионов) для их образования.

Фактический материал и методы исследования

В основу работы положены результаты гидрогеохимического опробования на территории Восточного Забайкалья, проведенного совместно сотрудниками Томского филиала Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука Сибирского отделения Российской академии наук (ТФ ИНГТ СО РАН) и Института природных ресурсов, экологии и криологии Сибирского отделения Российской академии наук (ИПРЭК СО РАН, г. Чита) в летние периоды с 2017 по 2021 гг. Основным объектом исследований были подземные воды верхней динамической зоны – родники, колодцы и скважины глубиной до 70 м (всего 69 проб). Однако для изучения источников и путей формирования их состава также исследовались поверхностные природные воды территории: атмосферные осадки (6 точек), реки (9 точек), небольшие озера разного состава (10 точек) (рис. 1). Последующие лабораторные исследования макрокомпонентного состава вод были выполнены в аттестованной лаборатории геоэкологии и гидрогеохимии ИПРЭК СО РАН титриметрическим (CO_3^{2-} , HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^-), потенциометрическим (F^-), фотометрическим (Si, P) методом, а также атомно-абсорбционной спектрометрией с пламенной атомизацией (Ca^{2+} , Mg^{2+}) и пламенной атомно-эмиссионной спектрометрией (Na^+ , K^+) [38]. Микрокомпонентный состав воды был определен с помощью метода ICP-MS в аккредитованной Проблемной научно-исследовательской лаборатории гидрогеохимии Научно-образовательного центра «Вода» ТПУ. Измерения Eh и pH природных растворов проводились аниономерами CG 837 (Schott), Анион 7000 (Infraspack-Analyte) и комбинированными электродами Platin Elektrod Blu Line 31 RX и ESK 10061 на месте.

Петрографические и минералогические исследования проводились на базе Центра коллективного пользования «Аналитический центр геохимии природных систем» Томского государственного университета. Оборудование: поляризационный микроскоп Leica DM750 с возможностью проведения фотосъемки при увеличениях объективов 2,5× (ширина поля зрения 4,52 мм) и 10× (ширина поля зрения 1,12 мм) в скрещенных и параллельных николях. Растровая электронная микроскопия была выполнена на базе аналитического комплекса сканирующего электронного микроскопа «VEGA II LMU», совмещенного с энергодисперсионным рентгеновским спектрометром модели INCA Energy 350.

Расчеты индексов насыщения (SI) вод относительно минералов были выполнены в программном комплексе физико-химического моделирования HydroGeo [43], базирующегося на методе констант равновесий. Необходимо пояснить, что данный индекс некоторыми авторами называется параметр насыщенности (L), или обратная величина – индекс неравновесности (A), но смысл вкладывают в эти понятия одинаковый. В иностранной литературе используют индекс насыщения, им авторы и будут оперировать. Программа осуществляет расчет на основе данных о химическом составе воды, включая концен-

трации основных ионов, некоторых микрокомпонентов, показателей среды (температуры, pH и Eh раствора) и сведений о наборе минералов, относительно которых планируется определить степень насыщения раствора. Далее результаты моделирования сопоставлялись с натурными наблюдениями, т. е. имеющимися данными по составу вмещающих пород.

Обзорная карта района исследований со схемой опробования была подготовлена с помощью программного пакета ArcGIS.

Объект исследования

Район исследования расположен на юго-востоке Забайкальского края, практически на стыке трех стран: России, Монголии и Китая. В большей степени территория представляет собой водосбор бессточных соленых озёр Зун-Торей и Барун-Торей, крупнейших поверхностных водных объектов региона, однако часть точек опробования, отобранных дальше всего к северу от государственной границы Россия–Монголия, уже выходят за его пределы (рис. 1).

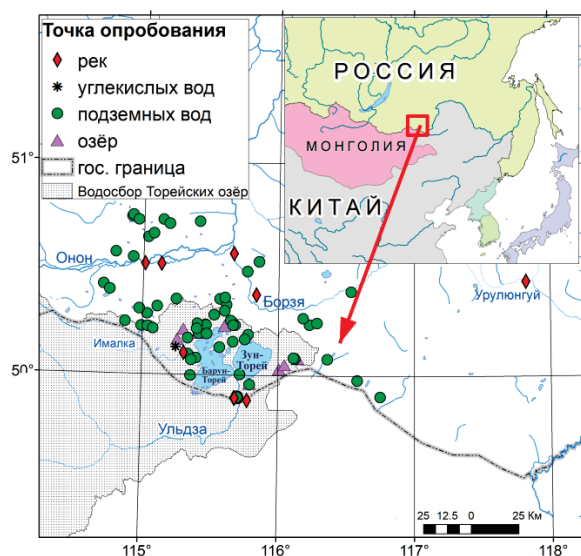


Рис. 1. Обзорная карта района исследований с точками отбора природных вод

Fig. 1. Overview map of the study area with sampling points of natural waters

Речная сеть здесь представлена двумя водосборными бассейнами: региональный Амурский бассейн и местный бассейн стока в Торейские озёра. При этом питают Торейские озера две берущие начало в Монголии реки – Ималка и Ульдза [44]. Рельеф территории преимущественно низкогорный, пологохолмистый и равнинный. Плоские и холмисто-увалистые равнины с пространствами мелкосопочника располагаются на абсолютных отметках от 590 (в районе самих Торейских озёр) до 835 м (на северо-востоке территории).

Основной особенностью района исследований является резко-континентальный климат с выраженным чередованием засушливых и влажных периодов, что в прошлом не раз приводило к почти полному пересыханию Тореев [45]. Таким образом, на процесс фор-

мирования химического состава поверхностных вод оказывает влияние испарение, ускоряющее процессы засоления. Для подземных вод решающими факторами являются орографическое положение и геологические условия: локальная трещиноватость вулканогенных структур и понижение абсолютных отметок рельефа по мере приближения к Торееям формирует благоприятную обстановку для формирования вод с высокой солёностью ввиду замедления водообмена по мере приближения от горных обрамлений к озерам [46].

В гидрогеологическом смысле изучаемые воды локализованы в пределах Торейского артезианского бассейна [47], относящегося к монгольскому типу, характеризующегося низкогорным обрамлением, нижнемеловыми и кайнозойскими отложениями чехла и отсутствием стока. В целом на территории в зависимости от типа вмещающих отложений, структуры и возраста горных пород выделяются два основных водоносных комплекса – с пластовым типом скопления и трещинные подземные воды.

Водоносный горизонт рыхлых четвертичных отложений с пластовым типом скопления распространён в аллювии пойм и террас, а также в нижних частях склонов. Эти отложения по данным петрографического анализа представлены песками, галечниками, гравием и супесями. Водовмещающие породы трещинных вод терригенных и терригенно-вулканогенных отложений мела представлены галечниками, валунниками, конгломератами, гравелитами, песчаниками, алевролитами, туфогенными разностями, эффузивами. Выходы последних приурочены к северному берегу озёр Зун-Торей и Барун-Торей, а также к территории между ними. Это раннемеловые андезито-базальты тургинской свиты. Пьезометрический уровень исследуемых водопровявлений находился на глубине от 4 до 80 м, а иногда выше поверхности земли [39]. Температура воды изменялась от 2 до 7 °C.

Химический состав природных вод

Состав, включая микрокомпонентный и изотопный, природных вод территории Торейских озёр нами уже приводился в работах [38, 48]. Кратко рассмотрим характеристику вод, но уже с учетом отобранных в 2021 г. проб. Последовательность изучения определяется направлением примерной общей эволюции состава вод: атмосферные – речные – подземные – озерные воды. В табл. 1 приведены данные: разброс значений и средние концентрации элементов и параметров.

Атмосферные осадки района относятся к ультрапресным (10–120 мг/л), слабокислым (pH 5,0–6,8), сложного катионного и анионного состава водам, но в основном преобладают HCO_3 , SO_4 и Na.

Речные воды (реки Онон, Борзя, Ульдза) характеризуются солёностью от 0,09 до 0,83 г/л, а значения pH – от 7,3 до 8,2. Химический состав – HCO_3 Na-Ca-Mg. В целом стоит отметить, что в двух крупнейших питающих Торейские озера реках Ульдза и Ималка самые высокие концентрации ведущих ионов и, соответственно, минерализации, чем в других реках. В некоторых случаях отмечаются повышенные зна-

чения сульфат-иона (реки Урулунгуй и Ульдза) и даже хлор-иона (р. Ималка). При этом содержания кремния в речных водах отличаются неравномерным распределением.

Подземные воды верхней гидродинамической зоны (глубина залегания до 70 м) отличаются большим

разбросом значений pH (от 6,7 до 8,8) и солёности (от 0,16 до 3,25 г/л) и очень пестрым катионным составом (рис. 2, а), однако при минерализации более 1,5–2,0 г/л начинает превалировать Na. В анионном составе преобладает ион HCO_3^- , но при солёности более 1 г/л воды становятся $\text{HCO}_3\text{-SO}_4$ и $\text{HCO}_3\text{-SO}_4\text{-Cl}$.

Таблица 1. Химический состав природных вод: интервалы значений (в числителе) и среднее (в знаменателе)

Table 1. Chemical composition of natural waters: intervals of values (in the numerator) and average (in the denominator)

Компонент Element	Ед. изм. Units	Атмосферные осадки Precipitation	Реки Rivers	Углекислые подземные воды Carbonic waters	Подземные воды Groundwaters	Озёра/Lakes
pH	–	5,0–6,8 6,0	7,3–8,2 7,8	6,2	6,7–8,8 7,9	9,0–10,0 9,4
Eh	мВ	145–250 210	100–208 178	21,0	(–130)–217 87,2	(–69,0)–94,0 39,9
Минерализация Salinity	г/л g/L	0,0–0,1 0,04	0,1–0,8 0,5	2,59	0,2–3,3 0,9	1,1–131 24,2
CO_2	(мг/л) (mg/L)	<0,4–17,4 10,4	0,2–13,8 6,4	2710	<0,4–70,0 15,8	<0,4
CO_3^{2-}		<0,3	<0,3–2,4 0,5	<0,3	<0,3–36,0 172	6,0–10560 2315
HCO_3^-		3,7–22,2 10,9	50,3–456 284	1866	71,0–824 422	522–7320 2446
SO_4^{2-}		1,0–8,9 5,0	4,7–137 53,3	15,6	5,0–1126 132	65,7–17916 3395
Cl^-		0,9–6,1 3,4	1,8–37,9 9,8	24,3	2,6–526 70,7	131–45650 7044
Ca^{2+}		0,4–2,1 1,2	11,3–92,1 53,3	253	4,6–229 61,1	1,6–84,2 14,7
Mg^{2+}		0,03–1,5 0,6	2,2–45,9 22,9	81,6	4,5–221 44,4	2,7–85,3 21,9
Na^+		0,3–85,0 18,1	4,8–58,6 30,9	302	6,9–583 112	260–48729 8737
K^+		0,3–3,1 1,2	0,7–23,2 4,8	13,5	0,2–149 10,8	3,3–390 100
SiO_2		0,9–2,6 1,7	0,5–45,9 14,8	32,5	2,0–35,3 16,2	2,3–279 51,2
$\text{Fe}_{\text{общ}}/\text{Fe}_{\text{tot}}$	(мкг/л) (µg / L)	0,1–64,1 32,8	14,4–172 62,5	8701	1,9–8701 392	101–198768 28417
Al	(мкг / L)	6,1–82,2 42,1	2,0–18,7 9,7	85,2	1,8–1580 60,1	41,6–162745 21757

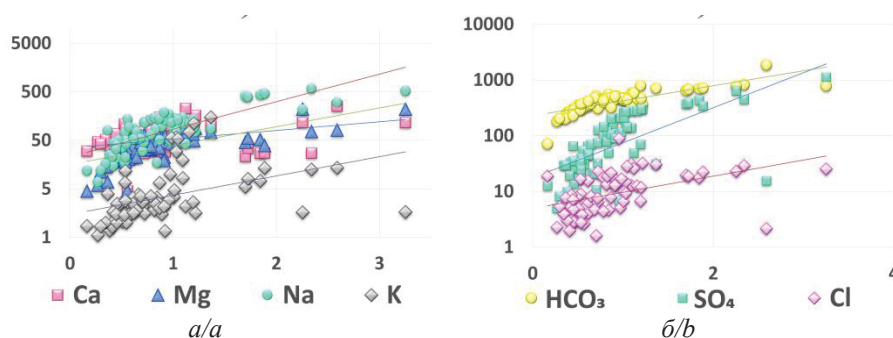


Рис. 2. Зависимость катионов (а) и анионов (б) (мг/л, шкала логарифмическая) подземных вод от солёности (г/л)
Fig. 2. Dependence of cations (a) and anions (b) (mg / L, logarithmic scale) of groundwater on salinity (g/L)

Углекислые подземные воды. В ходе опробования было обнаружено одно проявление углекислых вод в скважине на западном берегу оз. Барун-Торей, которое выбивается из общей закономерности благодаря кислой среде (pH=6,2) и повышенной минерализации (3 г/л). По составу воды являются содовыми, HCO_3^- (1866 мг/л) и Na (302 мг/л), с повышенными концентрациями Ca (253 мг/л). Содержание свободного CO_2 в водах – 2710 мг/л, кремния – 15,2 мг/л. Предположительно это Убудукский минеральный источник.

Отмечена общая закономерность для всех подземных вод: с понижением абсолютных отметок рельефа, т. е. большим временем взаимодействия в системе вода–порода, наблюдается рост минерализации (рис. 3, а). Наиболее солёные воды приурочены к южной части территории, в районе устья р. Улдза, а также на водосборе наиболее крупных содовых озёр Барун-Торей и Зун-Торей (здесь, возможно, добавляется смешение с озерными водами), а более пресные воды сосредоточены на севере территории (в возвышенных частях).

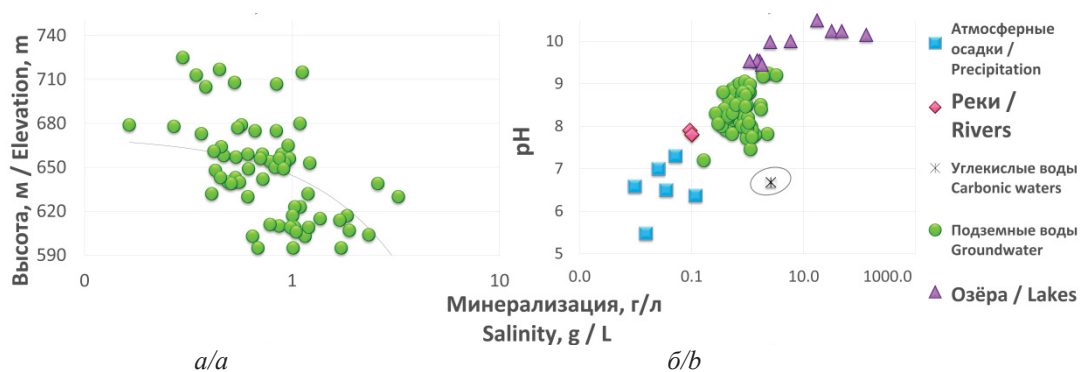


Рис. 3. Общая зависимость между величиной общей минерализации и абсолютными отметками рельефа в месте отбора проб подземной воды (а) и pH всех природных вод (б)

Fig. 3. General relationship between the value of salinity and the absolute relief elevation at the sampling site of groundwater (a) and pH of all natural waters (b)

Озерные воды отличаются еще большим разбросом солености – от 1 до 131 г/л, но достаточно узким диапазоном pH – от 9 до 10. Состав при этом очень разнообразен: анионный варьирует – HCO_3 , Cl-SO_4 , $\text{SO}_4\text{-Cl}$, Cl , в катионном всегда преобладает Na.

Таким образом, отличительной особенностью природных вод района являются высокие показатели pH (кроме проявления углекислых вод) и общей минерализации, а также и в целом довольно пестрый химический состав. В направлении атмосферные–речные–подземные–озерные воды увеличиваются соленость (от 10 мг/л до 130 г/л) и значение pH (от 6,7 до 10,0) (рис. 3, б), накапливается Si (до 130 мг/л). По составу сначала превалируют гидрокарбонатные сложного катионного состава воды, затем содовые, далее гидрокарбонатно-сульфатные и гидрокарбонатно-сульфатные-хлоридные натриевые. Также в этом направлении увеличиваются концентрации некоторых микрокомпонентов [48], а концентрации Ca^{2+} , Mg^{2+} и K^+ , наоборот, снижаются.

Результаты расчетов и их обсуждение

При исследовании шлифов, а также по данным растровой электронной микроскопии, минералогический состав вмещающих пород определен следующим образом. Для группы осадочных отложений (алевролиты, песчаники и т. д.) это кварц, плагиоклаз, мусковит, гидрослюда, присутствуют пироксен, оливин, циркон, из вторичных – гидроокислы железа, кальцит, доломит, хлорит. Для группы эффузивов (базальты, долериты) – плагиоклаз, оливин, клинопироксен (диопсид), диопсид, вулканическое стекло, слюды (серицит, селадонит), магнетит, из вторичных – гидроокислы железа, кальцит, иддингсит (продукт изменения оливина, смесь монтмориллонита и хлорита). Соответственно этот список минералов мы и старались учитывать при моделировании в системе вода–порода.

Рассчитанные по фактическому составу разных водных объектов индексы насыщения (SI) относительно некоторых минералов представлены в табл. 2. С целью сокращения объемов информации показаны только интервалы этих значений. Положительное значение SI указывает на насыщение вод соответ-

ствующим минералом, то есть на возможность формирования этого минерала водами в текущих термодинамических условиях. Отрицательное значение говорит о недонасыщенности вод относительно минерала, а значит, о возможности его непрерывного растворения. При этом воды накапливают составляющие данный минерал элементы.

Ниже для удобства результаты термодинамических расчетов представлены графически отдельно для алюмосиликатных (рис. 4) и карбонатных (рис. 5) минералов в форме диаграмм равновесия, построенных на основе методик, разработанных Г.К. Хельгесоном, Р. Гаррелсом, Ч.Л. Крайстом, П.Б. Бартоном и другими [49, 50]. В расчетах при этом использовались величины активностей химических соединений с учетом ионной силы раствора, которая зависит от минерализации вод.

Как показали исследования, все природные воды территории от атмосферных, речных до подземных и озерных неравновесны относительно магматических Ca-Mg-Fe алюмосиликатных минералов водовмещающих пород: основных плагиоклазов (анортита), роговых обманок, пироксенов, диопсида, оливина и других. Поля равновесий большинства перечисленных минералов располагаются значительно выше и за пределами представленных на рис. 4 графиков. Атмосферные осадки находятся на стадии формирования гиббсита, речные имеют большой разброс в равновесии с гиббситом, каолинитом, монтмориллонитами, большинство подземных вод равновесны с монтмориллонитами и иллитом, для формирования которого необходимы более высокие значения pH (>8), минерализации (>1 г/л) и содержание Si (>5 мг/л). Наиболее минерализованные подземные воды в районе Торейских озер и сами озерные воды уже равновесны относительно хлорита, мусковита и альбита ($M > 2$ г/л и $\text{pH} > 8,5$). Углекислые подземные воды из-за высокой концентрации кремния пересыщены относительно всех монтмориллонитов и даже микроклина, а также близки к равновесию с аморфным кремнезёмом. Самые соленые и щелочные озерные воды ($M > 5$ г/л и $\text{pH} > 9,5$) дополнительно равновесны к анальциму и ломонтиту (водные цеолиты натрия и кальция).

Относительно карбонатных пород неравновесны все атмосферные осадки, речные воды и незначительная часть пресных подземных вод (рис. 5). Но уже при солёности воды не ниже 0,4 г/л, $pH > 7,5$ (рис. 6), содержания $HCO_3^- > 0,3$ г/л и $Ca^{2+} > 5$ мг/л, достигается равновесие к кальциту, что характерно для большей части подземных и озерных вод. При этом отмечается, что таких же значений pH , а также концентраций кальция с магнием достаточно для достижения водой насыщения доломитом, в то время как для формирования магнезита в текущих условиях необходимы уже более высокие показатели $pH > 8$, солёности $> 0,6$ г/л, а также содержания $HCO_3^- > 0,6$ г/л и магния > 5 мг/л. При условии, что содержание железа в воде $> 0,01$ мг/л и $pH > 8$, достигается равновесие с сидеритом. Углекислые воды достигают насыщения по отношению к части карбонатов при достаточно низком значении

pH за счет высоких концентраций кальция и железа и в целом высокой минерализации вод.

Таким образом, состав того или иного вторичного минерала контролируется определенным химическим составом, pH и солёностью вод. А это значит, что между этими параметрами и минеральными новообразованиями существует парагенетическая связь [39]. В табл. 3 приведены основные физико-химические параметры, контролирующие образования определенного вторичного минерала, полученные нами при расчетах. Однако стоит учесть, что это средние показатели, работающие в комплексе. Например, необходимые условия для установления равновесия с кальцитом ($pH > 7,5$ и $M > 0,4$ г/л, табл. 3) меняются в случае с углекислыми водами, где равновесие наступает уже при $pH = 6,2$, но при этом минерализация вод равна 3 г/л.

Таблица 2. Значение индексов насыщения (SI) природных вод района Торейских озер к минералам (интервалы значений)
Table 2. Value of saturation indices (SI) of natural waters in the Torey lakes region for minerals (ranges of values)

Минерал/Mineral	Формула Formula	Атмосферные осадки Precipitation	Реки Rivers	Углекислые воды Carbonic water	Подземные воды Groundwaters	Озера Lakes
Оксиды/Oxides						
кварц аморф. quartz amorph.	SiO_2 аморф. SiO_2 amorph.	−4,8...−3,8	−5,4...−0,9	−1,3	−5,3...−1,2	−6,9...−3,1
кварц/quartz	SiO_2	−1,9...−0,9	−2,4...2,0	1,7	−2,3...1,8	−3,9...0,1
гипсбит/gibbsite	$Al(OH)_3$	−6,6...−6,9	−9,6...−3,0	0,3	−5,2...−6,8	−1,9...−8,6
гётит/goethite	$(Fe)OOH$	−23,0...−3,7	1,3...14,0	1,1	1,9...15,0	10,0...19,0
Силикаты и алюмосиликаты/Silicates and aluminosilicates						
ферросилит (Mg-Fe пироксен) ferrosilite (Mg-Fe pyroxene)	$FeSiO_3$	−29,0...−14,0	−13,0...−2,2	−6,0	−10,0...−4,5	−8,1...−2,6
энстатит (Mg-Fe пироксен) enstatite (Mg-Fe pyroxene)	$MgSiO_3$	−25,0...−15,0	−10,0...−3,0	−12,0	−12,0...−0,7	−5,7...−2,3
диопсид (Ca пироксен) diopside (Ca pyroxene)	$CaMgSi_2O_6$	−45,0...−27,0	−16,0...−1,9	−19,0	−19,0...−1,4	−7,1...−2,8
жадеит (Na пироксен) jadeite (Na pyroxene)	$NaAlSi_2O_6$	−28,0...−11,0	−14,0...−5,8	−6,8	−10,4...−8,9	−3,2...−1,6
оливин/olivine	$MgFeSiO_4$	−58,0...−38,0	−23,0...−12,0	−24,0	−28,0...−3,0	−16,0...−5,7
паргасит (пог. обманка) pargasite (hornblende)	$NaCa_2Mg_4Al_3Si_6O_{22}(OH)_2$	−190...−120	−69,0...−37,0	−85,0	−76,0...−13,0	−27,0...−10,0
анортит/anorthite	$CaAl_2Si_2O_8$	−47,0...−15,0	−30,0...−11,0	−18,0	−26,0...−2,3	−17,0...−0,5
альбит/albite	$NaAlSi_3O_8$	−7,9...−4,6	−3,9...−1,0	−0,7	−3,4...−2,2	−1,0...−4,5
микроклин/microcline	$KAlSi_3O_8$	−6,6...−5,0	−3,7...−0,3	−1,0	−3,9...−1,5	−1,4...−4,5
мусковит/muscovite	$KAl_3Si_3O_{10}(OH)_2$	−3,9...−1,8	−1,8...0,7	−0,6	−2,7...−2,4	0,7...2,5
хлорит (Mg)/chlorite (Mg)	$Mg_{2,25}Al_{1,5}Si_{1,25}O_5(OH)_4$	−8,2...−4,1	−2,8...0,1	0,7	−4,0...−3,2	0,4...2,8
прениит/prehnite	$Ca_2Al_2Si_3O_{10}(OH)_2$	−60,0...−23,0	−22,0...−5,0	−18,0	−20...3,5	−9,8...6,3
Ca-монтмориллонит Ca-montmorillonite	$Ca_{0,15}Al_{1,9}Si_4O_{10}(OH)_2$	−12,2...−9,4	−9,9...7,0	4,3	−6,1...6,3	−2,7...14,6
Mg-монтмориллонит Mg-montmorillonite	$MgAl_2Si_4O_{11}(OH)_2$	−31,0...−11	−8,2...8,6	3,0	−9,7...18,0	−4,2...11
Na-монтмориллонит Na-montmorillonite	$Na_{0,3}Al_{1,9}Si_4O_{10}(OH)_2$	−7,6...−4,1	−5,2...2,9	2,0	−2,9...4,4	−0,6...10,4
K-монтмориллонит K-montmorillonite	$K_{0,3}Al_{1,9}Si_4O_{10}(OH)_2$	−22,0...−5,0	−14,0...−1,0	3,8	−20,0...12,0	−3,2...11
иллит/illite	$K_{0,5}Al_{2,5}Si_{3,5}O_{10}(OH)_2$	−3,3...−1,4	−0,5...1,1	0,9	−1,1...3,7	1,6...4,5
каолинит/kaolinite	$Al_2Si_2O_5(OH)_4$	−14,0...−3,0	−14...8,2	5,1	−14,0...15,0	−3,7...10,0
Карбонаты/Carbonates						
кальцит/calcite	$CaCO_3$	−16,0...−6,8	−2,8...2,5	0,2	−2,7...3,9	−0,7...3,8
доломит/dolomite	$CaMg(CO_3)_2$	−30,0...−10,0	−4,0...7,6	2,5	−4,1...12,0	2,4...11,0
магнезит/magnesite	$MgCO_3$	−18,0...−7,3	−4,9...1,3	−1,4	−5,1...4,0	−0,6...3,9
сидерит/siderite	$FeCO_3$	−26,0...−9,6	−13,0...−1,2	1,1	−6,4...5,0	−8,0...3,6
Сульфаты/Sulphates						
гипс/gypsum	$CaSO_4(H_2O)_2$	−13,0...−9,3	−7,6...−3,7	−5,5	−7,4...−2,6	−8,2...−4,8
ангидрит/anhydrite	$CaSO_4$	−13,0...−9,7	−8,1...−4,1	−5,9	−7,8...−3,0	−8,5...−5,2
Хлориды/Chlorides						
галит/halite	$NaCl$	−25,0...−20,0	−22,0...−17,0	−16,0	−21,0...−7,4	−14,0...−4,0

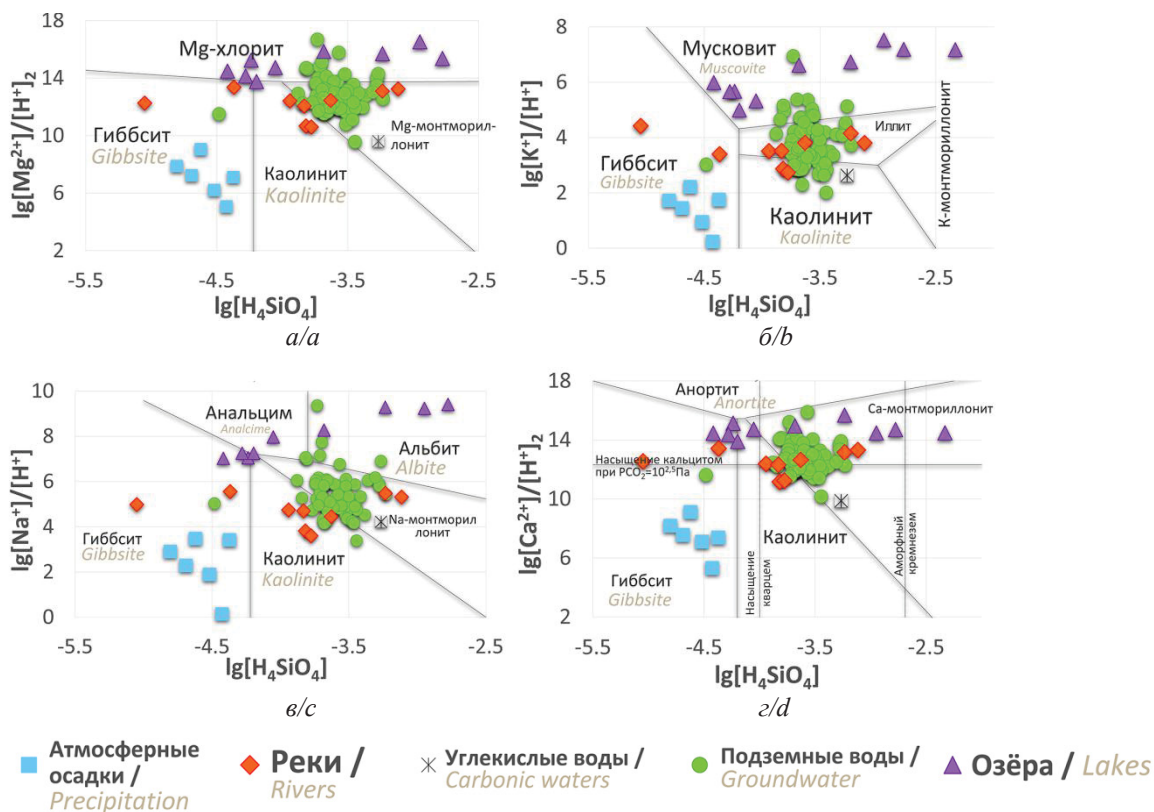


Рис. 4. Диаграммы равновесия основных (а) магниевых, (б) калиевых, (в) натриевых, (г) кальциевых минералов при 25 °С с нанесенными данными по составу природных вод района Торейских озёр

Fig. 4. Equilibrium diagrams of the main (a) magnesium, (b) potassium, (c) sodium, (d) calcium minerals at 25 °C with plotted data on the composition of natural waters of the Torey Lakes area

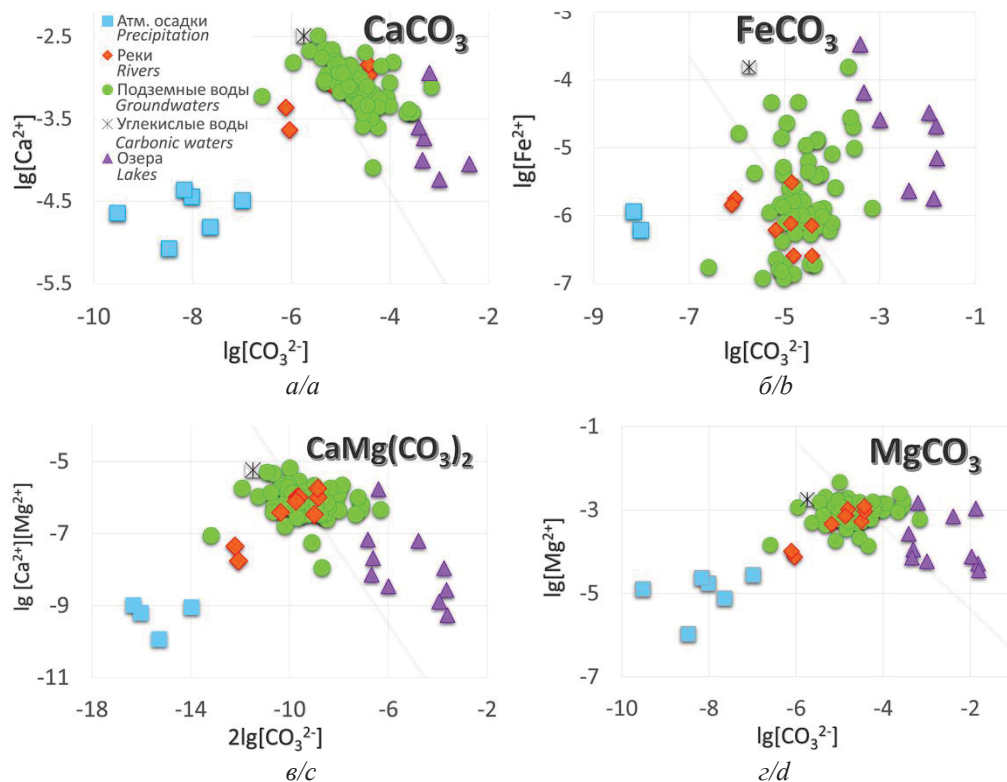


Рис. 5. Равновесие природных вод района с кальцитом (а), сидеритом (б), доломитом (в) и магнезитом (г) при 25 °С и 1 атм

Fig. 5. Equilibrium of natural waters of the region with calcite (a), siderite (b), dolomite (c) and magnesite (d) at 25 °C and 1 atm

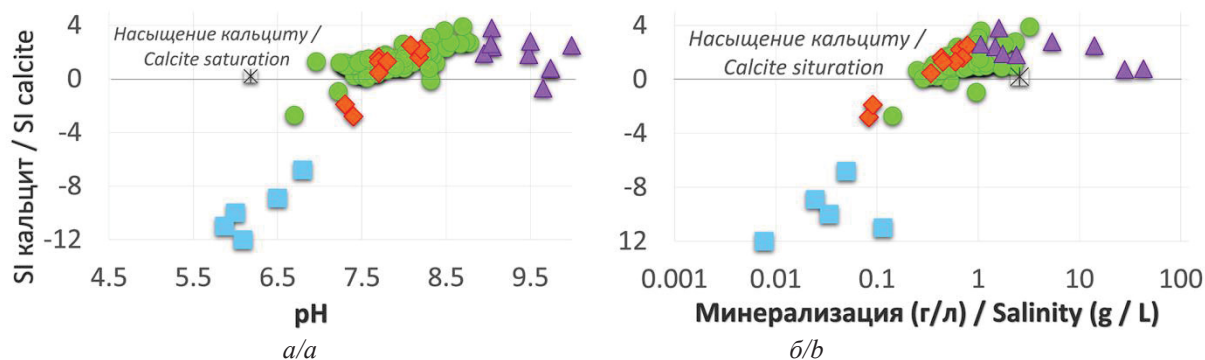


Рис. 6. Зависимости индексов насыщения (SI) вод относительно кальцита от pH (а) и солености (б) вод (усл. обозначения – на рис. 6)

Fig. 6. Dependences of saturation indices (SI) of waters relative to calcite on pH (a) and salinity (b) of waters (see designations in Fig. 6)

Таблица 3. Необходимые геохимические параметры вод для достижения равновесия с некоторыми минералами, полученные расчетами

Table 3. Necessary geochemical parameters of waters to achieve equilibrium with some minerals, obtained by calculations

Вторичный минерал Secondary mineral	Основные параметры Main parameters
Кальцит/Calcite	pH>7,5; M>0,4 г/л (g/L); HCO ₃ >300 мг/л (mg/L); Ca>5 мг/л (mg/L)
Сидерит/Siderite	pH>8,0; M, HCO ₃ – неочевидно/unobvious; Fe достаточно 0,01 мг/л Fe – 0,01 mg/L is enough
Доломит/Dolomite	pH>7,5; M, HCO ₃ – неочевидно/unobvious; Ca+Mg>5 мг/л (mg/L)
Магнезит/Magnesite	pH>8; M>0,6 г/л (g/L); HCO ₃ >400 мг/л (mg/L); Mg>5 мг/л (mg/L)
Са-монтмориллонит Ca-montmorillonite	pH>7,5; M>0,3 г/л (g/L); Ca>15 мг/л (mg/L); Si>4 мг/л (mg/L); Al – неочевидно/unobvious
На-монтмориллонит Na-montmorillonite	pH>7,5; M>0,3 г/л (g/L); Si>4 мг/л (mg/L); Al, Na – неочевидно/unobvious
Иллит/Illite	M>0,4 г/л (g/L); pH>7,43; K>1,5 мг/л (mg/L); Si, Al – неочевидно/unobvious
Хлорит/Chlorite	M>1,5 г/л (g/L); pH>8,3; Si, Al – неочевидно/unobvious
Мусковит/Muscovite	M>1 г/л (g/L); pH>8,0–8,5; K, Si и Al – неочевидно/unobvious
Микроклин/Microcline	pH>8,5–9,0; M, K, Si, Al – неочевидно/unobvious
Альбит/Albite	pH>8,5–9,0; M>2,0 г/л (g/L); Na>150 мг/л (mg/L); Si, Al – неочевидно/unobvious

*M – минерализация (мг/л)/salinity (mg/L).

Таким образом, проведенные термодинамические расчеты по вторичному минералообразованию подтверждаются результатами минералого-петрографических исследований пород. Как правило, группа эффузивов (в нашем случае чаще представлены базальтами) характеризуется большой степенью изменчивости и, соответственно, большим набором вторичных минералов, в отличие от сланцев. Все это хорошо согласуется с развиваемой авторами теорией [15, 40, 41, 51, 52], со-

гласно которой на любом этапе эволюции воды остаются неравновесными относительно минералов основных алюмосиликатных пород, в то время как равновесие с кислыми возможно. Так, было показано, что в качестве вторичных на территории в основном среди минералов группы силикатов формируются монтмориллониты, каолиниты, иллиты, биотиты, мусковиты и хлориты, среди карбонатных – кальциты, сидериты, доломиты, при этом среди всех исследованных образцов проявлений магнезита, к которому расчеты показали равновесие с исследуемыми природными водами, обнаружено не было. На рис. 7 представлены фото с карбонизацией (а) и хлоритизацией (б/б) пород.

Таким образом, на начальном этапе ультрапресные воды (атмосферные, речные) интенсивно растворяют минералы вмещающих пород (песчанки, базальты), т. е. в данном случае плагиоклазы, кварц, оливин, пироксен, слюды и другие, при этом сами обогащаются химическими элементами (соленость и pH растут) и образуют первые вторичные минералы – гидроокислы железа, гиббсит, каолинит. Проникая в породы, уже подземные воды остаются неравновесными относительно исходных минералов, кроме кварца, равновесие к которому быстро достигается. Значения минерализации и pH вод продолжают расти, состав HCO₃-Ca, иногда HCO₃-Ca-Mg, в наборе вторичных минералов появляются различные монтмориллониты и гидрослюда (рис. 4). Однако при достижении равновесия относительно карбонатов (рис. 5), которые уводят из воды Ca²⁺ и Mg²⁺, формируется HCO₃-Na (содовый) тип подземных вод, характеризуемый как более щелочной и соленый. Кроме карбонатов, из вторичных в дальнейшем появляются хлорит и его разновидности: иддингсит и боулингит (смеси монтмориллонита и хлорита), реже ломонтит (цеолит), пренит, альбит, селадонит (мусковит) и санидин (КПШ), т. е. на более поздних этапах эволюции системы вода–порода достигается равновесие к K-Na минералам (альбит, мусковит, КПШ), но равновесие к Ca-Mg-Fe алюмосиликатным минералам так и не достигается, что обеспечивает постоянную эволюцию состава вод и вторичных отложений.

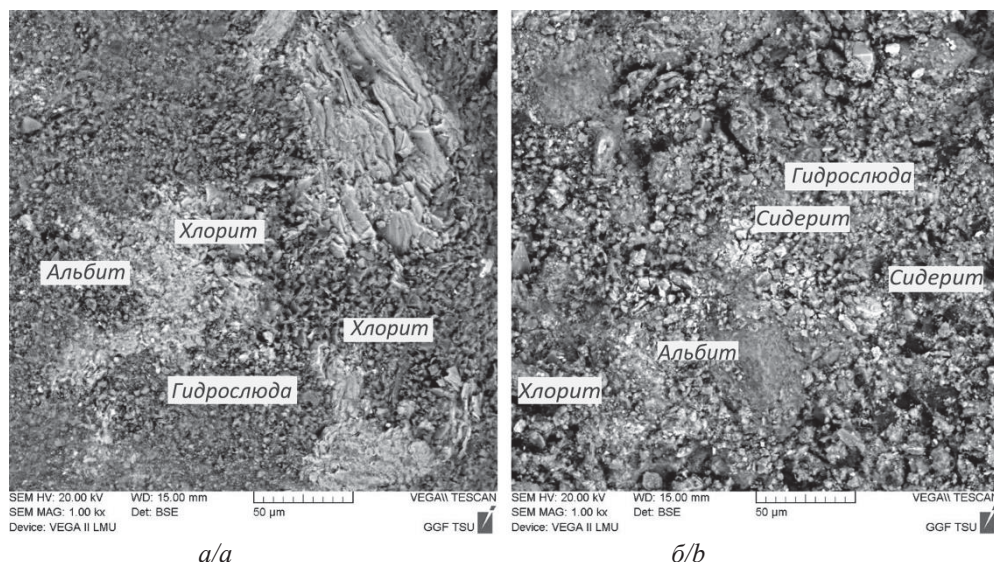


Рис. 7. Снимки свежего скола образца, выполненные на растровом электронном микроскопе
Fig. 7. SEM images of fresh cleaved rock sample

Выводы

Исследования показали, что на территории Торейских озёр в условиях засушливого климата и широкого распространения эффузивных пород и солевых озёр формируются разнообразные по составу подземные воды. Их отличительной особенностью являются высокие показатели pH – до 8,8 (кроме проявления углекислых вод) и общей минерализации – до 3,3 г/л. По составу среди вод северной части района исследований (за пределами водосбора Торейских озёр) сначала преобладают гидрокарбонатные сложного катионного состава воды, а по мере понижения абсолютных отметок рельефа и приближению к самим Торейям – содовые, далее гидрокарбонатно-сульфатные и гидрокарбонатно-сульфатные-хлоридные натриевые воды. В целом для природных вод территории характерно в направлении атмосферные–речные–подземные–озерные воды увеличение солёности, значения pH, концентрации основных ионов, кроме Ca, Mg, K, увеличение концентраций большинства микрокомпонентов.

Проведённые термодинамические расчёты в системе вода–порода позволили получить наиболее полное представление о сложном поведении химических элементов в составе изучаемых подземных вод в районе Торейских озёр. Показано, что система вода–порода носит четко выраженный равновесно-неравновесный характер. При этом подземные воды

района исследований, равновесные с вторичными алюмосиликатными минералами (каолинитом, Са-, Mg-монтмориллонитом, иллитом, кальцитом), всегда остаются неравновесными с эндогенными минералами водовмещающих пород (оливин, паргасит, амфибол, жадеит, анортит и др.). Показано, что результаты комплексных лабораторных исследований водовмещающих пород совпадают с полученными результатами проведенных термодинамических расчетов в системе вода–порода. Во вторичных минералах отмечают среди алюмосиликатов монтмориллониты, каолиниты, иллиты, биотиты, мусковиты и хлориты, среди карбонатов – кальциты, сидериты, доломиты, с которыми вода на литогенном этапе своего формирования постепенно достигает равновесного состояния.

Полученные результаты о степени равновесия подземных вод, отобранных на территории, окружающей Торейские озера на юго-востоке Забайкалья, а также выделенные необходимые геохимические параметры для формирования определенного вторичного минерала будут положены в основу выделения геохимических типов изучаемых вод.

Авторы выражают благодарность и.о. заведующего лабораторией геоэкологии и гидрогеохимии ИПРЭК СО РАН д.г.-м.н. Светлане Владимировне Борзенко за помощь в организации полевых исследований и научные консультации.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-35-90040.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhu B.Q., Ren X.Z., Rioual P. Geological control on the origin of fresh groundwater in the Otindag Desert, China // *Applied Geochemistry*. – 2019. – V. 103. – P. 131–142.
2. Origin of the Crescent Moon Spring in the Gobi Desert of northwestern China, based on understanding groundwater recharge / Ch. Su, Ya. Wang, Sh. Ge, Zh. Li, J. Li // *Journal of Hydrology*. – 2020. – V. 580. – P. 1–13.
3. Herczeg A.L., Dogramaci S.S., Leaney F.W.J. Origin of dissolved salts in a large, semi-arid groundwater system: Murray Basin, Australia // *Marine and Freshwater Research*. – 2001. – V. 52. – P. 41–52.
4. Multi-tracer approach for assessing complex aquifer systems under arid climate: case study of the River Tata catchment in the Moroccan Anti-Atlas Mountains / L. Heiß, Lh. Bouchaou, S. Tadoumant, B. Reichert // *Applied Geochemistry*. – 2020. – V. 120. – 104671.
5. Влияние антропогенных факторов на водные экосистемы / П.Я. Пукало, А.В. Базаева, А.В. Беспалый, М.А. Панчишный // *Животноводство и ветеринарная медицина*. – 2020. – Т. 3. – № 38. – С. 33–36.
6. Geochemical and isotope evidence for groundwater mineralization in a semi-arid river basin, Sri Lanka / S. Senarathne,

- J. Jayawardana, E. Edirisinghe, R. Chandrajith // *Applied Geochemistry*. – 2021. – V. 124. – P. 1–10.
7. Формирование химического состава подземных соленых и рассольных вод Тувинского прогиба и его обрамления / Н.В. Гусева, Ю.Г. Копылова, Ч.К. Ойду, К.Д. Аракчаа, К.М. Рычкова, А.А. Хвощевская, О.Д. Аюнова // *Геология и геофизика*. – 2018. – Т. 59. – № 2. – С. 172–182.
8. Геологические факторы и физико-химические процессы формирования подземных вод Тункинской впадины / С.Х. Павлов, К.В. Чудненко, В.А. Голубев, А.И. Оргильянов, П.С. Бадминов, И.Г. Крюкова // *Геодинамика и тектонофизика*. – 2018. – Т. 9. – № 1. – С. 221–248.
9. Формирование химического состава поверхностных вод в Арктике на примере озера Инари и реки Паз / С.И. Мазухина, В.А. Маслобоев, С.С. Сандимиров, В.И. Пожиленко, С.В. Иванов // *Вестник МГТУ. Труды Мурманского государственного технического университета*. – 2017. – Т. 20. – № 1/2. – С. 252–260.
10. О влиянии почв на формирование химического состава грунтовых вод в пределах Республики Татарстан / Р.Х. Мусин, А.Р. Галиева, Т.Г. Кудбанов, З.Г. Калкаманова, Н.А. Курлянов // *Известия высших учебных заведений. Геология и разведка*. – 2020. – Т. 1. – № 1. – С. 90–99.
11. Geochemical mechanisms controlling the isotopic and chemical composition of groundwater and surface water in a sector of the Pampean plain (Argentina) / G. Borzi, C. Tanjal, L. Santucci, E. Carol // *Science of the Total Environment*. – 2019. – V. – 683. – С. 455–469.
12. Hydrochemical and isotopic assessment for characterizing groundwater quality and recharge processes under a semi arid area: case of the Haouz plain aquifer (Central Morocco) / S. Kamal, S. Sefiani, N.E. Laftouhi, A. El Mandour, J. Moustadraf, M. Elgettafi, M. Himi, A. Casas // *Journal of African Earth Sciences*. – 2021. – V. 174. – P. 1–17.
13. Groundwater recharge and salinization in the arid coastal plain aquifer of the Wadi Watir delta, Sinai, Egypt / M.A. Eissa, J.M. Thomas, G. Pohll, O. Shouakar-Stash, R.L. Hershey, M. Dawoud // *Applied Geochemistry*. – 2016. – V. 71. – P. 48–62.
14. Hydrogeochemical surveys of shallow coastal aquifers: a conceptual model to set-up a monitoring network and increase the resilience of a strategic groundwater system to climate change and anthropogenic pressure / B. Nisia, O. Vasellia, M. Taussic, M. Doverid, M. Menichinid, J. Cabassia, B. Racod, S. Botteghid, M. Mussid, G. Masetti // *Applied Geochemistry*. – 2022. – V. 142. – P. 105350.
15. Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода-порода: в 5 т. Т. 2: Система вода-порода в условиях зоны гипергенеза / В.А. Алексеев, Е.М. Дутова, И.А. Кондратьева, Ю.Г. Копылова, О.Е. Лепокурова, Б.Н. Рыженко, С.Л. Шварцев. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2007. – 389 с.
16. Шварцев С.Л. Фундаментальные механизмы взаимодействия в системе вода-горная порода и ее внутренняя геологическая эволюция // *Литология*. – 2008. – № 6. – С. 3–24.
17. Равновесие азотных терм Байкальской рифтовой зоны с минералами водовмещающих пород как основа для выявления механизмов их формирования / С.Л. Шварцев, Л.В. Замана, А.М. Плюснин, О.Г. Токаренко // *Геохимия*. – 2015. – Т. 2015. – № 8. – С. 720–733.
18. Гидрогеохимические особенности термальных вод Южного Трангбо (Центральный Вьетнам) / Д.А. Новиков, V.T. Doan, T.K.V. Phan, Н.А. Харитонова // *Тихоокеанская геология*. – 2018. – Т. 37. – № 1. – С. 77–93.
19. Гусева Н.В., Воробьева Д.А., Евтюгина З.А. Особенности взаимодействия в системе вода-порода на территории водосбора озера Имандра (Кольский полуостров) // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. – 2020. – Т. 331. – № 8. – С. 177–188.
20. Lepokurova O.E. Sodium-bicarbonate groundwaters in southeastern West Siberia, Russia: Compositions, types, and formation conditions // *Applied Geochemistry*. – 2020. – V. 116. – 104579.
21. Шварцев С.Л., Зиппа Е.В., Борзенко С.В. Природа низкой солености и особенности состава термальных вод провинции Цзянси (Китай) // *Геология и геофизика*. – 2020. – V. 61. – № 2. – С. 243–262.
22. Борзенко С.В. Основные условия формирования химического состава вод соленых и соленоватых озер восточного Забайкалья // *Геохимия*. – 2020. – Т. 65. – № 12. – С. 1212–1230.
23. Alexeev S.V., Alexeeva L.P., Trifonov N.S. Equilibrium-non-equilibrium of the brine-kimberlite system in the Udachnaya pipe, Russia, based on physicochemical modeling // *Applied Geochemistry*. – 2022. – V. 138. – 105219.
24. Palandri J.L., Kharaka Y.K. A Compilation of rate parameters of water-mineral interactions kinetics for application to geochemical modeling. USGS-Report (2004-1068). – California: Menlo Park, 2004. – 64 p.
25. Parkhurst D.L., Appelo C.A.J. Description of input and examples for PHREEQC version 3-A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations // *US geological survey techniques and methods*. – Denver, Colorado, 2013. – B. 6. – Ch. A43. – 497 p.
26. Impact of fluid-rock interaction on water uptake of the Icelandic crust: implications for the hydration of the oceanic crust and the subducted water flux / B.I. Kleinea, A. Stefánsdottir, S.A. Halldórsdottir, J.D. Barnes // *Earth and Planetary Science Letters*. – 2020. – V. 538. – 116210.
27. Hydrogeochemical and isotopic characteristics of surface water and groundwater in the Qinghai Lake catchment (China) / S. Liang, J. Guo, P. Wu, Yu. Feng, Xu. Wang, G. Wang, W. Xu, Yi. Luo, Li Wan // *Arabian Journal of Geosciences*. – 2020. – V. – 13. – № 3. – P. 1–16.
28. Effects of gypsum-salt rock on mineral transformations in a saline lacustrine basin: Significance to reservoir development / L. Yanga, Xi. Lia, Qi. Zhuoc, Zh. Yuc, Yu. Yanga, K. Liu // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. – 2022. – V. 211. – 110240.
29. Processes controlling the hydrochemical composition of geothermal fluids in the sandstone and dolostone reservoirs beneath the sedimentary basin in north China / J. Lia, Zh. Wua, Gu. Tianb, Ch. Ruanb, G. Sagoec, X. Wang // *Applied Geochemistry*. – 2022. – V. 138. – 105211.
30. Geochemical evolution of groundwater under the influence of human activities: A case study in the southwest of Poyang Lake Basin / H. Maoa, G. Wanga, Fu Liaoa, Zh. Shia, Xu. Huangc, Bo Lia, Xin Yan // *Applied Geochemistry*. – 2022. – V. 140. – 105299.
31. A hydrochemistry and multi-isotopic study of groundwater origin and hydrochemical evolution in the middle reaches of the Kuye River basin / Ch. Fu, X. Li, J. Ma, L. Liu, Ming Gao, Zh. Bai // *Applied Geochemistry*. – 2018. – V. 98. – P. 82–93.
32. Gysi A.P., Stefansson A. CO₂-water-basalt interaction. Low temperature experiments and implications for CO₂ sequestration into basalts // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 2012. – V. 81. – P. 129–152.
33. CO₂ mineral trapping in fractured basalt / W. Xionga, R.K. Wells, A.H. Menefee, P. Skemerb, B.R. Ellisc, D.E. Giammar // *International Journal of Greenhouse Gas Control*. – 2017. – V. 66. – P. 204–217.
34. Borzenko S.V. The main formation processes for different types of salt lakes: Evidence from isotopic composition with case studies of lakes in Transbaikalia, Russia // *Science of the Total Environment*. – 2021. – V. 782. – 146782.
35. Borzenko S.V., Shvartsev S.L. Chemical composition of salt lakes in East Transbaikalia (Russia) // *Applied Geochemistry*. – 2019. – V. 103. – P. 72–84.
36. Борзенко С.В., Замана Л.В., Посохов В.Ф. Изотопный состав, природа и основные механизмы формирования разных типов и подтипов соленых озер Забайкалья // *Геология и геофизика*. – 2022. – Т. 63. – № 6. – С. 851–874.
37. Вертикальное распределение биомолекул в карбонатных отложениях и бактериальном мате степного щелочного озера (восточное Забайкалье) / О.В. Серебренникова, С.В. Борзенко, Е.А. Ельчанинова, Е.Б. Стрельникова, И.В. Русских // *Геохимия*. – 2022. – Т. 67. – № 5. – С. 463–481.
38. Лепокурова О.Е., Дребот В.В. Изотопный состав ($\delta^{18}\text{O}$, δD , $\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{34}\text{S}$) подземных вод территории Торейских озер (Восточное Забайкалье) // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. – 2021. – Т. 332. – № 9. – С. 20–29.
39. Borzenko S.V., Drobot V.V., Fedorov I.A. Main formation conditions of soda-type groundwater: a case study from south-

- eastern Transbaikalian region (Russia) // *Applied Geochemistry*. – 2020. – V. 123. – P. 1–16. – 104763.
40. Шварцев С.Л. С чего началась глобальная эволюция? // *Вестник РАН*. – 2010. – Т. 3. – С. 235–244.
41. Шварцев С.Л. Неизвестные механизмы гранитизации базальтов // *Вестник Российской академии наук*. – 2016. – Т. 86. – № 12. – С. 1106–1120.
42. Gysi A.P., Stefánsson A. Experiments and geochemical modeling of CO₂ sequestration during hydrothermal basalt alteration // *Chemical Geology*. – 2012. – V. 306–307. – P. 10–28.
43. Букаты М.Б. Рекламно-техническое описание программного комплекса HydroGeo. Номер гос. регистрации алгоритмов и программ во Всероссийском научно-техническом информационном центре (ВНТИЦ) № 50200500605. – М.: ВНИИЦ, 2005. – 7 с.
44. Биосферный заповедник «Даурский» / О.К. Кирилук, В.Е. Кирилук, О.А. Горошко, Л.И. Сараева, С.М. Сеница, Т.И. Бородин, Е.Э. Ткаченко, В.А. Бриних. – Чита: Экспресс-издательство, 2009. – 104 с.
45. Баженова О.И. Современная динамика озерно-флювиальных систем Онон-Торейской высокой равнины (Южное Забайкалье) // *Вестник Томского государственного университета*. – 2013. – Т. 371. – С. 171–177.
46. Содовые воды района Торейских озер Забайкальского края: химический состав подземных и озерных вод / С.В. Борзенко, В.В. Дребот, И.А. Федоров, С.Л. Шварцев // *Геологическая эволюция взаимодействия воды с горными породами: материалы III Всероссийской научной конференции с международным участием*. – Улан-Удэ: БНЦ СО РАН, 2018. – С. 434–437.
47. Верхотуров А.Г., Цыганок В.И., Карпов В.И. Гидрогеология Забайкальского края. – Чита: ЗабГУ, 2017. – 239 с.
48. Дребот В.В., Лепокурова О.Е. Оценка подвижности химических элементов в системе базальты – природные воды – вторичные отложения территории Торейских озер (Восточное Забайкалье) // *Геологическая эволюция взаимодействия воды с горными породами: материалы IV Всероссийской научной конференции с международным участием*. – Улан-Удэ: БНЦ СО РАН, 2020. – С. 335–338.
49. Garrels, R.M., Christ C.L. *Solutions, minerals and equilibria*. – New York: Harper & Row, 1965. – 450 p.
50. Helgeson H. Evaluation of irreversible reactions in geochemical processes involving minerals and aqueous solutions I. Thermodynamic relations // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 1968. – V. 32. – № 8. – P. 853–877.
51. Шварцев С.Л. Эволюция в неживой материи — природа, механизмы, усложнение, самоорганизация // *Вестник РАН*. – 2017. – Т. 87. – № 12. – С. 1091–1100.
52. Шварцев С.Л. Основы теории добавочного усложнения в биосфере Земли // *Вестник Российской академии наук*. – 2019. – Т. 89. – № 8. – С. 800–810.

Поступила 15.07.2022 г.

Информация об авторах

Лепокурова О.Е., д.г.-м. н., директор и ведущий научный сотрудник Томского филиала Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН; профессор отделения геологии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Дребот В.В., научный сотрудник Томского филиала Института нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука СО РАН; аспирант, инженер-исследователь отделения геологии Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета.

UDC 556.314

EQUILIBRIUM-NONEQUILIBRIUM STATE OF NATURAL WATERS IN THE AREA OF TOREY LAKES (EASTERN TRANSBAIKALIA) WITH LEADING MINERALS OF HOST ROCKS

Valeriia V. Drebot^{1,2},
DrebotVV@ipgg.sbras.ru

Olesya E. Lepokurova^{1,2},
LepokurovaOY@ipgg.sbras.ru

¹ Tomsk Branch of Trofimuk Institute of Petroleum-Gas Geology and Geophysics of SB RAS,
4, Akademicheskaya avenue, Tomsk, 634055, Russia.

² National Research Tomsk Polytechnic University,
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

The relevance of the work is related to the issues of the groundwater's chemical composition formation in environmental conditions, the solution of which, within the framework of the considered hypothesis of the interaction of water with rocks, is impossible without understanding the stage of water's equilibrium with minerals of host rocks. This problem is particularly specific due to the wide distribution of fissured volcanogenic structures and salt lakes in the territory, as well as the dry climate. At the same time, existing hypotheses single out evaporation processes as the key factor leading to water salinization, ignoring all others. Meanwhile, this is not obvious for groundwater. The general theory of interaction in the water–rock system can reveal the mechanism of water's different composition formation, distinguish different stages of salt accumulation, including the soda stage, which cannot be explained only by evaporation processes. To do this, it is necessary to calculate the degree of water saturation relative to the minerals of the host rocks.

The aim of the research is to assess the equilibrium-nonequilibrium state of the natural waters in the territory with minerals of host rocks at different stages of evolutionary development, to determine the possible set of secondary minerals at each stage and to identify necessary hydrogeochemical parameters for their formation. In the future, the results will be used to study the mechanisms of groundwater formation.

Objects. During chemical composition formation, groundwater goes through several stages of its development, among them: atmospheric (atmospheric waters as a source of nutrition), lithogenic (when interacting with host rocks) and evaporative (when interacting with lake waters that undergo evaporation). In order to trace the entire evolution of the composition, in addition to the directly groundwater of the upper dynamic zone (springs, wells and boreholes up to 70 m deep, 69 samples in total), atmospheric (6 samples), river (9 samples) and lake (10 samples) waters were also studied.

Methods. Water's macrocomponent composition was determined by modern standard methods: titrimetric, potentiometric, photometric, atomic absorption spectrometry with flame atomization and flame atomic emission spectrometry at the INREC SB RAS (Chita), microcomponent – by the ICP-MS method at TPU (Tomsk). Petrographic and mineralogical studies of host rocks were carried out using scanning electron microscopy at TSU (Tomsk). Physico-chemical modeling of equilibria in the water–rock system was calculated using the Hydro-Geo software package. Then the calculation results were compared with natural observations.

Results. Thermodynamic calculations in the water–rock system showed that all natural waters of the Torey Lakes area from atmospheric precipitation to salt lakes are nonequilibrium with respect to primary aluminosilicates (especially basalts, which are found in the north of the study area), which they continuously dissolve throughout this interaction, and are in equilibrium with respect to secondary minerals they form (gibbsite, kaolinite, montmorillonites, various carbonates, chlorites, albite, microcline, muscovite, etc.). The paper introduces the main physicochemical parameters (chemical composition, pH and salinity of water) obtained by the authors in the calculations, which control the formation of a certain secondary mineral.

Key words:

Surface and underground waters of the upper dynamic zone, water–rock system, secondary mineral formation, formation of chemical composition, Torey lakes, Eastern Transbaikalia.

The authors appreciate Svetlana V. Borzenko, Dr. Sc., acting for the head of the laboratory of geoecology and hydrogeochemistry at the INREC SB RAS, for assistance in field works and scientific advice.

The reported study was funded by RFBR according to the research project № 20-35-90040.

REFERENCES

1. Zhu B.Q., Ren X.Z., Rioual P. Geological control on the origin of fresh groundwater in the Otindag Desert, China. *Applied Geochemistry*, 2019, vol. 103, pp. 131–142.
2. Su Ch., Wang Ya., Ge Sh., Li, Li J. Origin of the Crescent Moon Spring in the Gobi Desert of northwestern China, based on understanding groundwater recharge. *Journal of Hydrology*, 2020, vol. 580, pp. 1–13.
3. Herczeg A.L., Dogramaci S.S., Leaney F.W.J. Origin of dissolved salts in a large, semi-arid groundwater system: Murray Basin, Australia. *Marine and Freshwater Research*, 2001, vol. 52, pp. 41–52.
4. Heiß L., Bouchaou Lh., Tadoumant S., Reichert B. Multi-tracer approach for assessing complex aquifer systems under arid climate: case study of the River Tata catchment in the Moroccan Anti-Atlas Mountains. *Applied Geochemistry*, 2020, vol. 120, 104671.
5. Pukalo P.Ia., Bazaeva A.V., Bepalyi A.V., Panchishnyi M.A. The influence of anthropogenic factors on water ecosystems. *Animal agriculture and veterinary medicine*, 2020, vol. 3, no. 38, pp. 33–36. In Rus.
6. Senarathne S., Jayawardana J., Edirisinghe E., Chandrajith R. Geochemical and isotope evidence for groundwater mineralization in a semi-arid river basin, Sri Lanka. *Applied Geochemistry*, 2021, vol. 124, pp. 1–10.

7. Guseva N.V., Kopylova Y.G., Khvashchevskaya A.A., Oidup C.K., Rychkova K.M., Ayunova O.D., Arakchaa K.D. Formation of the chemical composition of brackish and brine groundwater in the Tuva depression and surrounding areas. *Russian Geology and Geophysics*, 2018, vol. 59, no. 2, pp. 135–143. In Rus.
8. Pavlov S.Kh., Chudnenko K.V., Golubev V.A., Orgilyanov A.I., Badminov P.S., Kryukova I.G. Geological factors and physicochemical processes of groundwater formation in the Tunka depression. *Geodynamics and Tectonophysics*, 2018, vol. 9, no. 1, pp. 221–248. In Rus.
9. Mazukhina S.I., Masloboev V.A., Sandimirov S.S., Pozhilenko V.I., Ivanov S.V. Forming chemical composition of surface waters in the Arctic. Case study of lake Inari and the river Paz. *Vestnik MSTU. Scientific journal of Murmansk state technical university*, 2017, vol. 20, no. 1/2, pp. 252–260. In Rus.
10. Musin R. K.H., Galieva A.R., Kudbanov T.G., Kalkamanova Z.G., Kurlyanov N.A. soil influence on the chemical composition of ground waters in the republic of Tatarstan. *Proceedings of higher educational establishments. Geology and Exploration*, 2020, vol. 1, no. 1, pp. 90–99. In Rus.
11. Borzi G., Tanjal C., Santucci L., Carol E. Geochemical mechanisms controlling the isotopic and chemical composition of groundwater and surface water in a sector of the Pampean plain (Argentina). *Science of the Total Environment*, 2019, vol. 683, pp. 455–469.
12. Kamal S., Sefiani S., Laftouhi N.E., El Mandour A., Moustadraf J., Elgettafi M., Himi M., Casas A. Hydrochemical and isotopic assessment for characterizing groundwater quality and recharge processes under a semi arid area: Case of the Haouz plain aquifer (Central Morocco). *Journal of African Earth Sciences*, 2021, vol. 174, pp. 1–17.
13. Eissa M.A., Thomas J.M., Pohl G., Shouakar-Stash O., Hershey R.L., Dawoud M. Groundwater recharge and salinization in the arid coastal plain aquifer of the Wadi Watir delta, Sinai, Egypt. *Applied Geochemistry*, 2016, vol. 71, pp. 48–62.
14. Nisia B., Vasellia O., Taussic M., Doverid M., Menichinid M., Cabassia J., Racod B., Botteghid S., Mussid M., Masetti G. Hydrogeochemical surveys of shallow coastal aquifers: A conceptual model to set-up a monitoring network and increase the resilience of a strategic groundwater system to climate change and anthropogenic pressure. *Applied Geochemistry*, 2022, vol. 142, 105350.
15. Shvartsev S.L., Ryzhenko B.N., Alekseev V.A., Dutova E.M., Kondrateva I.A., Kopylova Yu.G., Lepokurova O.E. *Geologicheskaya evolyutsiya i samoorganizatsiya sistemy voda-poroda: v 5 tomakh. T. 2: Sistema voda-poroda v usloviyakh zony gipergenezha* [Geological evolution and self-organization of water-rock system: 5 v. Vol. 2: Water-rock system in the conditions of a hypergenesis zone]. Novosibirsk, SO RAN Publ., 2007. 389 p.
16. Shvartsev S.L. Fundamental mechanisms of interaction in the water-rock system and its interior geological evolution. *Lithosphere*, 2008, no. 6, pp. 3–24. In Rus.
17. Shvartsev S.L., Zamana L.V., Plyusnin A.M., Tokarenko O.G. Equilibrium of nitrogen-rich spring waters of the Baikal rift zone with host rock minerals as a basis for determining mechanisms of their formation. *Geochemistry International*, 2015, vol. 53, no. 8, pp. 713–725.
18. Novikov D.A., Van Tuyen D., Phan T.K.V., Kharitonova N.A. Hydrogeochemical features of thermal waters of South Trungbo (Central Vietnam). *Russian Journal of Pacific Geology*, 2018, vol. 12, no. 1, pp. 63–79.
19. Guseva N.V., Vorobeva D.A., Evtyugina Z.A. Features of interaction in the water-rock system: a case study of the Imandra lake catchment (The Kola peninsula). *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2020, vol. 331, no. 8, pp. 177–188. In Rus.
20. Lepokurova O.E. Sodium-bicarbonate groundwaters in southeastern West Siberia, Russia: Compositions, types, and formation conditions. *Applied Geochemistry*, 2020, vol. 116, 104579.
21. Shvartsev S.L., Zippa E.V., Borzenko S.V. The nature of low salinity and composition peculiarities of thermal waters in Jiangxi province (China). *Russian Geology and Geophysics*, 2020, vol. 61, no. 2, pp. 196–213.
22. Borzenko S.V. Principal parameters controlling water composition in saline and brackish lakes in eastern Transbaikalia. *Geochemistry International*, 2020, vol. 58, no. 12, pp. 1356–1373.
23. Alexeev S.V., Alexeeva L.P., Trifonov N.S. Equilibrium-non-equilibrium of the brine-kimberlite system in the Udachnaya pipe, Russia, based on physicochemical modeling. *Applied Geochemistry*, 2022, vol. 138, 105219.
24. Palandri J.L., Kharaka Y.K. *A compilation of rate parameters of water-mineral interactions kinetics for application to geochemical modeling*. USGS-Report (2004-1068). California, Menlo Park, 2004. 64 p.
25. Parkhurst D.L., Appelo C.A.J. Description of input and examples for PHREEQC version 3-A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. *US geological survey techniques and methods*. Denver, Colorado, 2013. B.6, Ch. A43, 497 p.
26. Kleinea B.I., Stefánssona A., Halldórssona S.A., Barnes J.D. Impact of fluid-rock interaction on water uptake of the Icelandic crust: Implications for the hydration of the oceanic crust and the subducted water flux. *Earth and Planetary Science Letters*, 2020, vol. 538, 116210.
27. Liang S., Guo J., Wu P., Feng Yu., Wang Xu., Wang G., Xu W., Luo Yi., Wan Li. Hydrogeochemical and isotopic characteristics of surface water and groundwater in the Qinghai Lake catchment (China). *Arabian Journal of Geosciences*, 2020, vol. 13, no. 3, pp. 1–16.
28. Yanga L., Lia Xi., Zhuoc Qi., Yuc Zh., Yanga Yu., Liu K. Effects of gypsum-salt rock on mineral transformations in a saline lacustrine basin: significance to reservoir development. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2022, vol. 211, 110240.
29. Lia J., Wua Zh., Tianb Gu., Ruanb Ch., Sagoec G., Wang X. Processes controlling the hydrochemical composition of geothermal fluids in the sandstone and dolostone reservoirs beneath the sedimentary basin in north China. *Applied Geochemistry*, 2022, vol. 138, 105211.
30. Mao H., Wang G., Liaoa Fu., Shia Zh., Huangc Xu., Lia Bo., Yan Xin. Geochemical evolution of groundwater under the influence of human activities: a case study in the southwest of Poyang Lake Basin. *Applied Geochemistry*, 2022, vol. 140, 105299.
31. Fu Ch., Li X., Ma J., Liu L., Gao Ming, Bai Zh. A hydrochemistry and multi-isotopic study of groundwater origin and hydrochemical evolution in the middle reaches of the Kuye River basin. *Applied Geochemistry*, 2018, vol. 98, pp. 82–93.
32. Gysi A.P., Stefansson A. CO₂-water-basalt interaction. Low temperature experiments and implications for CO₂ sequestration into basalts. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2012, vol. 81, pp. 129–152.
33. Xiong W., Wells R.K., Menefee A.H., Skemer P., Ellisc B.R., Giammar D.E. CO₂ mineral trapping in fractured basalt. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 2017, vol. 66, pp. 204–217.
34. Borzenko S.V. The main formation processes for different types of salt lakes: Evidence from isotopic composition with case studies of lakes in Transbaikalia, Russia. *Science of the Total Environment*, 2021, vol. 782, 146782.
35. Borzenko S.V., Shvartsev S.L. Chemical composition of salt lakes in East Transbaikalia (Russia). *Applied Geochemistry*, 2019, vol. 103, pp. 72–84.
36. Borzenko S.V., Zamana L.V., Posokhov V.F. The isotope composition, nature, and main mechanisms of formation of different types and subtypes of salt lakes in Transbaikalia. *Geology and geophysics*, 2022, vol. 63, no. 6, pp. 851–874. In Rus.
37. Serebrennikova O.V., Borzenko S.V., Elchaninova E.A., Strelnikova E.B., Russkikh I.V. Vertical distribution of biomolecules in the carbonate sediments and bacterial mat of steppe alkaline lake, Eastern Transbaikalia. *Geochemistry International*, vol. 60, no. 5, pp. 468–485.
38. Lepokurova O.E., Drebot V.V. Isotopic composition ($\delta^{18}\text{O}$, δD , $\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{34}\text{S}$) of groundwaters in the area of Torey lakes (eastern Transbaikalia region). *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2021, vol. 332, no. 9, pp. 20–29. In Rus.
39. Borzenko S.V., Drebot V.V., Fedorov I.A. Main formation conditions of soda-type groundwater: a case study from southeastern Transbaikalia region (Russia). *Applied Geochemistry*, 2020, vol. 123, pp. 1–16, 104763.

40. Shvartsev S.L. Where did global evolution begin? *Herald of the Russian Academy of Sciences*, 2010, vol. 80, no. 2, pp. 173–182.
41. Shvartsev S.L. Unknown mechanisms of granitization of basalts. *Herald of the Russian Academy of Sciences*, 2016, vol. 86, no. 6, pp. 513–526.
42. Gysi A.P., Stefánsson A. Experiments and geochemical modeling of CO₂ sequestration during hydrothermal basalt alteration. *Chemical Geology*, 2012, vol. 306–307, pp. 10–28.
43. Bukaty M.B. *Reklamno-tehnicheskoe opisanie programmnogo kompleksa HydroGeo* [Advertising and technical description of the HydroGeo software package. State number registration of algorithms and programs in the All-Russian Scientific and Technical Information Center (VNTIC) No. 50200500605]. Moscow, VNTIC Publ., 2005. 7 p.
44. Kirilyuk O.K., Kirilyuk V.E., Goroshko O.A., Sarayeva L.I., Sinitsa S.M., Borodina T.I., Tkachenko E.E., Brinikh V.A. *Gosudarstvenny zapovednik «Daurisky»* [State nature biosphere reserve «Daurisky»]. Chita, Express-publishing house, 2008. 104 p.
45. Bazhenova O.I. Current dynamics of fluvio-lacustrine systems of Onon-Torei high plain (southern Transbaikalia). *Tomsk State University Journal*, 2013, vol. 371, pp. 171–177. In Rus.
46. Borzenko S.V., Drebot V.V., Fedorov I.A., Shvartsev S.L. Sodovye vody rayona Toreyskikh ozer Zabaikalskogo kraya: khimichesky sostav podzemnykh i ozernykh vod [Soda waters of the Toreisky lakes of Transbaikalia region: chemical composition of underground and lake water]. *Geologicheskaya evolutsiya vzaimodeystviya vody s gornymi porodami. Materialy III Vserossiyskoy nauchnoy konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem* [The geological evolution of the water-rock interaction. Proc. of the third all-Russian scientific conference with international participation]. Ulan-Ude, BSC SB RAS Publ., 2018. pp. 434–437.
47. Verkhoturov A.G., Tsyganok V.I., Karpov V.I. *Gidrogeologiya Zabaikalskogo kraya* [Hydrogeology of the Trans-Baikal Territory]. Chita, ZabGU Publ., 2017. 239 p.
48. Drebot V.V., Lepokurova O.E. Otsenka podvizhnosti khimicheskikh elementov v sisteme basalty – prirodnye vody – vtorichnye otlozheniya territorii Toreyskikh ozer (Vostochnoe Zabaikalie) [Assessment of the mobility of chemical elements in the basalt-natural waters-secondary deposits system in the Torey lakes area (Eastern Transbaikalia)]. *Geologicheskaya evolutsiya vzaimodeystviya vody s gornymi porodami. Materialy IV Vserossiyskoy nauchnoy konferentsii s mezhdunarodnym uchastiem* [Water-rock interaction: geological evolution. Proc. of the fourth all-Russian scientific conference with international participation]. Ulan-Ude, BSC SB RAS Publ., 2020. pp. 335–338.
49. Garrels R.M., Christ C.L. *Solutions, minerals and equilibria*. New York, Harper & Row, 1965. 450 p.
50. Helgeson H. Evaluation of irreversible reactions in geochemical processes involving minerals and aqueous solutions I. Thermodynamic relations. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 1968, vol. 32, no. 8, pp. 853–877.
51. Shvartsev S.L. Evolution in nonliving matter: nature, mechanisms, complication, and self-organization. *Herald of the Russian academy of sciences*, 2017, vol. 87, no. 6, pp. 518–526.
52. Shvartsev S.L. Foundations of the theory of additional complication in the Earth's biosphere. *Herald of the Russian academy of sciences*, 2019, vol. 89, no. 4, pp. 379–387.

Received: 15 July 2022.

Information about the authors

Olesya E. Lepokurova, Dr. Sc., a head of laboratory, Tomsk Branch of Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics of SB RAS; professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

Valeriia V. Drebot, a research associate, Tomsk Branch of Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics of SB RAS; postgraduate student, research engineer, National Research Tomsk Polytechnic University.