

**РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК**

**ОТДЕЛЕНИЕ НАУК О ЗЕМЛЕ**

**ИНСТИТУТ ГЕОХИМИИ И АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ  
им. В.И.ВЕРНАДСКОГО**

**ИНСТИТУТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МИНЕРАЛОГИИ  
им. Д.С.КОРЖИНСКОГО**

**РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**РОССИЙСКОЕ МИНЕРАЛОГИЧЕСКОЕ  
ОБЩЕСТВО**

**ВСЕРОССИЙСКИЙ**

**ЕЖЕГОДНЫЙ СЕМИНАР ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ**

**МИНЕРАЛОГИИ, ПЕТРОЛОГИИ И ГЕОХИМИИ**

**ВЕСЭМПГ-2018**

**18–19 апреля 2018 г.**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Москва 2018

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСА GEOSHEQ ДЛЯ СОВМЕСТНОГО РАСЧЕТА ХИМИЧЕСКИХ И ИЗОТОПНЫХ РАВНОВЕСИЙ НА ПРИМЕРЕ ИЗОТОПОВ УГЛЕРОДА.

**Мироненко М.В. (ГЕОХИ РАН), Поляков В.Б. (ИЭМ РАН), Алена М.В. (ГЕОХИ)**

База термодинамических данных и программа расчета химических равновесий комплекса GEOSHEQ для геохимического моделирования модернизирована для хранения термодинамической информации по фракционированию изотопов легких химических элементов и одновременного расчета химических и изотопных равновесий в гидротермальных и гидрогеохимических системах. Расчет основан на минимизации свободной энергии Гиббса системы с учетом присутствия редких изотопологов. Свободная энергия Гиббса  $G^*(P, T)$  образования редких изотопологов рассчитывается через свободную энергию образования основного изотополога с учетом величины  $\beta$ -фактора в приближении идеальной смеси изотопов. Таким образом, создан инструмент для моделирования и интерпретации наблюдаемых минеральных и изотопных соотношений и изотопного состава минералов и флюидов. Показаны примеры применения комплекса GEOSHEQ для расчета химических и углеродных изотопных равновесий в гидротермальных системах.