

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ГЕОХИМИИ им. А.П. ВИНОГРАДОВА
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИГХ СО РАН)

Индекс УДК 550.4:551.2 + 550.4:551.3
Рег. № НИОКР 121041600115-8

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИГХ СО РАН, д.г.-м.н.

А.Б. Перепелов
«24» декабря 2025 г.



ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

Экспериментальная минералогия и петрология
по теме:

ИЗУЧЕНИЕ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМ НАХОЖДЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ В РЕАЛЬНЫХ
КРИСТАЛЛАХ И РОСТОВЫХ СРЕДАХ ГЕОХИМИЧЕСКИХ И
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ
(заключительный)

Направление фундаментальных и поисковых исследований
1.5.3. Минералогия и петрология

Шифр темы: 0284-2021-0002

Протокол Ученого совета ИГХ СО РАН
№ 10 от 26 декабря 2025 г.

Руководитель проекта г.н.с.,
доктор химических наук

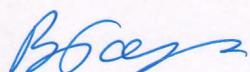
В.Л. Таусон
23.12.2025г.

В.Л. Таусон

Иркутск 2025

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Научный руководитель
проекта, гл. науч. сотр., д-р
химических наук


23.12.2025 г.

В.Л. Таусон (раздел 2, п. 2.1,
введение, заключение)

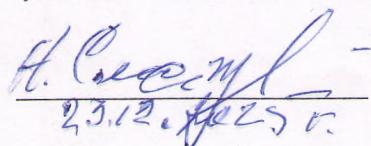
Ответственные исполнители:

Ведущий науч. сотр.,
докт. химических наук


23.12.2025 г.

Б.В. Акимов (раздел 3, п.3.1,
раздел 4, п. 4.1)

Старший науч. сотр., канд.
химических наук


23.12.2025 г.

Н.В. Смагунов (раздел 1, п.
1.1)

Старший науч. сотр., канд.
химических наук


23.12.2025 г.

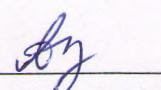
С.В. Липко (раздел 1, п.1.1,
заключение)

Старший науч. сотр., канд.
геолого-минералогических
наук


23.12.2025 г.

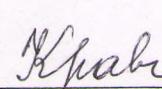
А.Н. Сапожников (раздел 3,
п.3.1, заключение)

Старший науч. сотр., докт.
химических наук


23.12.2025 г.

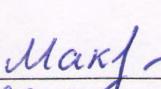
А.А. Тупицын (раздел,
пп.4.2, 4.4, заключение)

Ведущий науч. сотр., докт.
геолого-минералогических
наук


23.12.2025 г.

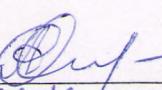
Р.Г. Кравцова (раздел 2,
пп.2.1, 2.2, заключение)

Старший науч. сотр., канд.
геолого-минералогических
наук


23.12.2025 г.

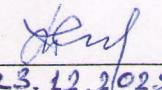
А.С. Макшаков (раздел 2,
пп.2.1, 2.2)

Научный сотр. канд.
геолого-минералогических
наук


23.12.2025 г.

А.В. Ощепкова (раздел 4,
п.4.3)

Нормоконтроль


23.12.2025 г.

Т.Ю. Гармышева

РЕФЕРАТ

Отчет 64 с., 1 кн., 12 рис., 6 табл., 35 источн., 4 прил.

ПИРИТ, АРСЕНОПИРИТ, ЭЛЕМЕНТЫ ПРИМЕСИ, ФОРМЫ НАХОЖДЕНИЯ, ЗОЛОТО-СЕРЕБРЯНЫЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ, НАНОЧАСТИЦЫ, МЕТАН, ГАЗОГИДРАТЫ, ИМПЛАНТАТЫ, ГЛИНОЗЕМ

Основная цель исследования: получение новых знаний в области вещественного состава, условий образования и методов поиска рудных месторождений, создания наносистем и материалов с практически важными свойствами, анализа процессов трансформации окружающей среды при техногенном воздействии на природные экосистемы.

Первый опыт мета-анализа состава пирита месторождений разных генетических типов с использованием, полученных при реализации проекта коэффициентов сокристаллизации элементов примесей, показал, что отношения Co/Cu и Ni/Cu могут быть более чувствительными геохимическими индикаторами по сравнению с традиционным Co/Ni. Высокие отношения As/Au в растворах подтверждают роль As как элемента-“проводника” Au при образовании золоторудных месторождений разных типов.

На примере золоторудного гиганта Наталкинского (Приколымье) показано, что распределение содержаний Au на поверхности кристаллов арсенопирита связано с условиями формирования месторождения. Наиболее высокие концентрации Au приурочены к поверхности кристаллов гидротермального этапа рудообразования, минимальные – раннего метаморфогенного этапа. Методом РФЭС на поверхности фиксируются высоко зарядные формы мышьяка – As⁵⁺ и As³⁺.

Установлено, что сформированные на поверхности арсенопирита защитные слои Fe/(Fe+Cu) кардинально меняют морфологию и подвижность наночастиц Au.

Впервые показано, что модифицирование поверхности титановых имплантатов для остеосинтеза возможно при использовании низких потенциалов поляризации (0–1В). Увеличение потенциала поляризации способствует увеличению как толщины, так и шероховатости оксидной пленки.

С помощью аддитивных методов выполнены расчеты термодинамических функций и сконструированы формуляры термодинамических свойств газогидратов метана и других углеводородов, а также инертных (Ar, Kr, Xe) и атмосферных газов (N₂, O₂, H₂S).

Методом ФХМ с использованием программного комплекса «Селектор» изучены условия устойчивость метана в осадках оз. Байкал. Результаты моделирования показывают, что глубинный углеводородный флюид может участвовать в формировании газов с преобладанием метана, наблюдавшихся на поверхности.

СОДЕРЖАНИЕ

ПЕРЕЧЕНЬ ОПРЕДЕЛЕНИЙ, СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ.....	5
ВВЕДЕНИЕ.....	6
1 Моделирование состава флюидов, формирующих рудные месторождения в различных геохимических обстановках.....	8
1.1 Соотношения элементов в минерале и флюиде на основе парных коэффициентов сокристаллизации (не примере мета-анализа данных по пириту).....	8
2 Особенности распределения и форм нахождения Au и Ag в рудах и минералах крупных золото- и сереброрудных месторождений Северо – Востока РФ.....	12
2.1 Орогенное золоторудное месторождение-гигант Наталкинское (Приколымье).....	12
2.2 Эпимеральное Au-Ag месторождение (сереброрудный гигант) Дукат, Охотско-Чукотский вулканогенный пояс.....	15
3 Роль наночастиц и их эволюции в образовании руд благородных металлов.....	17
3.1 Превращения с участием наночастиц Au на минеральных поверхностях как модель их поведения в процессах гидротермального рудообразования.....	17
4 Физико-химическое моделирование в решении технологических и экологических проблем.....	20
4.1 Электрохимическая поляризация как инструмент воздействия на поверхность и свойства титановых имплантатов для остеосинтеза.....	20
4.2 Принципы моделирования газогидратных систем	22
4.3 Глубинные углеводородные газы осадков озера Байкал по данным физико-химического моделирования.....	25
4.4 Моделирование природных и техногенных алюмосиликатных ресурсов промышленного региона (на примере глиноземного производства).....	26
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	29
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	42
ПРИЛОЖЕНИЕ А Перечень статей, опубликованных по тематике проекта в 2025 г. в соответствии с государственным заданием.....	46
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Показатели выполнения проекта в 2025 г.....	48
ПРИЛОЖЕНИЕ В Копия Государственного задания на 2025 г. по проекту.....	49
ПРИЛОЖЕНИЕ Г Перечень публикаций по проекту за 2021 – 2025 гг.....	50

ПЕРЕЧЕНЬ ОПРЕДЕЛЕНИЙ, ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ

В настоящем отчете о НИР применяются следующие термины с соответствующими определениями, обозначения и сокращения.

ААС – атомно-абсорбционная спектрометрия

АСМ – атомно-силовая микроскопия

БМ – благородные металлы

г/т – грамм на тонну (концентрация элемента, англ. эквивалент - ppm)

ЗШЛ – золошлаковые отходы

ИГУ – Иркутский государственный университет

КОСВ – критериально обоснованные статистические выборки

ЛА-ИСП-МС – масс-спектрометрия с индуктивно связанной плазмой и лазерной аблацией

ЛИН СО РАН – Лимнологический институт Сибирского отделения РАН

МЭ – микроэлемент

НФ – неавтономные фазы

НЦ ХТ – Научный центр хирургии и травматологии (г.Иркутск)

НЧ – наночастицы

РЗЭ – редкоземельные элементы (англ. эквивалент – REE)

РСМА – рентгеноспектральный микроанализ

РФЭС – рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

СВАДМ – статистические выборки аналитических данных для монокристаллов

СП – синтетическая порода (англ. эквивалент – SynRock)

СЭМ – сканирующая электронная микроскопия

ФН – форма нахождения

ФХМ – физико-химическое моделирование

ЦКП – центр коллективного пользования

ЭВС – эпiterмальные высоко сульфидные (месторождения)

ЭНС – эпiterмальные низко сульфидные

ЭП – элемент-примесь

Аq – водная фаза (раствор, флюид)

$D_{1/2}$ – коэффициент сокристаллизации элементов 1 и 2

fS_2 – фугитивность серы

Ру – пирит, FeS_2

Qtz – кварц, кварцит

S – селективность

ВВЕДЕНИЕ

Исследования проводились согласно плановому заданию (Приложение В) с учетом задач Программы развития ИГХ СО РАН и Стратегии научно-технического развития РФ. Настоящий отчет подводит итог по следующим этапам работы по теме Проекта (регистрационный номер НИОКТР 121041600115-8):

I Этап (01.01.2021-31.12.2021) – 222022100006-1,

II Этап (01.01.2022-31.12.2022) – 223020700655-0,

III Этап (01.01.2023-31.12.2023) – 224021300388-7,

IV Этап (01.01.2024-31.12.2024) – 225021310029-5,

Заключительный Этап (01.01.2025-31.12.2025).

Необходимость определенной корректировки плана 2025 г. связана с тем, что в рамках сотрудничества со сторонними организациями были завершены некоторые важные в практическом отношении, многолетние совместные исследования. Так, удалось провести и интерпретировать эксперименты по роли состояния поверхности титановых имплантатов в удержании клеток фибробластов крысы при «мягких» условиях электрохимической модификации поверхности [1] (совместно с ИГУ, ЛИН СО РАН, НЦ ХТ, Иркутск). Эти исследования не относятся непосредственно к теме проекта, но соответствуют ей в более широком плане – изучения роли поверхностных явлений в различных физико-химических и биогеохимических процессах.

Построение количественных моделей фракционирования элементов в геохимических системах требует знания их коэффициентов распределения (сокристаллизации). В случае магматических систем типа кристалл-расплав таких данных довольно много, но для гидротермальных систем типа кристалл-раствор (флюид) они крайне ограничены. Полученные нами в рамках Проекта данные по распределению и сокристаллизации элементов – примесей в основных рудных минералах [2], [3] постепенно приобретают мировую известность [4], [5], что неудивительно, ведь альтернативных источников такой информации до сих пор нет. Однако, эти результаты могут использоваться и в несколько ином плане, в частности, для оценки соотношений элементов в рудообразующих растворах на месторождениях разных типов путем применения так называемых «парных» коэффициентов сокристаллизации ($D_{Co/Ni}$, $D_{As/Au}$ и др.). В настоящем отчете попытки таких оценок делаются на примере пиритов месторождений различного генезиса. Рассматриваются перспективы и недостатки такого подхода, методические аспекты проблемы.

Получены новые данные по распределению и формам нахождения Au в орогенном золоторудном гиганте Наталкинское (Приколымье). Методами СВАДМ и ЛА-ИСП-МС подтверждена природа поверхностно-связанного Au в составе неавтономной фазы теперь и для арсенопирита. С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) определены валентные формы As. На сереброрудном гиганте Дукат детально исследованы особенности химического состава минералов ряда Ag-Au и выработаны возможные критерии оценки уровня эрозионного среза рудных зон и прогноза оруденения на глубину.

Рассмотрены превращения с участием наночастиц Au, Fe и Cu как возможной модельной системы для изучения роли НЧ в рудообразовании.

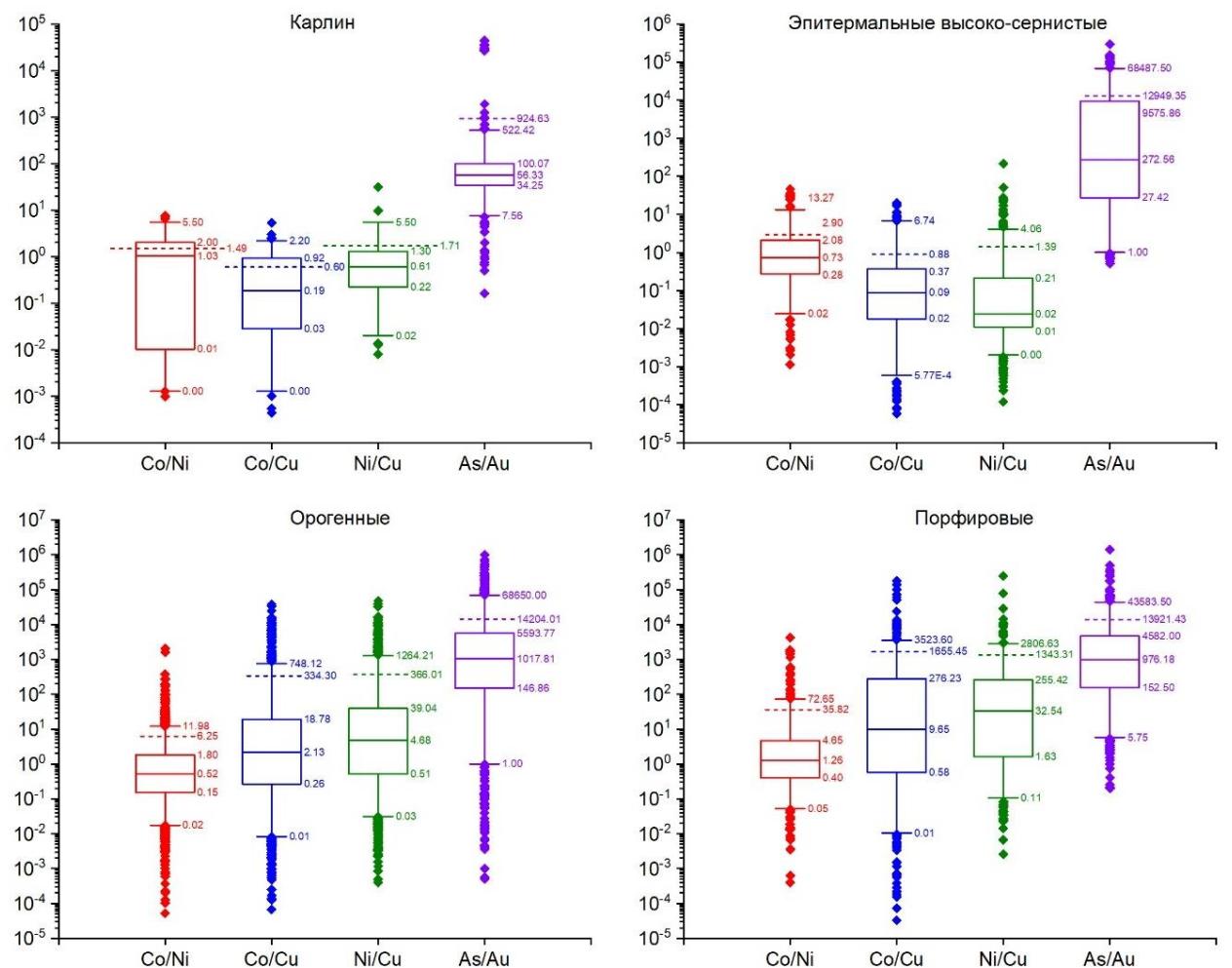
В заключительном разделе отчета рассмотрены примеры применения физико-химического моделирования в решении некоторых технологических и экологических проблем. Помимо уже упоминавшегося изучения воздействия электрохимической поляризации на свойства поверхности титановых имплантатов, рассматривается состояние проблемы получения надежных термодинамических данных для моделирования газогидратных систем, вопросы моделирования газовой среды осадков оз. Байкал, а также применения ФХМ при анализе технологических аспектов использования золошлаковых отходов ТЭЦ и каолинитового концентрата в глиноземном производстве.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

1 Моделирование состава флюидов, формирующих рудные месторождения в различных геохимических обстановках

1.1 Соотношения элементов в минерале и флюиде на основе парных коэффициентов сокристаллизации (не примере мета-анализа данных по пириту)

Проблема применения на практике полученных в результате выполнения настоящего проекта коэффициентов распределения и сокристаллизации элементов примесей (ЭП) является весьма сложной [3]. Для разделения форм нахождения микроэлемента (МЭ) и выделения его концентрации, отвечающей структурной форме, необходимы специальные методы обработки аналитических данных, учитывающие характер распределения и пределы содержания различных форм нахождения (ФН) элемента. Во многих работах приводятся усредненные данные некоторого набора анализов пробы, однако, их вариации оказываются очень значительными, что делает использование среднего некорректным. В подобных случаях флуктуации состава могут не быть малыми поправками к средним значениям концентрации, а способны существенно изменять сами эти значения [6]. Без выявления природы неоднородности трудно установить, каково ее значение для результата в целом, будет ли она существенно влиять на величину среднего. Наш подход в случае анализа методом ЛА-ИСП-МС включает процедуру критериально-обоснованных статистических выборок (КОСВ), формального аналога метода СВАДМ – статистических выборок аналитических данных для монокристаллов [7], [8]. Используется весь набор аналитических данных для монокристаллов (или точек анализа), из которого формируются выборки, отвечающие за определенные ФН элемента. В данном случае речь идет о структурной форме, поскольку только она строго подчиняется законам распределения. Примеры такого подхода рассматриваются в следующем разделе настоящего отчета. К сожалению, такого рода данные в мировой литературе отсутствуют, если не считать наших работ по Au и некоторым платиноидам в минералах золоторудных месторождений [7], [8], [9]. Поэтому описываемый здесь мета-анализ данных, обобщенных в работе [10], можно считать надежным лишь в той мере, в какой среднее содержание элемента в пирите отражает его концентрацию в структурной форме. На рисунке 1 приведены данные, обработанные и представленные нами в форме боксплотов для 4 генетических типов пирита из месторождений типа Карлин, эпiterмальных, орогенных и порфировых.



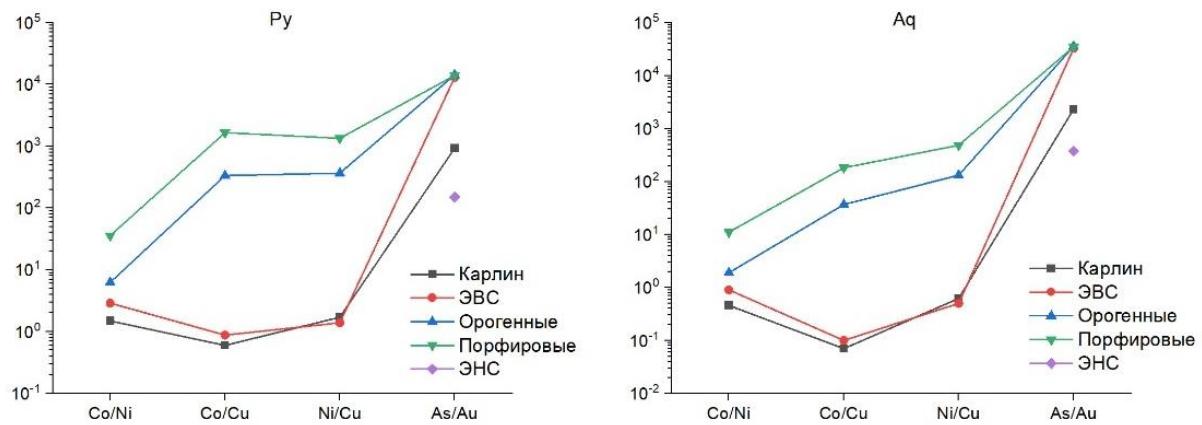
Среднее (прерывистая линия), медиана (сплошная линия внутри бокса)
Рисунок 1 – Боксплоты отношений типомофных элементов примесей в пиритах
месторождений разных типов (по [10])

Данные представлены для основных элементов примесей (ЭП) пирита Co, Ni, Cu, As и Au – отношений элементов, для которых, ранее были получены коэффициенты сокристаллизации, что позволяет оценить соотношения этих элементов в растворе (флюиде), из которого образуются кристаллы пирита. Например, для Co/Ni отношения в растворе (Aq) имеем:

$$(Co/Ni)^{Aq} = (Co/Ni)^{Py} \cdot (D_{Ni/Fe}/D_{Co/Fe}), \quad (1)$$

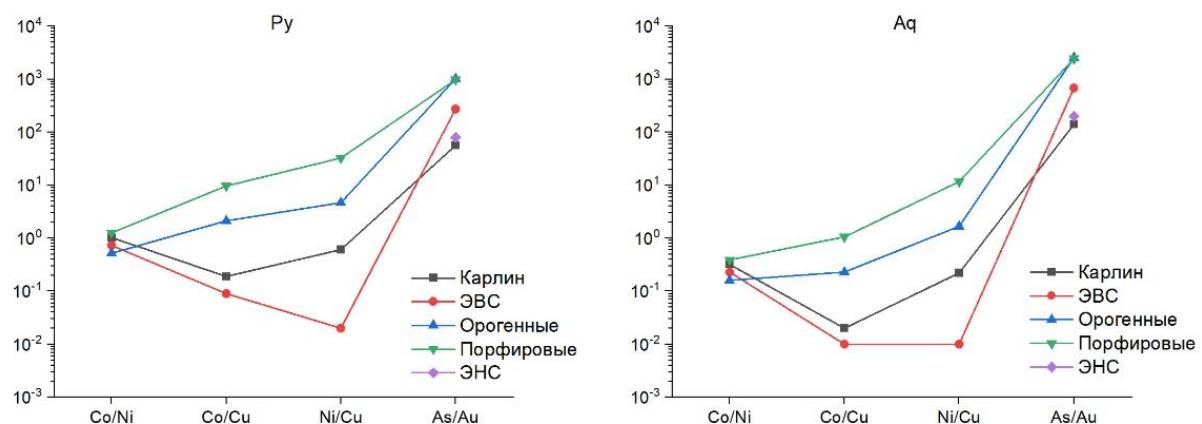
где D – коэффициенты сокристаллизации элементов и Fe.

Результаты представлены на Рисунках 2 и 3, где применяются средние и медианные значения концентраций, ЭВС и ЭНС – эптермальные высоко сульфидные и низко сульфидные месторождения, соответственно.



Ру – пирит, Аq – раствор (флюид)

Рисунок 2 – Отношения типоморфных ЭП пирита в кристаллах (средние) и в растворах для месторождений различных генетических типов



Ру – пирит, Аq – раствор (флюид)

Рисунок 3 – Отношения типоморфных ЭП пирита в кристаллах (медианные) и в растворах для месторождений различных генетических типов

В расчетах использовали результаты экспериментов по определению коэффициентов сокристаллизации ЭП между пиритом и водным флюидом в поликомпонентных гидротермальных системах при 450 °С и давлении 1 кбар: $D_{\text{ЭП/Fe}} = 0.7 \pm 0.3$ (Co), 0.22 ± 0.08 (Ni), 0.08 ± 0.06 (Cu), $(1.2 \pm 1) \cdot 10^{-4}$ (As), $(3 \pm 1) \cdot 10^{-4}$ (Au). Полученные результаты, основанные исключительно на современных ЛА-ИСП-МС анализах, позволяют по-новому оценить известные геохимические индикаторные отношения. Так, орогенные, ЭВС и Карлин - типы характеризуются близкими отношениями Co/Ni (Таблицы 1 и 2), тогда как орогенные и порфировые очень сильно отличаются от остальных (ЭВС и Карлин) по Co/Cu и Ni/Cu отношениям, причем различия достигают 2-3 порядков величины как для твердой, так и для жидкой фазы (Рисунки 2 и 3).

Таблица 1 – Усредненные соотношения элементов в пиритах (Py) месторождений различных типов и рассчитанные по ним соотношения этих элементов в минералообразующих флюидах (Aq)

Отн. эл- тов	Карлин		ЭВС		ЭНС		Орогенные		Порфировые	
	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq
Co/Ni	1.49	0.46	2.9	0.9	-	-	6.25	1.9	35.82	11.1
Co/Cu	0.6	0.07	0.88	0.1	-	-	334.3	36.8	1655	182
Ni/Cu	1.71	0.62	1.39	0.5	-	-	366	132	1343	484
As/Au	925	2312	12949	32373	151	378	14204	35510	13921	34803

Таблица 2 – Медианные значения соотношений элементов в пиритах (Py) месторождений различных типов и рассчитанные по ним соотношения этих элементов в минералообразующих флюидах (Aq)

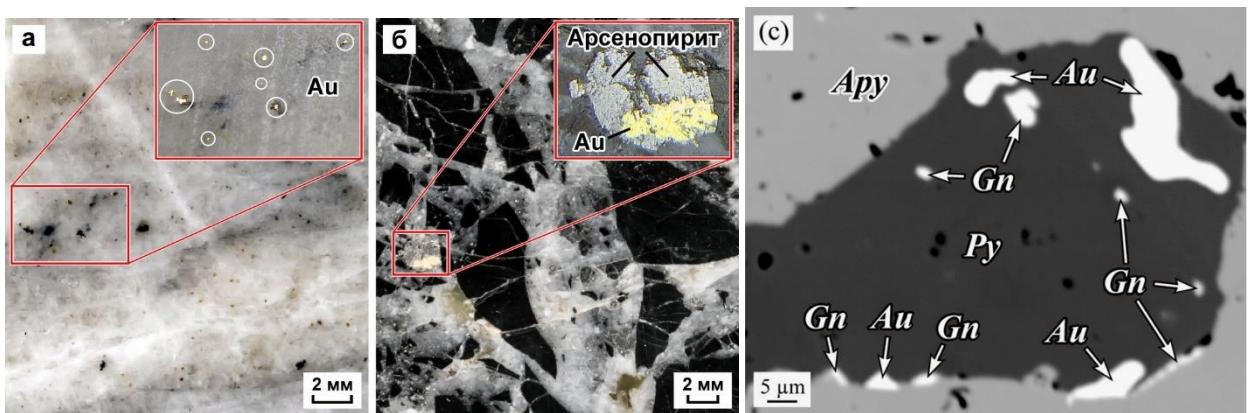
Отн. эл- тов	Карлин		ЭВС		ЭНС		Орогенные		Порфировые	
	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq	Py	Aq
Co/Ni	1.03	0.32	0.73	0.23	-	-	0.52	0.16	1.26	0.39
Co/Cu	0.19	0.02	0.09	0.01	-	-	2.13	0.23	9.65	1.06
Ni/Cu	0.61	0.22	0.02	0.01	-	-	4.68	1.68	32.54	11.71
As/Au	56.3	140.8	272.6	681.5	79.9	200	1017.8	2542.5	976.2	2440.5

Эти данные показывают, что отношения с участием Cu могут быть более чувствительными геохимическими индикаторами по сравнению с Co/Ni отношением, которое, как полагают, при значениях <1 характеризует осадочный или диагенетический пирит, а при величинах >1 фиксирует связь с магматогенно-гидротермальным источником [11]. Очень высокие отношения As/Au в растворах ($n \cdot 10^2$ - 10^4) на всех месторождениях подтверждают роль As как элемента-«проводника» Au при образовании золоторудных месторождений-гигантов [11], [12].

2 Особенности распределения и форм нахождения Au и Ag в рудах и минералах крупных золото- и сереброрудных месторождений Северо – Востока РФ

2.1 Орогенное золоторудное месторождение-гигант Наталкинское (Приколымье)

По данным атомно-абсорбционной спектрометрии (AAC) к наиболее богатым по содержанию Au относятся жильные и прожилково-жильные руды, к менее богатым – прожилково-вкрапленные, к бедным – вкрапленные. По данным оптической микроскопии (ОМ) и рентгеноспектрального микрозондового анализа (РСМА) до 80% Au в руде находится в свободном самородном состоянии в ассоциации с нерудными (кварц) и сульфидными (арсенопирит, пирит) минералами. Преобладает Au размером 0.01–2.0 мм и пробностью до 720–860%. До 20% приходится на долю тонкодисперсного Au (< 0.01 мм) пробностью 750–990 %, большая часть которого находится в ассоциации с сульфидами (Рисунок 4).

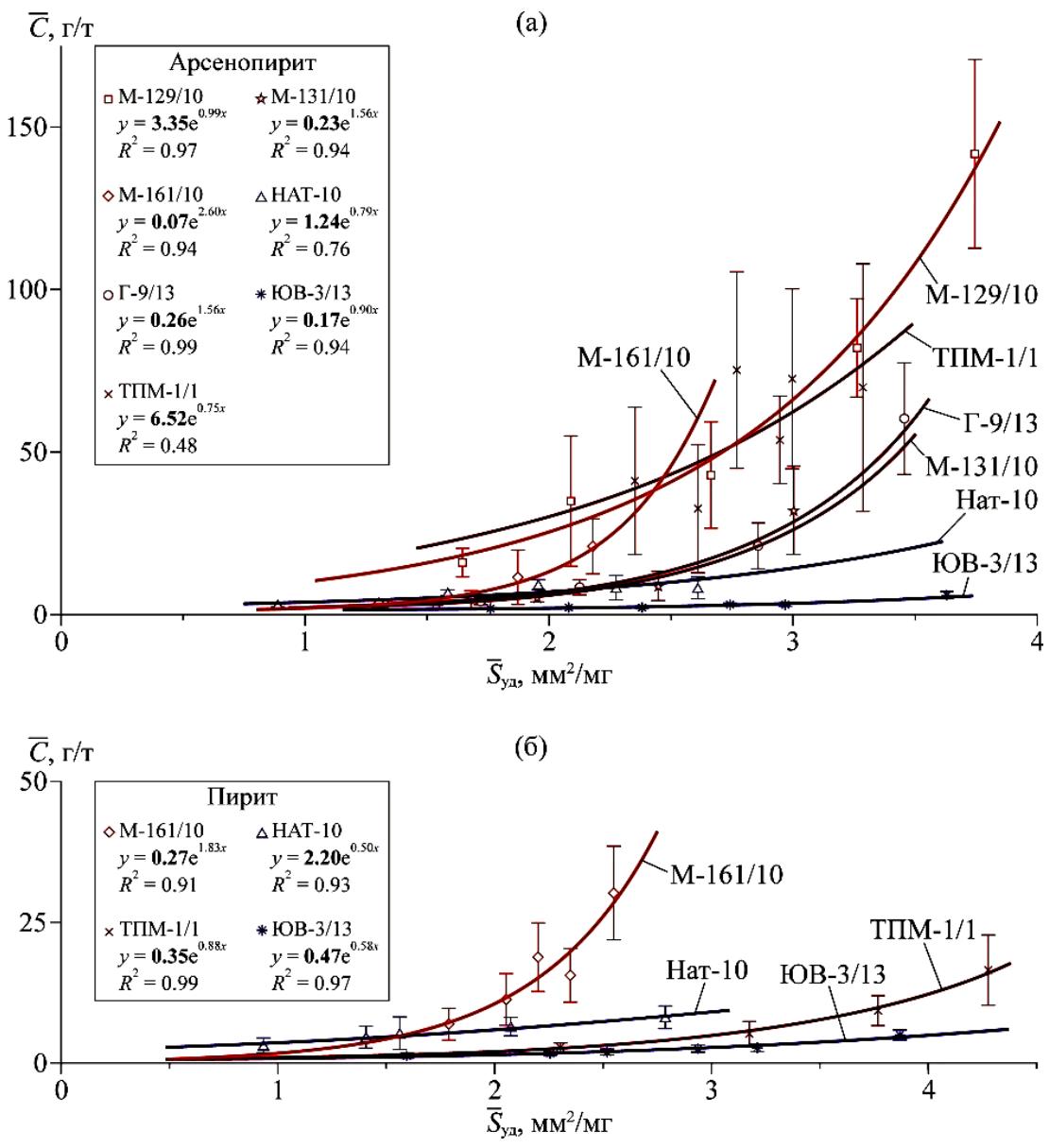


а – кварцевая жила с включениями Au, б – брекчиея кварцевая жила в углеродистых алевролитах с вкрапленностью арсенопирита (*Apy*) и Au, в – многочисленные включения Au и галенита (*Gn*) в кристалле пирита (*Py*), заключенного в арсенопирите.

Рисунок 4 – Срастания Au с минералами: изображения с оптического микроскопа (а, б) и электронно-зондового микроанализатора (в обратно-рассеянных электронах, в)

По данным фазового химического анализа более золотоносным является арсенопирит (до 1383 г/т), менее золотоносным – пирит (до 250.1 г/т).

С помощью аналитической технологии СВАДМ в изученных сульфидах установлены две ФН «невидимого» Au – структурная и поверхностно-связанная. Первая входит в структуру минералов, вторая, приурочена к их поверхности в форме наноразмерной неавтономной фазы (НФ). Присутствие этих форм вызывает зависимость среднего содержания равномерно распределенной формы элемента от удельной поверхности среднего кристалла в размерной выборке (Рисунок 5).



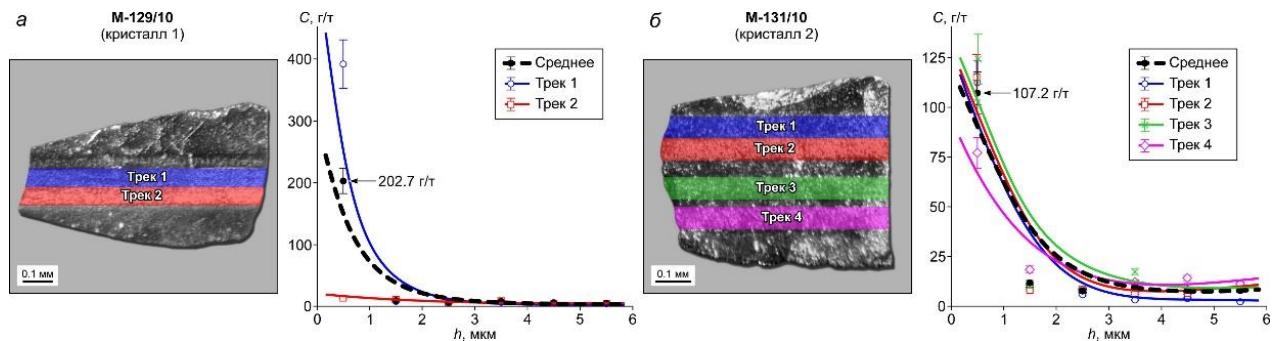
а – арсенопирит, б – пирит

Рисунок 5 – Зависимости среднего содержания равномерно распределенного Au от удельной поверхности кристалла в размерной выборке минералов из руд жильного (M-129/10, M-161/10), прожилково-жильного (ТПМ-1/1, Г-9/13, М-131/10) и прожилково-вкрашенного типа (Нат-10, ЮВ-3/13). Предэкспоненциальный множитель (выделен жирным) является оценкой концентрации структурной примеси Au, кривые представляют аппроксимацию точек экспоненциальными зависимостями (см. слева от кривых).

Поверхностная форма преобладает и существует в очень тонком поверхностном слое кристалла (~100–500 нм). Появление микроминеральных форм самородного Au в кристаллах и в составе их поверхности, говорит в пользу предположения о частичной трансформации и направленной агрегации высвобождающегося Au с образованием его частиц от наноразмерных до субмикронных.

Изучение природной поверхности кристаллов арсенопирита методом ЛА-ИСП-МС показало высокую степень ее обогащения Au по сравнению с матрицей. Установлено, что распределение содержаний Au на поверхности изученного сульфида и уровня его

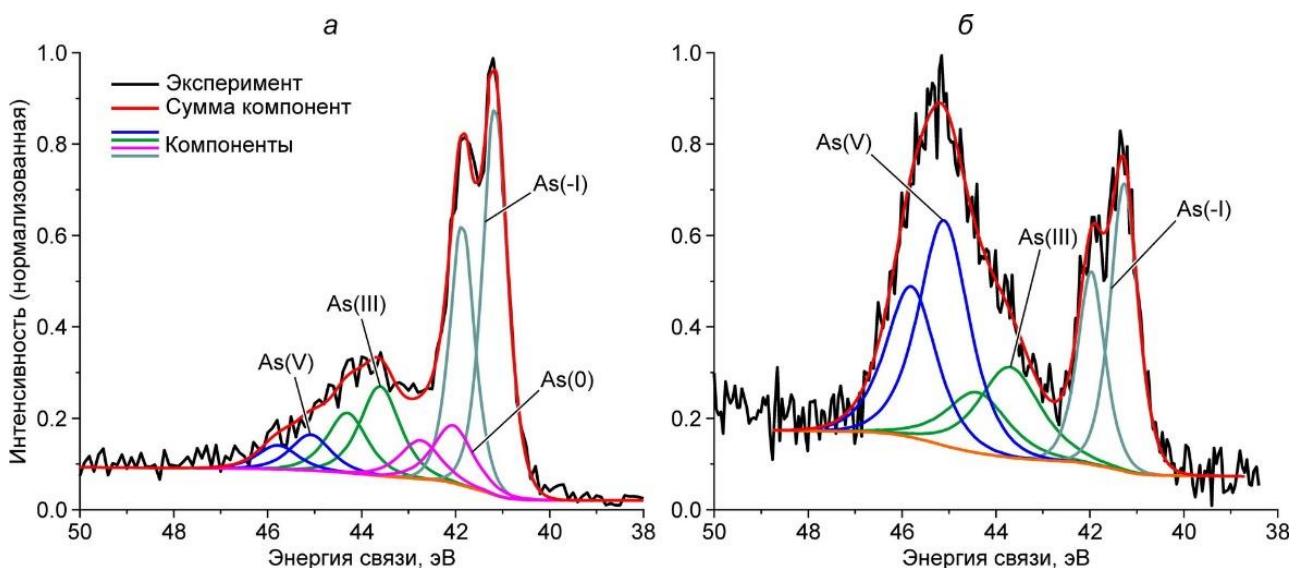
концентрирования тесно связаны с условиями формирования месторождения. Наиболее высокие концентрации Au приурочены к поверхности кристаллов арсенопирита гидротермального этапа рудообразования (Рисунок 6), а минимальные – раннего метаморфогенного.



а – жильные руды, б – прожилково-жильные руды

Рисунок 6 – Графики распределения содержаний Au (C) по глубине (h) кристаллов арсенопирита по данным ЛА-ИСП-МС анализа. Точки отнесены к серединам интервалов

Неустойчивость профиля распределения Au и его содержаний даже в пределах поверхности одного кристалла особенно ярко проявлены в арсенопирите жильных и прожилково-жильных руд, что обусловлено нестабильностью физико-химических параметров гидротермального рудообразования на более поздних стадиях формирования месторождения. В основном, это процессы окисления, приводящие к изменению состава первичных (ростовых) НФ и перераспределению Au в поверхностном слое кристалла, содержащем высоко зарядные формы мышьяка – As⁵⁺ и As³⁺ (Рисунок 7).

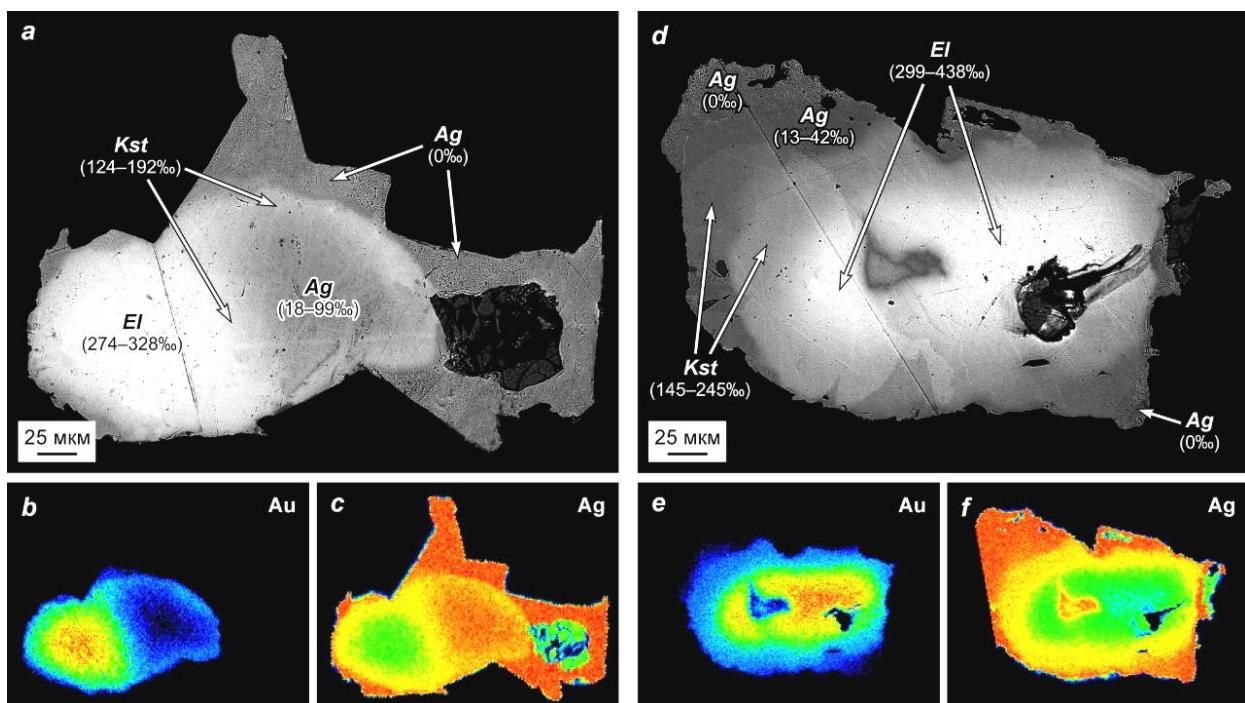


а – кристаллы истертые перед съемкой, б – отсняты на гранях

Рисунок 7 – Рентгеновский фотоэлектронный спектр As 3d_{5/2}, 3d_{3/2} и валентные формы мышьяка в кристаллах арсенопирита

2.2 Эпимеральное Au-Ag месторождение (сереброрудный гигант) Дукат, Охотско – Чукотский вулканогенный пояс

С помощью методов оптической микроскопии и РСМА изучен типохимизм золотосодержащих минералов ряда Ag–Au на месторождении Дукат. Они представлены золотосодержащим самородным Ag и кюстелитом, реже электрумом (Рисунок 8).



a, d – изображения в обратно рассеянных электронах, b, e – в рентгеновских лучах Au, c, f – Ag; EI – электрум пониженной пробности, Kst – кюстелит, Ag – самородное Ag; в скобках дана пробность

Рисунок 8 – Неоднородность основного состава Au-Ag частиц

Пробность золотосодержащего Ag варьирует в диапазоне 10–99% (в среднем 51%), кюстелита – 101–245% (в среднем 149%). Электрум имеет низкую пробность – от 274 до 438% (в среднем 357%). Для золотосодержащего Ag характерно максимальное количество примесей: Au, Te, Cu, Sb, Hg, Pb и Fe, реже Se, S и Bi. В кюстелите количество примесей снижается: Te, Hg, Sb, Cu и Pb, реже Bi и Se. Минимальное количество примесей содержит электрум: Te, Hg, Cu и Bi, реже As и Se (Таблицы 3, 4).

Таблица 3 – Состав золотосодержащего серебра и кюстелита (данные РСМА)

n	Пробн., %	Содержание, мас.%											
		Au	Ag	Te	Cu	Hg	Sb	Pb	Fe	Se	S	Bi	Σ
1	90	8.92	90.01	0.25	–	–	–	0.14	–	–	–	0.13	99.45
2	53	5.29	95.01	–	–	0.29	0.28	0.16	–	0.12	–	–	101.15
3	11	1.07	98.34	0.20	0.14	0.20	–	–	–	–	–	–	99.95
4	52	5.18	94.10	0.25	–	–	–	0.26	0.21	0.24	0.39	–	100.63
5	107	10.58	88.57	0.13	0.10	–	0.15	–	–	–	–	–	99.53
6	186	18.65	81.50	–	0.14	0.21	–	–	–	–	–	0.29	100.79
7	153	15.12	83.49	0.19	–	–	–	0.27	–	–	–	–	99.07
8	145	14.47	85.41	–	–	0.20	–	–	–	0.20	–	–	100.28

Примечание – Прочерки – ниже предела обнаружения (<0.1 мас.%). Здесь и в Таблице 3: n – точки определения состава; пробн. – пробность. Σ – сумма анализа.

Таблица 4. Состав электрума (данные РСМА)

n	Пробн., %	Содержание, мас.%								
		Au	Ag	Te	Hg	Cu	Bi	As	Se	Σ
1	328	32.67	66.92	0.14	0.19	–	0.34	–	–	100.26
2	317	31.61	68.13	0.12	–	–	0.41	–	–	100.27
3	274	27.69	73.37	0.15	–	–	–	0.18	0.15	101.54
4	410	41.30	59.33	–	0.37	0.14	–	–	–	101.14
5	381	38.11	61.81	0.14	–	–	–	0.20	–	100.26
6	438	43.81	56.26	–	0.26	0.20	–	–	–	100.53

Состав примесей и уровень их концентраций тесно связаны с геохимическими особенностями Au-Ag руд серебряного типа, которые преобладают на верхне-среднерудных интервалах месторождения Дукат и могут быть одним из дополнительных критериев при оценке уровня эрозионного среза рудных зон и прогнозировании Au-Ag оруденения на глубину.

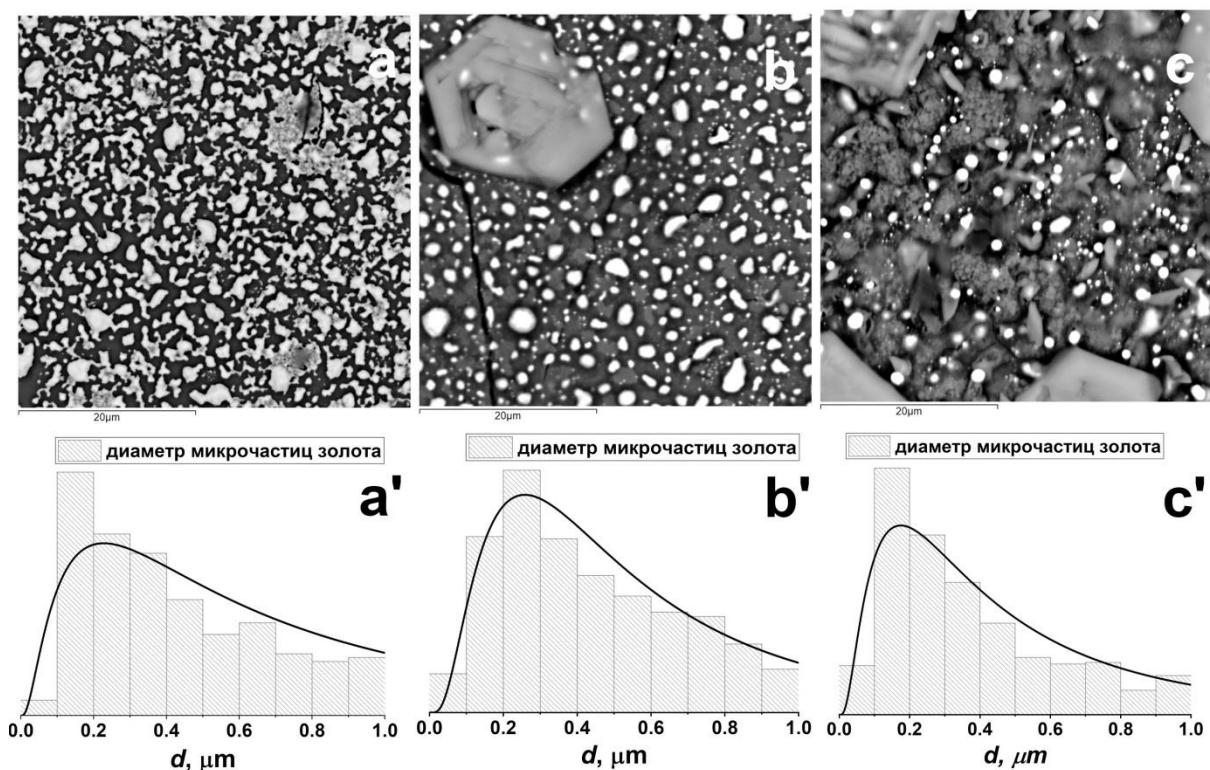
Результаты данного раздела отчета опубликованы в статьях [13], [14], [15].

3 Роль наночастиц и их эволюции в образовании руд благородных металлов

3.1 Превращения с участием наночастиц Au на минеральных поверхностях как модель их поведения в процессах гидротермального рудообразования

Целью данного исследования являлось определение особенностей поведения НЧ Au в условиях образования сульфидного расплава (или при его отсутствии) в сульфидных системах. Выбранная для экспериментов температуре отжига 550 °С отвечает ситуации, когда поверхность монокристаллов арсенопирита неустойчива к образованию расплава, а поверхность халькопирита напротив, устойчива. Предварительно напыленный методом магнетронного распыления слой (толщиной ~30 нм) наночастиц золота покрывался таким же слоем наночастиц железа или железа и меди. Напыление наночастиц проводилось на установке ВУП-4 с магнетроном МАГ-2000С (ИГХ СО РАН) в условиях вакуума $5 \cdot 10^{-3}$ торр, в качестве рабочего газа использовался аргон. Размеры зерен использованных в опытах природных кристаллов FeAsS и CuFeS₂ составляли ~2 мм и ~0.5 мм, соответственно.

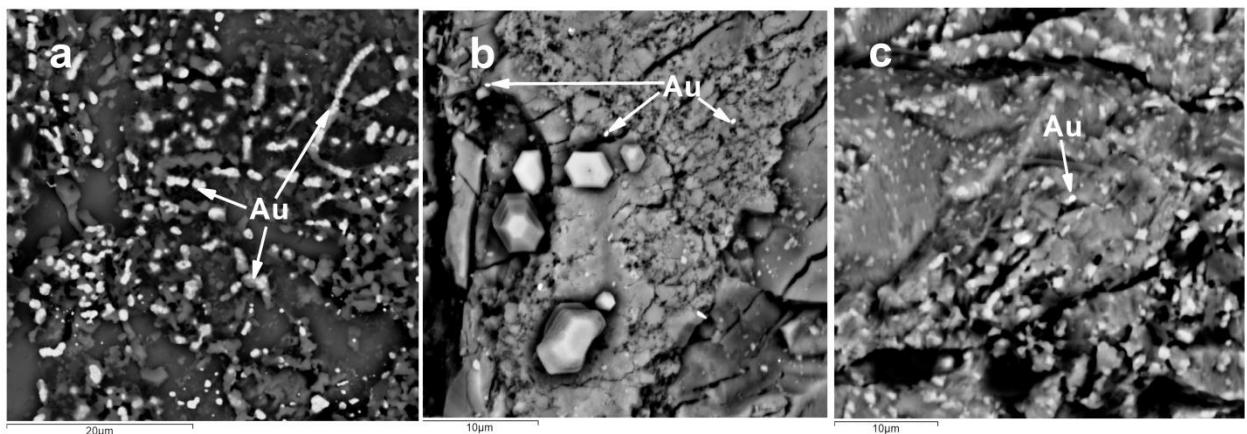
Полученные данные сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) представлены на Рисунках 9 и 10.



a – НЧ Au; b – НЧ Au + НЧ Fe; c – НЧ Au + НЧ Fe + НЧ Cu

a', b', c' – гистограммы распределения микрочастиц золота по размеру

Рисунок 9 – Данные СЭМ поверхности FeAsS с напыленными наночастицами после отжига в парах As и S



a – НЧ Au; b – НЧ Au + НЧ Fe; c – НЧ Au + НЧ Fe + НЧ Cu

Рисунок 10 – Данные СЭМ поверхности CuFeS₂ с напыленными наночастицами после отжига в парах S пленок

На Рисунках 9 и 10 видно, что поведение НЧ Au определяется состоянием поверхности кристаллов FeAsS и CuFeS₂, причем признаков плавления арсенопирита не наблюдается. За счет механизма самосборки НЧ Au они укрупняются и образуют микрочастицы. На монокристаллах арсенопирита микрочастицы золота имеют неправильную форму, а функция распределения частиц по размерам на Рисунке 8а' свидетельствует о том, что механизм роста НЧ Au соответствует механизму самосборки НЧ [16]. В отличие от этого, на монокристаллах халькопирита микрочастицы золота выстроены в цепочки частиц удлиненной формы, возможно, они в определенной степени декорируют границы зерен кристаллов халькопирита.

Морфология поверхности монокристаллов арсенопирита и халькопирита и содержания микрочастиц золота резко меняются, когда НЧ Au закрываются слоем НЧ железа или двойной пленкой Fe+Cu.

Пленка железа при окислении (сульфидации) провоцирует образование пирротина и делает поверхность арсенопирита неустойчивой к образованию (As, S)-расплава по реакции [17]:



Подвижность НЧ Au в данном расплаве оказывается достаточно высокой и приводит к образования сферических микрочастиц, которые росли по механизму самосборки (Рисунок 9).

Исходные НЧ Au, закрытые слоем Fe или Fe+Cu на поверхности халькопирита, оказываются "зажатыми" и их подвижность сильно ограничена поверхностными сульфидными фазами, в основном пирротином и борнитом. Поэтому на поверхности халькопирита наблюдаются отдельные микрочастицы золота (Рисунок 10). Основная часть

НЧ Au золота находится под слоем поверхностных сульфидных фаз, т.е. как бы "захоранивается" или "улавливается" поверхностью монокристаллов халькопирита.

Результаты данного исследования могут быть полезны при рассмотрении процесса одновременного осаждения НЧ Au, НЧ Fe и/или НЧ Cu из вторичных (более поздних) гидротермальных растворов на поверхность сульфидных минералов при формировании орогенных золоторудных месторождений, а также для более глубокого понимания процессов формирования "невидимого" золота при метаморфизме сульфидных пород.

Таким образом, показана принципиальная разница в поведении НЧ Au на арсенопирите и халькопирите при термообработке при 550 °С и давлении насыщенных паров серы и мышьяка. Показано, что защитные слои Fe/(Fe+Cu) кардинально меняют морфологию и подвижность НЧ Au. Результаты важны для понимания процессов осаждения НЧ Au, Fe, Cu из гидротермальных растворов при формировании орогенных золоторудных месторождений, механизмов образования «невидимого» золота при метаморфизме сульфидсодержащих руд и пород.

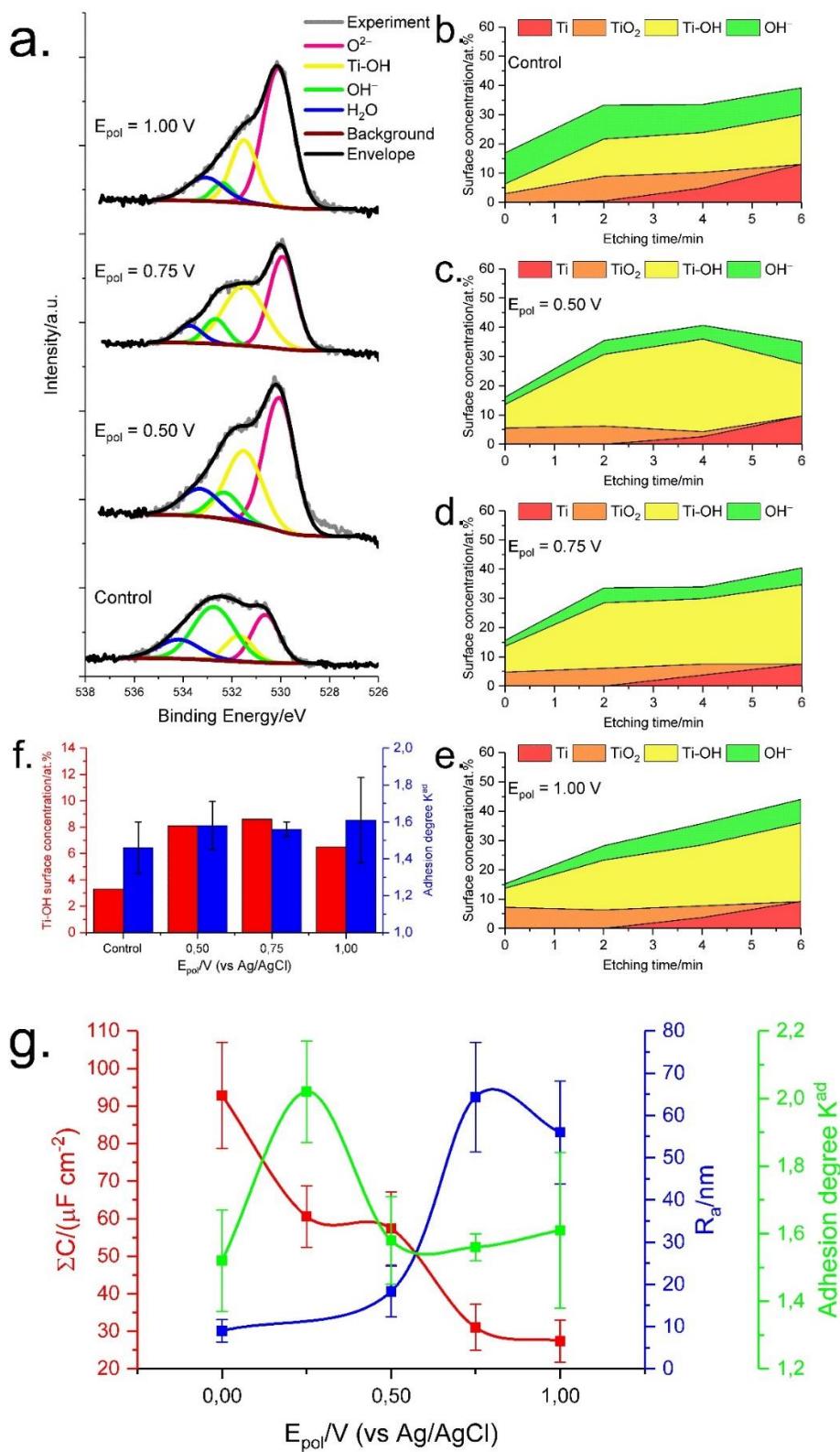
Результаты изложены в статье, направленной для публикации в журнал ACS Earth and Space Chemistry. Q2, IF=2.9.

4 Физико-химическое моделирование в решении технологических и экологических проблем

4.1 Электрохимическая поляризация как инструмент воздействия на поверхность и свойства титановых имплантатов для остеосинтеза

Биоинертные титановые металлические имплантаты и имплантаты на основе его сплавов широко востребованы в регенеративной медицине. Модификация поверхности таких имплантатов может улучшить их эксплуатационные характеристики. Особенно интересной и актуальной стратегией в этом случае является изменение поверхностных свойств имплантата для более быстрой активизации процессов восстановления костной ткани. В этом исследовании мы провели электрохимическую модификацию образцов коммерчески чистого титана путем анодной поляризации в 0.1 М фосфатном буферном растворе (рН 7.4) в области потенциалов от 0.00 В до 1.00 В. Процесс пассивации поверхности титана был детально рассмотрен с помощью электрохимических методов анализа. Данные СЭМ и АСМ показали, что увеличение потенциала поляризации способствует увеличению как толщины, так и шероховатости оксидной пленки. Последний фактор негативно влияет на жизнедеятельность фибробластов крыс, уменьшая их адгезию на поверхности модифицированных титановых образцов и снижая пролиферативную активность. В работе использовалась биостанция Biostation CT (Nikon, Япония). Обработку изображений с биостанции для определения степени адгезии проводили с помощью ПО Gwyddion. Анализ распределения фибробластов на поверхности титановых образцов проводили в программе ImageJ. Наиболее благоприятные условия для жизнедеятельности фибробластов крысы возникают на поверхности образца, полученной в результате анодной поляризации титана в области потенциалов 0.00 – 0.50 В в течение 1 часа. Основным фактором, влияющим на состояние клеток в этом случае, вероятно, является шероховатость оксидной пленки, которая резко возрастает при потенциалах поляризации 0,75 В и выше.

Состав поверхности имплантатов детально изучался различными методами, включая РФЭС (Рисунок 11).



а – спектры РФЭС О 1s при различных потенциалах поляризации,
 б, в, г, д, е – диаграммы распределения на поверхности компонентов, при разном времени травления Ar+, ф – эффект поляризации на концентрацию OH^- , связанных с Ti, и степень адгезии фибробластов, г – зависимость от Е поляризации полной емкости оксидного слоя, степени адгезии и шероховатости поверхности

Рисунок 11 – Данные РФЭС и других методов по составу и свойствам поверхности имплантов при различных потенциалах поляризации

В результате рассмотренных исследований впервые показано, что модификаирование поверхности имплантатов возможно при использовании не только высоких, но и низких потенциалов поляризации. Результаты опубликованы в журнале с высоким рейтингом [18].

4.2 Принципы моделирования газогидратных систем

Выполнены расчеты термодинамических функций и сконструированы формуляры термодинамических свойств газогидратов метана и других углеводородов, а также инертных (Ar, Kr, Xe) и атмосферных газов (N₂, O₂, H₂S).

Ввиду ограниченного числа экспериментальных данных оценка термодинамических свойствах газогидратов возможна только с помощью аддитивных методов, учитывающих вклад составляющих вещества структур в численную величину физико-химического параметра.

Ранее было показано [19], что аддитивное определение приращения энергии Гиббса $g^\circ(T)$ с последующим ее дифференцированием для определения отсчетных величин энтропии и энергии Гиббса образования из простых веществ, а также зависимости теплоемкости от температуры, позволяет с достаточной достоверностью оценить термодинамические свойства неизученных веществ.

Принципы и техническая реализация методов оценки термодинамических свойств веществ с использованием аддитивности приращений энергии Гиббса подробно описаны в [19].

Задача оценки $g^\circ(T)$ газогидратов сводится к суммированию приращений энергии Гиббса льда и газов, а также к определению избыточной функции «внедрения» молекул газов в кристаллическую решетку льда.

В соответствии с принятыми условными обозначениями и описанным выше видом термодинамических функций на примере газогидрата метана в общем виде на интервале температур от отсчетной до произвольной можно записать:

$$g^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; T_c \dots T) = g^\circ(\text{CH}_4; \text{г}; T_c \dots T) + 6 \cdot g^\circ(\text{H}_2\text{O}; \text{тв}; T_c \dots T) + \Delta g^\circ(\text{CH}_4 + 6 \cdot \text{H}_2\text{O}; T_c \dots T). \quad (3)$$

где $g^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; T_c \dots T)$ – приращение энергии Гиббса газогидрата метана;

$g^\circ(\text{CH}_4; \text{г}; T_c \dots T)$ – приращение энергии Гиббса газообразного метана;

$g^\circ(\text{H}_2\text{O}; \text{тв}; T_c \dots T)$ – приращение энергии Гиббса льда;

$\Delta g^\circ(\text{CH}_4 + 6 \cdot \text{H}_2\text{O}; T_c \dots T)$ – избыточная функция «внедрения» молекул метана в кристаллическую решетку льда. Здесь T_c – температура, принятая за стандартную.

Аналогичные выражения могут быть записаны для любого газогидрата. Избыточная функция может быть определена только на основании результатов экспериментальных исследований термодинамических свойств газогидратов. Однако в доступных экспериментальных работах [20], [21] представлены результаты низкотемпературной калориметрии некоторых газогидратов, приводятся величины теплоемкости в определенном интервале температур, а также энталпия диссоциации на лед и газ. На основании этих данных с помощью выражения (3) невозможно рассчитать экспериментально обоснованную функцию приращения энергии Гиббса газогидратов, что не позволяет в явном виде определить и проанализировать избыточную функцию.

Тем не менее, по выражениям вида (3) может быть рассчитано приращение энергии Гиббса газогидратов без учета избыточной функции сложением приращений энергии Гиббса льда и газа. Дифференцирование полученного результата дает возможность получить отсчетные величины энтропии, энергии Гиббса образования из простых веществ, а также коэффициенты уравнения теплоемкости в интервале температур, на котором определена функция приращения энергии Гиббса [19]. Таким образом может быть получен набор данных, необходимых для конструирования формуляра термодинамических свойств газогидрата.

С помощью сопоставления экспериментальных и расчетных величин теплоемкости может быть получена и проанализирована избыточная функция теплоемкости, на основании анализа которой может быть сделан вывод о достоверности оценочных термодинамических свойств.

Для достоверной оценки термодинамических свойств газогидратов необходимо, чтобы первые два слагаемых в выражениях вида (3) были определены с максимально возможной точностью.

С использованием сконструированных формуляров термодинамических свойств льда и газообразного метана рассчитаны функции:

$$g^\circ(\text{H}_2\text{O}; \text{тв}; 85\dots298,15 \text{ K});$$

$$g^\circ(\text{CH}_4; \text{газ}; 85\dots298,15 \text{ K}).$$

После исключения из (3) слагаемого избыточной функции по выражению

$$\begin{aligned} g^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 85\dots298,15 \text{ K}) &= \\ &= g^\circ(\text{CH}_4; \text{газ}; 85\dots298,15 \text{ K}) + 6 \cdot g^\circ(\text{H}_2\text{O}; \text{тв}; 85\dots298,15 \text{ K}) \end{aligned} \tag{4}$$

рассчитано приращение энергии Гиббса газогидрата $\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

В результате дифференцирования рассчитанных по (4) величин методами, описанными в [19], получены отсчетные величины энергии Гиббса образования из простых

веществ и энтропии:

$$\Delta_f G^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 298,15 \text{ K}) = -1\,469\,794 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1};$$

$$S^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 298,15 \text{ K}) = 454,965 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{моль}^{-1},$$

а также коэффициенты уравнения теплоемкости, представленные в табл. 8. Тождество величины $\Delta_f G^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 298,15 \text{ K})$ и $g^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 298,15 \text{ K})$ говорит о корректности дифференцирования (строгом соблюдении граничных условий дифференцирования) и, следовательно, о корректности полученных величин стандартной энтропии и коэффициентов уравнения теплоемкости.

Таблица 5 – Полученные дифференцированием функции $g^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 85...298,15 \text{ K})$ коэффициенты уравнения теплоемкости И.К. Карпова

Коэффициенты ур-ния теплоемкости, Дж·К ⁻¹ ·моль ⁻¹	Интервал аппроксимации 85...298,15 К
a	-25,50303848
$b \cdot 10^3$	1093,074045
$c \cdot 10^{-5}$	13,44690153
$d \cdot 10^6$	-337,2948891
$e \cdot 10^{-7}$	-8,626503413
R^2	0,331466
Δs	0,99999(9)

На основании отсчетных величин энергии Гиббса образования из простых веществ и энтропии по (15) рассчитана энтальпия образования из простых веществ:

$$\Delta_f H^\circ(\text{CH}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}; 298,15 \text{ K}) = -1\,831\,054 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1}.$$

Сравнение экспериментальных величин теплоемкости [20] с оценочными данными показывает, что точность экспериментальных измерений теплоемкости ($\pm 2\%$) и аддитивной оценки термодинамических функций газогидрата метана сопоставимы.

Полученные результаты важны для разработки методов прогнозирования форм существования вещества в экстремальных условиях низких температур, включая как глубоководные условия дна океанов и морей (а также оз. Байкал), так и космические объекты (газовые планеты-гиганты Солнечной системы и их спутники, ядра комет, газовые туманности). Полученные материалы готовятся к публикации.

4.3 Глубинные углеводородные газы осадков озера Байкал по данным физико-химического моделирования

Одним из объектов, вызывающих постоянный интерес и дискуссии, является газ метан, обнаруженный в осадках и водах озера Байкал. Источник, условия миграции и свойства газов на разных глубинах осадочных профилей, определяющих РТ-параметры, до сих пор имеют разные интерпретации.

Физико-химическое моделирование с использование программного комплекса «Селектор» позволяет смоделировать условия устойчивость метана в осадках. Исследование систем флюид и флюид-порода позволило проследить за изменениями в составе газа при разных глубинах осадков. Для расчета минерального состава по данным химического анализа нами был разработан алгоритм, в котором используются классические кристаллохимические формулы слоистых силикатов [22]. С помощью модели твердых растворов [23] задачу расчета минерального состава можно решать без предварительного определения стехиометрии глинистых минералов, основываясь на знании общего химического состава донных отложений. Результаты моделирования системы флюид-осадки для условий оз. Байкал показаны в Таблице 6.

Таблица 6 – Смоделированный состав газовой фазы системы флюид-осадки, мас. %

Глубина, км	T, °C	P, бар	C ₂ H ₆	CH ₄	H ₂	H ₂ O	CO ₂
0	-1	1	0,0000	92,2552	0,0009	0,0000	7,7439
0,8	9	200	0,0000	92,2585	0,0001	0,0000	7,7414
1,7	36	400	0,0003	92,2581	0,0002	0,0000	7,7414
2,6	56	600	0,0005	92,2575	0,0004	0,0000	7,7416
3,5	76	800	0,0010	92,2565	0,0007	0,0000	7,7418
4,3	94	1000	0,0017	92,2554	0,0012	0,0000	7,7417
5,1	115	1500	0,0034	92,2531	0,0019	0,0000	7,7417
6	130	2000	0,0034	67,0752	0,0021	32,9193	0,0000
7,5	145	2500	0,0054	69,1925	0,0029	30,7992	0,0000
9	160	3000	0,0076	68,6159	0,0038	31,3727	0,0000
12	180	4000	0,0131	71,0467	0,0050	28,9351	0,0000

К основным газам, установленным в чисто газовой системе (метан, этан), добавляется углекислый газ CO₂, водород H₂, а с глубины 6 км наблюдаются значимые фазовые изменения в системе и появление H₂O. Полученные результаты согласуются с данными, исследования байкальских кернов в проекте «Байкал Бурение». В газах, выделяющихся со дна Байкала, присутствуют воздушные компоненты и метан.

Результаты моделирования показывают, что мантийный углеводородный флюид может участвовать в формировании газов с на основе метана, наблюдаемых на поверхности. Отличие в соотношении фаз теоретического флюида и флюида из осадков обусловлено наличием поровой воды и водосодержащих минералов (слюд, смешанослойных алюмосиликатов) в осадочных отложениях. Происходит перераспределение исходного соотношения С:Н в системе и расчет показывает образование углекислого газа и водорода. При давлении 2000 бар и выше образуется газовая фаза H_2O . Вероятно, это связано с процессами катагенеза в осадках иструктурной перестройкой слоистых силикатов, из которых удаляются OH^- – группы.

4.4 Моделирование природных и техногенных алюмосиликатных ресурсов промышленного региона (на примере глиноземного производства)

Выполнены исследования по применению в качестве технологических добавок (дополнительных компонентов) в опытные нефелиновые шихты техногенного (золошлаков) и вторичного (каолинитов) вида сырья.

Был сделан выбор в пользу золошлаковых отходов (ЗШО) Ново-Иркутской ТЭЦ, зольная часть которого обладает примерно равным Al-модулем с качественной нефелиновой рудой, перерабатываемой Ачинским глиноземным комбинатом (АГК), при несколько повышенным Si-модуле и содержании железа. В ближайшие годы АГК предстоит в связи выработкой качественных запасов переходить на обедненную руду. Физико-химическая модель показала при добавках ЗШО вероятность незначительного повышения степени извлечения глинозема при нормативном качестве нефелиновой руды и стабилизации Al-модуля шихты на работе со значительными резервами рудного поля - при снижении содержания в них Al_2O_3 с 26,5% (норматив) до 23–25%. Нежелательными вновь синтезированными фазами в модельном спеке, связанными с привносом в шихту примесей ЗШО, и снижающими извлечение полезных компонентов, могут быть вторичные минералы – муллит, кварц, плагиоклазы, пироксены, оксиды железа (Рисунок 12).

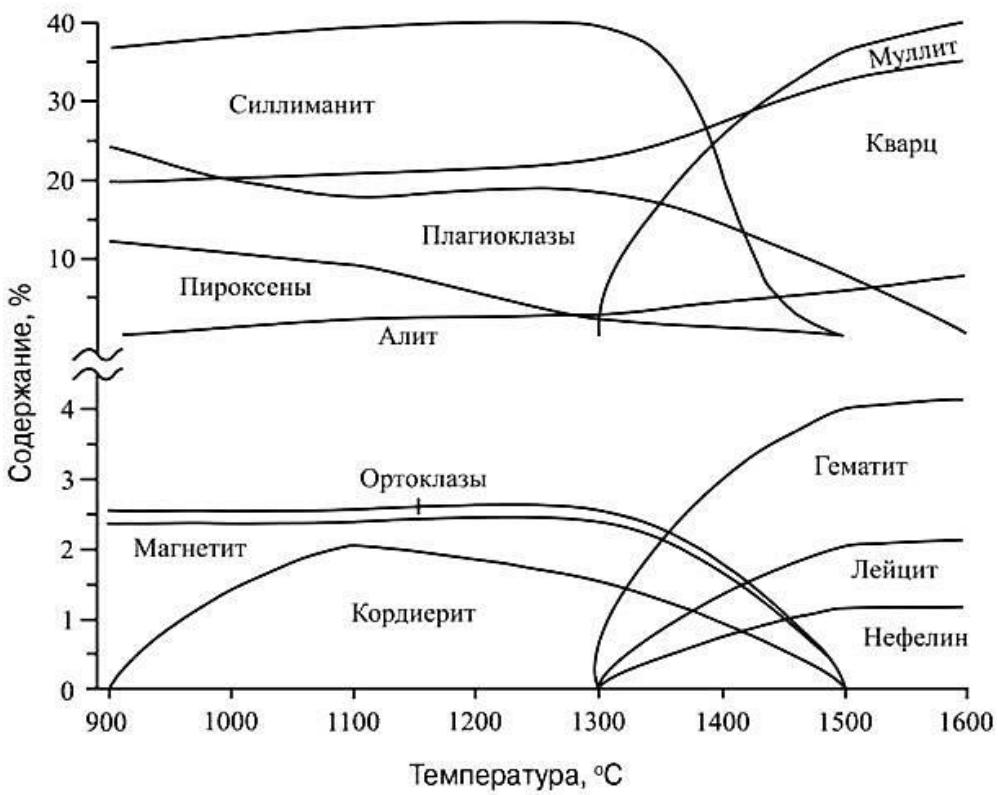


Рисунок 12 – Компьютерная модель формирования равновесного состава золо-шлаковых отходов в зависимости от температуры сжигания топлива (коэффициент избытка воздуха $\alpha = 1.4$) [24]

Лабораторные и промышленные исследования проводились в диапазоне добавок ЗШО нефелиновую шихту до 10%. Установлено, что при добавках в шихту 3% ЗШО степень извлечения глинозема повышается на 0,3%, а с добавкой 10% ЗШО этот показатель снижается на 0,3-0,4% (требуется повысить расход известняка и работать при повышенной циркуляции щелочи). Тем не менее, приняв за приемлемый норматив добавки в нефелиновую шихту ЗШО = 3%, регион и предприятие получает за счет снижения платы за размещение золошлакового отхода и экономии нефелиновой руды при ее спекании с известняком эколого-экономический эффект 231,6 млн. руб/ год [24].

Предложен каолинитовый концентрат, полученный путем обогащения бокситоносной глины Компановского месторождения (Уярского района Красноярского края), обладающей низким содержанием железа и других примесей. При этом кремниевый модуль концентрата находится на уровне нефелиновой руды, а его алюминиевый модуль даже превышает Al-модуль нефелинов. Сделан модельный прогноз на улучшение технологических показателей глиноземного производства при переработке нефелинового сырья. Модельные расчеты и эксперименты показали, что состав спеков, наряду с контролируемыми фазами ($NaAlO_2$ и Ca_2SiO_4), определяется наличием примесных фаз (метасиликатов, шпинелидов, оксидов и др.), которые могут снижать степень извлечения

глинозема и других компонентов. Их суммарное содержание в спеках должно быть ограничено в пределах 11-14% (сырьевых примесей - 15-20 мас.% на условно сухую шихту). На соответствующую величину следует корректировать минеральные добавки конкретного вида сырьевого и технологического компонента. На основании отклонения расчетного содержания фаз от результатов промышленного контроля (по данным статистического анализа) могут вноситься технологические коррективы в процесс подготовки и спекания опытных шихт. Таким образом, корректировка технологических параметров с помощью компьютерного прогнозирования (физико-химических моделей) позволяет эффективно утилизировать в процесс спекания ценные составляющие, снизив тем самым расход сырья, модульных добавок и топлива (по данным, подтверждаемым промышленными испытаниями, на 3-4%).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Ниже приводятся основные результаты, полученные в ходе выполнения проекта на этапах 2021-2025 гг.

Этап 2021 г. 1 – По результатам экспериментов при 450 °С и 1 кбар в растворах на основе хлорида аммония установлено влияние фугитивности серы (fS_2) на коэффициенты распределения и сокристаллизации основных металлических изоморфных примесей в сфалерите. Увеличение $D_{\text{Me}/\text{Zn}}$ с падением fS_2 отмечается для Fe и Co и, в небольшой степени, для Mn. Последний становится при низкой fS_2 совместимым в сфалерите, что позволяет объяснить образование в различных природных сульфидных проявлениях высокомарганцовистых сфалеритов и вюрцитов. Содержания Pd составили 330-460 ppm при железистости сфалерита от 0.05 до 2.55 мас. % Fe. Коэффициент сокристаллизации $D_{\text{Pd}/\text{Zn}} = 80 \pm 30$ для изученных условий относительно высокой летучести серы ($\sim 10^{-2}$ бар) показывает, что Pd, возможно, является высоко когерентным элементом в сфалерите.

2 – Установлено, что наполнение полостей клатрасилов определенными ион-радикалами может быть задано условиями отжига кристаллов. На примере S-содалита показано, что буферирование активностей S_2 и SO_2 в области низких значений и условия последующего отжига обеспечивают тонкую настройку анион-радикального состава. На этом принципе может быть основано создание образцов сравнения для изучения полисульфидных ион-радикальных форм серы спектроскопическими методами.

3 – На примере неотипного образца высокосернистого лазурита из Прибайкалья, с помощью комплекса современных методов впервые показано, что роль видеообразующего компонента в минерале может принадлежать ион-радикалу. В лазурите это трисульфидный анион-радикал, являющийся синим хромофором [25]. Идеализированная формула высокосернистого лазурита $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)^{2-}\text{S}_3^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ утверждена Комиссией MMA 2 марта 2021 г.

4 – На примере природного образца чистого кварцита (так называемого суперкварцита), прошедшего механоактивацию и последующую термическую или гидротермальную обработку, показано образование высоко дефектного слоя с хаотическим или упорядоченным расположением дислокаций. Их плотность ($0.5-12.4 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$) определяет химическую активность слоя. Для пирита более характерно насыщение дефектами объема частиц, что приводит к понижению температуры его разложения и превращения в пирротин. Полученные результаты перспективны для практического применения в технологических цепочках получения высокочистых кварцевых концентратов, а также оценке эффективности традиционных и разработке новых методов

обогащения и извлечения наноразмерных форм благородных металлов из упорных руд и концентратов на основе свойств наноструктурированной синтетической породы (СП).

5 – Получены новые данные о структурно-неупорядоченных наночастицах Pd_xP на углеродистом носителе (сибунит), позволившие предложить эту систему в качестве эффективного катализатора при производстве пероксида водорода антрахиноновым методом. По выходу H_2O_2 (96%) новый катализатор превосходит известные ранее композиции Pd/C , Pd/Al_2O_3 .

6 – Впервые детально изучен состава микровключений и примесей в сульфидных минералах крупного золоторудного месторождения Наталкинское (Северо-Восток России). Установлено, что сульфиды из вкрапленных и прожилково-вкрапленных руд раннего метаморфогенного этапа минерализации содержат включения, в основном, нерудных минералов и практически не имеют примесей. Для сульфидов прожилково-жильных и жильных руд более поздних продуктивных стадий гидротермального этапа характерно большое количество включений и примесей. Показано, что качественный и количественный состав микровключений и примесей в сульфидных минералах золоторудного месторождения Наталкинское тесно связан с последовательностью и условиями формирования рудной минерализации и может служить эффективным критерием оценки ее продуктивности.

7 – Термодинамическое моделирование условий формирования золоторудной минерализации на месторождении Сухой Лог (Вост. Сибирь) с помощью ПК Селектор-С показало, что на стадии прогрессивного метаморфизма, при $P \sim 3$ кбар и $T > 360$ °C, Au в самородной форме рассеяно во вмещающих породах. При раскрытии системы, связанном с тектоническим срывом и снижением давления и температуры, образуется флюид с содержанием рудных элементов, соответствующих наблюдаемым в газово-жидких включениях в минералах сульфидно-кварцевых прожилков. С образованием зон трещиноватости температура и давление снижаются до 210 °C и 0.5 кбар, и Au переходит в самородное состояние, отлагаясь совместно с кварцем, кальцитом, доломитом, сульфидами (пиритом, галенитом, аргентитом и др.). Образование рудообразующего флюида, равновесного с вмещающими сланцами, подтверждает концепцию формирования месторождения за счет ресурса вмещающих черносланцевых толщ, без участия глубинных источников золота. При взаимодействии гидротермального раствора с минерализованными сланцами содержание золота во флюиде составляет от 1.25×10^{-7} (флюид/порода = 1/10, 360 °C, 1500 бар) до 3.26×10^{-7} (1/5, 360 °C, 3000 бар) моль/ кг H_2O .

8 – Методом регрессионного анализа с учетом погрешности исходных данных (весов) впервые рассчитаны термодинамические свойства щелочных орто- и дигерманатов,

не изученных экспериментально. Эти величины могут быть использованы в физико-химических моделях расплавов, как аналогов магматических силикатных расплавов. Предложенный способ расчета позволяет с удовлетворительной точностью определять термодинамические свойства германатов и может быть использован для расчета свойств щелочных силикатов, боратов и сульфатов. Отклонения расчетного значения энталпии образования германатов от интервала литературных данных не более 5%, в среднем 2.2%, расчетные величины энтропии в большинстве случаев находятся в пределах погрешности литературных данных.

9 – Показано, что сочетание методов геоинформационных систем и ФХМ позволяет определить формы миграции и накопления наиболее опасных веществ, оценить динамику изменения состояния окружающей среды и открывает новые возможности геоэкологического мониторинга. Определены ассоциации элементов-идентификаторов главных источников загрязнения окружающей среды в Иркутско-Шелеховском промышленном районе. Для отдельных элементов (F, Be, Al) наблюдаются аномальные содержания в зонах исследования, формы их существования различны в зависимости от источника. Физико-химическое моделирование показало, что Ni, Cu, Mn и Cr накапливаются в трудно растворимых формах, а формы F, Cd, Sr и Pb, независимо от источника загрязнения, хорошо растворимы в воде и выносятся из почв. Установлено, что уровень содержания F, Al, Be, Na и As, присутствующих в водных растворах и минеральных фазах, не представляет серьезной экологической проблемы для территорий, более чем на 6 км удаленных от Иркутского алюминиевого завода. Загрязнение окружающей среды таким токсичными элементами как F и Be носит локальный характер.

10 – В результате моделирования на ПК Селектор экогеохимической обстановки вблизи ГОКа, перерабатывающего цинковую руду месторождения Шаабет-Эль-Хамра (Алжир), представлен прогноз потенциального перехода основных поллютантов в водорастворимые формы, который позволяет сделать вывод, что на исследуемой территории следует опасаться в первую очередь загрязнения природных вод кадмием и, возможно, свинцом, т.к. цинк и железо осаждаются в виде малорастворимых вторичных минералов, и это препятствует их накоплению в водах.

11 – В плане установления факторов, контролирующих единообразие минералогических типов нефритов различного генезиса (состав гидротермального раствора и Р–Т условия процесса), подготовлены исходные данные для двух физико-химических моделей образования нефрита – апокарбонатного и апогипербазитового. Определены вероятные минеральные парагенезисы в метасоматических зональностях и особенности компонентного состава гидротермальных растворов для этих типов месторождений,

разработана рабочая блок-схема процесса и по ней подготовлена многорезервуарная физико-химическая модель.

Этап 2022 г. 1 – Определены двойственные коэффициенты распределения ($D^{стР}$ и $D^{пов}$) для структурных и поверхностно связанных микроэлементов (Ag, Cd, Mn, Pd) в минеральной ассоциации пирит (Py) - пирротин (Po), полученной в гидротермальных условиях при температуре 400 °С и давлении 1 кбар. Определена селективность S (отношение концентраций МЭ между поверхностной и структурной формой элемента) НФ, ответственных за накопление МЭ [26]. Практически важно, что поверхностная форма МЭ может быть источником Pd и других элементов платиновой группы. Эта форма более обильна, и микроэлементы из неё извлекаются легче, чем в случае структурной формы. Коэффициент распределения структурной формы может быть использован для оценки температуры образования данной ассоциации, поскольку его зависимость от Т выполняется и на уровне микроконцентраций Pd. Это может способствовать определению генетической природы пирита в ассоциации как первично-магматической или метаморфогенной (гидротермальной).

2 – Методом ростового гидротермального эксперимента с внутренним пробоотбором в растворах хлорида аммония при 450 °С и давлении 1 кбар с практически полным набором РЗЭ (кроме прометия), получены первые в мировой практике данные по коэффициентам распределения и сокристаллизации РЗЭ в системе “магнетит (гематит) – гидротермальный раствор”. Установлена тенденция повышения коэффициентов распределения и сокристаллизации для тяжелых РЗЭ, Eu минимумы во всех опытах для обоих коэффициентов и Ce максимум для гематита, что указывает на более окислительные условия, связанные с повышенным содержанием Ce IV в системе. Для магнетита легкие РЗЭ слабо когерентны, тогда как тяжелые можно считать высоко когерентными. Сопутствующие магнетиту и гематиту фазы детально изучены методами СЭМ-ЭДС и РСМА. Преобладающие в поле магнетита пластинчатые желтые кристаллы имеют оксихлоридный состав $[REE]ClO \cdot H_2O$ и содержат в основном элементы из I половины ряда РЗЭ (La, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb). Красные игольчатые кристаллы более присущи полю гематита и имеют оксигидроксидный состав $[Fe_{2/3}REE_{1/3}]OOH$, в котором преобладает Fe и представители средних и тяжелых РЗЭ (Sm, Eu, Gd, Tb, Ho, Yb, Lu). В практическом аспекте важно, что обогащение оксидов железа тяжелыми РЗЭ может быть просто следствием увеличения для них $D_{REE/Fe}$, а не привнесения HREE глубинным магматогенным флюидом. Образование достаточно устойчивых фаз РЗЭ может вызывать совмещение легких и тяжелых РЗЭ в пространстве единой гидротермальной системы [27].

3 – В рамках концепции синтетической породы (СП), имитирующей кварц-сульфидную минерализацию благородных металлов (БМ), изучено поведение наночастиц (НЧ) Au, Ag и Pt при отжиге $T=450$ °C и контролируемой активности серы в системе. В состав СП входили частицы суперкварцита (м. Бурал Сардык, Восточный Саян) размером менее 10 мкм, на поверхность которых наносились методом магнетронного напыления НЧ БМ, и дисперсные порошки элементных железа, меди и серы, взятых в пропорции состава халькопирита CuFeS_2 . НЧ БМ стремятся к укрупнению, уменьшая свою удельную поверхность и повышая термодинамическую устойчивость. При параметрах синтеза кварц-сульфидной керамики $T = 450$ °C и $\lg f\text{S}_2$ от -3 до -5 бар устойчивы субмикронные и микронные частицы золота и сульфиды серебра и платины (Ag_2S и PtS). Топохимический характер реакции сульфидизации металлических порошков меди и железа не позволяет "улавливать" НЧ БМ образующейся сульфидной фазой, поскольку для них не доступен фронт кристаллизации кристаллов халькопирита. При других механизмах образования сульфидных фаз, например, соосаждении НЧ сульфидов и БМ и дальнейшем росте, вхождение НЧ БМ в объем кристаллов в качестве "невидимых" форм вполне возможно.

4 – На примере разных по типу и генезису геолого-промышленных типов (ГПТ) золоторудных месторождений Северо-Востока России проведено изучение и сравнительное описание типоморфных особенностей самородного золота. Установлено, что типоморфные признаки самородного золота для каждого из рассмотренных ГПТ стабильны и не зависят от возраста и масштабов оруденения. Проведено детальное изучение особенностей распределения и форм нахождения (ФН) Au в рудах и минералах золоторудного месторождения-гиганта Наталкинское, относящегося к золото-мышьяковисто-сульфидному ГПТ в черносланцевых толщах. Изучены уровни концентрирования и ФН «невидимого» Au в главных сульфидных минералах – арсенопирите и пирите. Большая часть данных приводится впервые. Кроме тонкодисперсных и субмикронных частиц золота (Au^0), в арсенопирите и пирите установлены две неминеральные ФН «невидимого» Au – структурная и поверхностно-связанная. Первая соответствует химически связанному элементу в структуре минерала, вторая, преобладающая, входит в состав ПНФ, существующих в тонком поверхностном слое кристалла (~100–500 нм). В практическом отношении важно, что часть Au, находящегося в сульфидах в виде тонкодисперсных и субмикронных частиц, а также поверхностно-связанного в ПНФ, можно извлечь при доработке уже имеющихся схем обогащения, что повышает ценность добываемого сырья и значительно увеличивает перспективы месторождения.

5 – В ряде образцов лазурита из месторождений Прибайкалья обнаружены нейтральные молекулы S_4 и S_6 ; последняя рассматривается как видообразующий компонент нового минерала – слюдянкита, ранее определенного как “триклиновый лазурит” [28]. В теоретическом плане впервые показано, что роль видообразующего компонента в минерале может принадлежать ион-радикалу или молекулярной (нейтральной) форме элемента. В практическом аспекте, это открывает пути для синтеза новых материалов с помощью природоподобных технологий и управления цветовой гаммой основанных на них пигментов. Получены значения энергии связи $S\ 2p_{3/2}\ 164.3\ \text{эВ}$ (S_4^0) и $162.2\ \text{эВ}$ ($S_2^{\cdot-}$), при значении для $\text{SO}_4^{2-}\ 168.7\ \text{эВ}$. Эти данные могут быть использованы при диагностике форм серы методом РФЭС в различных объектах.

6 – Метод ФХМ использован при анализе форм нахождения элементов в сапропеле пресноводного озера Духовое (Вост. Прибайкалье). Впервые установлен факт образования марказита в стоматоцистах хризофитовых (золотистых) водорослей. На основе полученных данных и модерирования равновесий в системе с помощью программного комплекса Селектор-С показано, что стоматоцисты золотистых водорослей могут рассматриваться в качестве микрореакторов, в которых создаются благоприятные условия для образования сульфида железа.

7 – Проведена оценка экологического состояния почвы и растительности индустриального района г. Шелехов, подверженного воздействию со стороны алюминиевого производства и объектов тепловой энергетики. Количественная оценка уровня загрязненности почвы по нормализованному фактору обогащения говорит о существовании антропогенного вклада в загрязнение среды Cr, Ni, Zn, Pb и Sr. Это согласуется с показаниями других геохимических индикаторов, подтверждающими уровни загрязнения этими элементами вблизи Иркутского алюминиевого завода от умеренного до значительного.

8 – С использованием ФХМ выявлены отличительные и общие признаки формирования апокарбонатных и апогипербазитовых метасоматитов. По минеральному парагенезису апокарбонатный нефрит относится к низкотемпературной фации магнезиальных скарнов ($350\text{--}400\ ^\circ\text{C}$). Формируется следующая метасоматическая зональность: доломитовый мрамор – кальцитовый мрамор с нефритом – tremolитовый скарн – пироксен – амфибол – клиноцизитовый скарн – амфиболиты. Месторождения апогипербазитового нефрита имеют иную метасоматическую зональность: микроантигоритовый серпентинит – tremolитит – нефрит – tremolитит – кварц-диопсид-клиноцизитовый родингит – цоизит-амфиболовая порода. Температура меняется в интервале $300\text{--}450\ ^\circ\text{C}$, давление $2000\text{--}3000$ бар. Установлено, что единообразие

минералогических типов нефритов различного генезиса определяется составом гидротермального раствора и Р–Т условиями процесса.

Этап 2023 г. 1 – Исследования распределения и сокристализации элементов в гидротермальных рудных системах уникальны в мировой геохимической науке (численные значения констант распределения по большей части неизвестны). Выполнен обзор, обобщение и анализа экспериментальных данных по данной проблеме [29]. Для практики важна возможность оценки рудной нагрузки флюидов и разработки типохимических признаков для выявления источника оруденения и последовательности минералообразующих процессов.

2 – Изучение поведения НЧ Au в системе SiO_2 -(НЧ Au)-Cu-Fe-Se показало, что типоморфными признаками участия НЧ Au в процессах формирования золоторудных месторождений могут быть структурные особенности золотин (параметр решетки, плотность дефектов упаковки и нанодвойников, форма частиц и функция их распределения по размеру). Уменьшение параметра решетки и повышенная плотность ДУ и/или НД говорят в пользу активного участия НЧ Au, также как сферическая форма частиц и функция логнормального распределения частиц по размерам со смещенным максимумом в сторону меньших значений.

3 – Одной из причин появления НЧ является эволюция поверхностных НФ, сформировавшихся в результате особого механизма роста кристаллов минералов-носителей и концентраторов БМ, а именно, роста посредством НФ, когда несовместимые элементы накапливаются в субмикронном по толщине слое растущего кристалла [30]. Подтверждено существование высоких концентраций БМ на поверхности рудных пирита, арсенопирита и других минералов как на природных, так и на экспериментальных объектах. Данный эффект хорошо воспроизводится не только на отдельных хорошо ограненных монокристаллах, но и на разных размерных фракциях зерен пирита и арсенопирита. Размерные зависимости в той или иной степени проявляются для всех типов руд – жильного, прожилково-жильного, прожилково-вкрапленного. Поверхностно-связанная форма Au относится к разряду «невидимых» форм, но ее выделение не связано с такими значительными затратами, как в случае структурной формы, предполагающей полную деструкцию минерала. Это необходимо учитывать в технологии переработки руд, содержащих Au и другие БМ.

4 – Бораты щелочных и щелочноземельных металлов представляют интерес как инновационные материалы и как компоненты боросиликатных стёкол, перспективных в качестве сред для иммобилизации радиоактивных отходов. В геохимическом плане, боратные стекла и расплавы являются удобными модельными объектами для изучения

силикатных расплавов, моделирующих природные магматические системы. Возможности моделирования распределения структурных единиц таких расплавов с помощью программного комплекса Селектор продемонстрированы в работе [31]. Ограничением для таких разработок являются недостаточно надежные или отсутствующие термодинамические данные. Разработка корреляции структура–свойство, позволяющей выбрать оптимальные величины стандартных теплоемкости, энталпии и энтропии боратов щелочных металлов, для которых, по данным разных экспериментальных работ и справочных изданий, наблюдаются широкие пределы вариаций, позволила проводить оценку термодинамических функций неизученных боратов щелочных металлов с достаточной обоснованностью и достоверностью.

5 – Формы нахождения элементов в катализитических системах предопределяют их технологические параметры – активность и селективность. В синтезе пероксида водорода переход от антрахинонового метода к прямому синтезу, сущий снижение затрат, предполагает понимание механизма действия катализатора, в качестве которого предлагаются НЧ Pd-P. На данном этапе изучения нового катализатора выявлены основные причины промотирующего действия фосфора на свойства палладиевых нанокатализаторов системы Pd-P на цеолитном носителе Na-ZSM-5 в прямом синтезе пероксида водорода. Введение фосфора в состав катализатора влияет на дисперсность, электронное состояние палладия в поверхностном слое и поверхностную концентрацию фосфат- и фосфит-ионов. Повышению выхода H_2O_2 благоприятствует рост дисперсности Pd-P катализаторов, ингибирование побочного процесса разложения пероксида водорода поверхностными фосфат- и фосфит-ионами и уменьшение растворимости водорода в твердых растворах фосфора в палладии [32].

6 – С использованием компьютерного ФХМ разработаны модели газоочистки и регенерации, позволяющие прогнозировать оптимальные режимы и параметры технологических процессов. Техногенные отходы, содержащие трудно-разделяемые физическими и химическими методами компоненты (F, Al, Na, C), могут быть эффективно переработаны в сырьевой фторидно-глиноземный продукт. Для снижения экологического ущерба вследствие выделений летучих соединений фтора предложен способ, основанный на использовании карбоната лития, и позволяющий добиться эффективности очистки по HF 95%.

Этап 2024 г. 1 – Методом термоградиентного гидротермального синтеза с внутренним пробоотбором флюида получены первые численные оценки коэффициентов распределения и сокристаллизации элементов-примесей в пирите при 450 °С и давлении 1 кбар в растворах на основе хлорида аммония. По величине коэффициента распределения –

отношения концентраций пирит/раствор, Co, Ni и Cu высоко когерентны в пирите, Pt, Au и As – на границе совместимости, Mn и Zn сильно некогерентны, Pd – экстремально вариативен.

2 – При указанных в п.1 Т, Р – параметрах установлены формы нахождения Au и Ag в гидротермальном сфалерите – включения фаз $(\text{Ag}, \text{Au})_{1.8-2.1}\text{S}$ при относительно низких и $(\text{Ag}, \text{Au})\text{S}$ при более высоких $f\text{S}_2$, при широких вариациях в содержании Au – 0.01– 0.75 формульной единицы. Низкая растворимость БМ в маложелезистом сфалерите при 450 °C (3.8 ± 0.7 и ≤ 0.6 г/т Ag и Au соответственно) и низкие коэффициенты распределения и сокристаллизации не позволяют объяснить повышенные содержания элементов в определённых типах сфалеритовых руд. Однако опыты с Sn в качестве источника дефектов в кристаллах, моделирующих взаимодействия примесей с вакансиями, показали значительный рост этих коэффициентов (для Au на 3 порядка величины), зависящий как от “собственных” вакансий, связанных с условиями кристаллизации, так и вакансий, сопровождающих вхождение Sn^{4+} . Появлению “невидимых” форм Au и Ag в сфалерите способствуют пересыщенные магматические флюиды и соосаждающиеся с БМ другие элементы, такие как In, Ga, Ge и Sn, которые являются источниками дефектов структуры, компенсирующих избыток положительного заряда при замещении Zn^{2+} . Эволюция связанных с дефектами форм БМ при метаморфизме и ремобилизации рудного вещества впоследствии приводит к выделению Ag и Au, агрегирующихся в микрочастицы. Данный механизм поглощения БМ может иметь важное значение для понимания происхождения и оценки редкоэлементного потенциала рудных объектов.

3 – Вопросы происхождения и эволюции наночастиц минералов в различных обстановках остаются дискуссионными. Использование для получения безоболочечных НЧ магнетронного распыления мишени позволяет получать НЧ Au и других металлов размером 5-10 нм. Нанося их на синтетическую породу, можно отслеживать их перемещение в разных минеральных средах. Использование в качестве СП композита кварцит-пирит-графит с нанесенными на графит НЧ Au позволило установить, что в термоградиентных гидротермальных условиях НЧ переносятся флюидом в пределах СП без заметного растворения и агрегации или образования на них оболочек из кремнезема или углерода. НЧ укрупняются путем самосборки во всех трех минеральных средах, особенно эффективно накапливаются на поверхности пирита, за счет поглощения поверхностными фазами с образованием химической связи Au-S. Не вполне ясным остается вопрос о природе движущих сил, вызывающих перераспределение НЧ среди компонентов СП, их перенос с графита на пирит и кварцит [33].

4 – Установлено, что эрозия мишени аустенитной стали AISI 304, имеющей ряд уникальных физических характеристик, в процессе магнетронного распыления, приводит к образованию стационарной двухфазной системы аустенит-феррит. В дальнейшем распыление фактически двухфазной мишени приводит к образованию тонких пленок, состоящих из аустенита, феррита и интерметаллической σ -фазы. Механизм образования и стабилизации данной трехфазной системы и химический состав фаз связаны с действием фазового и изоморфного размерных эффектов, свойственных наночастицам [34]. Способ получения трехфазных нано-пленок представляет интерес для специалистов по синтезу тонких пленок с особыми магнитными свойствами.

5 – Среди потенциальных практических применений результатов проекта основным видится учет ФН целевых компонентов в практике поиска и разведки месторождений, оценки перспектив их извлечения и т.д. И если определение минеральных форм не представляет в большинстве случаев особых трудностей, то анализ селективности поглощения элементов поверхностными НФ достаточно сложен и трудоемок. Опыт использования комплекса СВАДМ–ИСП МС пока весьма ограничен и говорит о сложности проблемы. Вероятный выход – применение ЛА-ИСП-МС для анализа поверхностных слоев естественных граней кристалла и его внутренних областей [35].

Этап 2025 г. 1 – Первый опыт мета-анализа геохимических данных на примере пирита с использованием полученных при реализации проекта коэффициентов сокристаллизации ЭП позволил изменить представления о чувствительности индикаторных отношений ЭП и впервые обратить внимание на отношения, включающие Cu (Co/Cu , Ni/Cu), сильно различающиеся для орогенных и порфировых месторождений с одной стороны и эпимеральных и типа Карлин с другой. Высокие отношения As/Au в растворах ($n \cdot 10^2\text{--}10^4$) на всех месторождениях подтверждают роль As как элемента-«проводника» Au при образовании золоторудных месторождений-гигантов.

2 – С помощью оригинальной методики AAC – СВАДМ выявлены две формы нахождения “невидимого” Au в рудах и минералах (пирит, арсенопирит) золоторудного гиганта Наталкинское (Северо-Восток России) – равномерно распределенные структурная и поверхностная формы, соответствующие химически связанному элементу в структуре минерала и в структуре находящейся на поверхности кристалла наноразмерной НФ. Появление микроминеральных форм самородного золота в кристаллах и в составе их поверхности говорит в пользу предположения о частичной трансформации и направленной агрегации высвобождающегося Au с образованием его частиц от наноразмерных до субмикронных. Это делает возможным извлечение такого Au при обогащении руд, что значительно повышает качество и ценность добываемого сырья. Установлено, что

распределение содержаний Au на поверхности арсенопирита и уровни его концентрирования тесно связаны с условиями формирования месторождения. Наиболее высокие концентрации Au приурочены к поверхности кристаллов арсенопирита гидротермального этапа рудообразования, а минимальные – раннего метаморфогенного этапа. Неустойчивость профиля распределения золота и его содержаний даже в пределах поверхности одного кристалла особенно ярко проявлена в арсенопирите жильных и прожилково-жильных руд, что обусловлено нестабильностью физико-химических параметров процессов гидротермального рудообразования на более поздних стадиях формирования месторождения. В основном это процессы окисления, приводящие к изменению состава первичных (ростовых) НФ и перераспределению Au в поверхностном слое кристалла, содержащем высокозарядные формы мышьяка – As^{5+} и As^{3+} . Подтверждается сложный и длительный метаморфогенно-магматогенный генезис золоторудного месторождения-гиганта Наталкинское. Высокие концентрации «невидимого» золота в легко разрушаемом при обогащении поверхностном слое сульфидов представляют значительный практический интерес при извлечении золота из «упорных» руд.

3 – Показана принципиальная разница в поведении НЧ Au на арсенопирите и халькопирите при термообработке при 550 °С и давлении насыщенных паров серы и мышьяка. Показано, что защитные слои Fe/(Fe+Cu) кардинально меняют морфологию и подвижность НЧ Au. Результаты важны для понимания процессов осаждения НЧ Au, Fe, Cu из гидротермальных растворов при формировании орогенных золоторудных месторождений, механизмов образования «невидимого» золота при метаморфизме сульфидсодержащих руд и пород.

4 – Впервые показано, что модифицирование поверхности титановых имплантатов для остеосинтеза возможно при использовании не только высоких, но и низких потенциалов поляризации. Процесс пассивации поверхности титана был детально рассмотрен с помощью электрохимических методов анализа. Данные СЭМ и АСМ показали, что увеличение потенциала поляризации способствует увеличению как толщины, так и шероховатости оксидной пленки. Последний фактор негативно влияет на жизнедеятельность фибробластов крыс, уменьшая их адгезию на поверхности модифицированных титановых образцов и снижая пролиферативную активность. Наиболее благоприятные условия для жизнедеятельности фибробластов возникают на поверхности образца, полученной в результате анодной поляризации титана в области потенциалов 0.00 – 0.50 В в течение 1 часа. Основным фактором, влияющим на состояние клеток в этом

случае, вероятно, является шероховатость оксидной пленки, которая резко возрастает при потенциалах поляризации 0,75 В и выше [1].

5 – Выполнены расчеты термодинамических функций и сконструированы формуляры термодинамических свойств газогидратов метана и других углеводородов, а также инертных (Ar, Kr, Xe) и атмосферных газов (N₂, O₂, H₂S). Ввиду ограниченного числа экспериментальных данных оценка термодинамических свойствах газогидратов возможна только с помощью аддитивных методов, учитывающих вклад составляющих вещества структур в численную величину физико-химического параметра. Сравнение экспериментальных величин теплоемкости с оценочными данными показывает, что точность экспериментальных измерений теплоемкости ($\pm 2\%$) и аддитивной оценки термодинамических функций газогидрата метана сопоставимы. Полученные результаты важны для разработки методов прогнозирования форм существования вещества в экстремальных условиях низких температур, включая как глубоководные условия дна океанов и морей (а также оз. Байкал), так и космические объекты (газовые планеты-гиганты Солнечной системы и их спутники, ядра комет, газовые туманности).

6 – Методом ФХМ с использованием программного комплекса «Селектор» изучены условия устойчивость метана в осадках оз. Байкал. Исследование системы флюид-порода позволило проследить за изменениями в составе газа при разных глубинах осадков. Результаты моделирования показывают, что глубинный углеводородный флюид может участвовать в формировании газов с преобладанием метана, наблюдаемых на поверхности.

7 – С помощью ФХМ и технологических экспериментов установлена оптимальная добавка в шихту 3% золошлаковых отходов Ново-Иркутской ТЭЦ для повышения степени извлечения глинозема на Ачинском глиноземном комбинате. Приняв за приемлемый норматив добавки в нефелиновую шихту ЗШО = 3%, регион и предприятие получает за счет снижения платы за размещение золошлакового отхода и экономии нефелиновой руды при ее спекании с известняком эколого-экономический эффект 231,6 млн. руб/ год. Предложен каолинитовый концентрат, полученный путем обогащения бокситоносной глины Компановского месторождения (Уярского района Красноярского края), обладающей низким содержанием железа и других примесей. Сделан модельный прогноз на улучшение технологических показателей глиноземного производства при переработке нефелинового сырья. Показано, что корректировка технологических параметров с помощью компьютерного прогнозирования (физико-химических моделей) позволяет эффективно утилизировать в процесс спекания ценные составляющие, снизив тем самым расход сырья, модульных добавок и топлива (по данным, подтверждаемым промышленными испытаниями, на 3-4%).

За период работы над проектом по его тематике опубликовано 62 статьи в рецензируемых изданиях, включая 26 статей в журналах, относящихся к 1 и 2 квартилям по WoS/Scopus, сделано 25 докладов на совещаниях и конференциях различного уровня. В работе на разных этапах принимали участие 4 аспиранта. Защищена кандидатская диссертация (Просекин С.Н. Оценка техногенной нагрузки на урбанизированные территории Байкальского региона средствами геоинформационных систем и физико-химического моделирования // Дисс. канд. геол.-мин. наук. Иркутск, 2021. – 154 с.). Совместные исследования в рамках проекта проводились с сотрудниками следующих организаций: Иркутский гос. Университет, химический факультет, ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, Университет Бар-Илан (Израиль), Институт химии и химической технологии СО РАН, МГУ, геологический факультет, Институт минералогии УрО РАН, Институт геохимии и аналитической химии РАН, Институт кристаллографии РАН, Иркутский НЦ хирургии и травматологии, Лимнологический институт СО РАН, Институт земной коры СО РАН и др.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Amsheev D.Yu., Kashevskii A.V., Ponomarenko I.A., Safronov A.Yu., Akimov V.V., Tauson V.L., Belozerova O.Yu., Klimenkov I.V., Shurygina I.A., Dremina N.N., Trukhan I.S., Lozovskaya E.A., Zavyalova A.S., Nikiforov S.B. Morphology and biological characteristics of the electrochemically modified titanium surface // Bioelectrochemistry. – 2026. – V. 168. – Art. 109156.
- 2 Smagunov N., Tauson V., Lipko S., Babkin D., Pastushkova T., Belozerova O., Bryansky N. Partitioning and surficial segregation of trace elements in iron oxides in hydrothermal fluid systems // Minerals. – 2021. – V. 11. – No. 1. – art. 57.
- 3 Таусон В.Л., Липко С.В., Смагунов Н.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю. Коэффициенты распределения и сокристаллизации широкого круга типоморфных элементов в магнетите, гематите и сфалерите в гидротермальных системах. Геология и геофизика. – 2023. – Т. 64. – № 8. – С. 1171-1186.
- 4 Wen G., Li J.-W., Hofstra A.H., Harlov D.E., Zhao X.-F., Lowers H.A., Koenig A.E. (2024) Trace element fractionation in magnetite as a function of Fe depletion from ore fluids at the Baijian Fe-(Co) skarn deposit, eastern China: Implications for Co mineralization in Fe skarns. // Amer. Mineral. – 2024. – V. 109. – P. 1657-1669.
- 5 Shan P.-F., Cao M.-J., Evans N.J., Wang L., Li Y., Zhao Y.-S., Qin K.-Z. Trace element geochemistry of magnetite and hematite from the Jinchang porphyry Au-Cu deposit, northeast China: Implications for fluid evolution and cobalt enrichment // J. Asian Earth Sc. – 2025. – Art. 106914. DOI: 10.1016/j.jseaes.2025.106914.
- 6 Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой. – М.: ЛКИ, 2008. – 296 с.
- 7 Таусон В.Л., Кравцова Р.Г., Смагунов Н.В., Спиридов А.М., Гребенщикова В.И., Будяк А.Е. Структурное и поверхностно-связанное золото в пиритах месторождений разных генетических типов // Геология и геофизика. – 2014. – Т. 55. – № 2. – С. 350-369.
- 8 Tauson V.L., Lipko S.V., Smagunov N.V., Kravtsova R.G. Trace element partitioning dualism under mineral-fluid interaction: Origin and geochemical significance // Minerals. – 2018. – V. 8. – No. 7. – Art. 282.
- 9 Kravtsova R.G., Tauson V.L., Makshakov A.S., Bryansky N.V., Smagunov N.V. Platinum group elements in arsenopyrites and pyrites of the Natalkinskoe gold deposit (Northeastern Russia) // Minerals. – 2020. – V. 10. – No. 4. – Art. 318.

10 Babedi L., von der Heyden B.P., Tadie M., Mayne M. Trace elements in pyrite from five different gold ore deposit classes: a review and meta-analysis // Geol. Soc. London Spec. Pub. – 2022. – V. 516. – No. 1. – P. 47-83.

11 Yang H., Du B., Santosh M., Wang Z., Yan G., Qi X., Xu K., Li L., Deng J. Role of As in the formation of giant Au deposit: Insights from sulfur isotope and geochemistry of pyrite from the Shuangwang Au deposit, West Qinling, central China // Ore Geol. Rev. – 2024. – V. 175. – Art.106363.

12 Kusebauch C., Gleeson S.A., Oelze M. Coupled partitioning of Au and As into pyrite controls formation of giant Au deposits // Sci. Adv. – 2019. – V. 5. – eaav5891.

13 Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л., Белозерова О.Ю. Особенности распределения и формы нахождения тонкодисперсного и «невидимого» золота в арсенопиритах и пиритах месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) // Геол. руд. месторожд. – 2025. – Т. 67. – № 2. – С. 161-201.

14 Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л., Брянский Н.В., Липко С.В. «Невидимое» золото на природной поверхности арсенопирита золоторудного месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) по данным ЛА-ИСП-МС // Геология и геофизика. – 2025. – Т. 66. – № 10. – С. 1264-1278.

15 Павлюк Н.С., Макшаков А.С., Кравцова Р.Г. Золотосодержащее серебро и самородное золото Au-Ag месторождения Дукат (Северо-Восток России) // Науки о Земле и недропользование. – 2026. – Т. 48. – № 3 (в печати).

16 Акимов В.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю. Поведение наночастиц золота на межфазной границе кварц-селениды меди и железа при температуре 450 °C и разной активности селена // Геология и геофизика. – 2024. – Т. 65. – № 8. – С. 1060-1079.

17 Бартон П.Б. мл., Скиннер Б.Дж. Устойчивость сульфидных минералов // Геохимия гидротермальных рудных месторождений. – М.: Мир, 1982. – С. 238-327.

18 Amsheev D.Yu., Kashevskii A.V., Ponomarenko I.A., Safronov A.Yu., Akimov V.V., Tauson V.L., Belozerova O.Yu., Klimenkov I.V., Shurygina I.A., Dremina N.N., Trukhan I.S., Lozovskaya E.A., Zavyalova A.S., Nikiforov S.B. Morphology and biological characteristics of the electrochemically modified titanium surface // Bioelectrochemistry. – 2026. – V. 168. – Art. 109156.

19 Тупицын А.А., Мухетдинова А.В., Бычинский В.А. Подготовка термодинамических свойств индивидуальных веществ к физико-химическому моделированию высокотемпературных технологических процессов. – Иркутск: Изд-во Иркут. гос. ун-та, 2009. – 303 с.

20 Handa Y. P. Composition, enthalpies of dissociation, and heat capacities in the range 85 to 270 K for clathrate hydrates of methane, ethane, propane, and the enthalpy of dissociations of isobutene hydrate, as determined by a heat-flow calorimeter // J. Chem. Thermodyn. – 1986. – V. 18. – P. 915–921.

21 Handa Y. P. Calorimetric determination of the compositions, enthalpies of dissociation, and heat capacities in the range 85 to 270 K for clathrate hydrates of xenon and krypton Handa // J. Chem. Thermodyn. – 1986. – Vol. 18. – P. 891–902.

22 Ощепкова А. В., Бычинский В. А., Чудненко К. В., Сасим С. А. Методы определения минерального состава донных осадков оз. Байкал и расчета их термодинамических параметров как критерия палеоклиматических изменений // Известия Иркутского гос. Университета. Серия «Науки о Земле». – 2019. – Т. 28. – С. 76–88.

23 Чудненко К. В. Термодинамическое моделирование в геохимии: теория, алгоритмы, программное обеспечение, приложения // Новосибирск: Изд-во «Гео». 2010. – 287 с.

24 Шепелев И.И., Пиляева О.В., Головных Н.В., Пригарин В.А. Использование отходов теплоэлектростанций в качестве сырьевой добавки в процессе получения глинозема из нефелиновых руд // Экология и промышленность России. – 2025. – Т.29. – № 6. – С. 16–21.

25 Sapozhnikov A.N., Tauson V.L., Lipko S.V., Shendrik R.Yu., Levitskii V.I., Suvorova L.F., Chukanov N.V., Vigasina M.F. On the crystal chemistry of sulfur-rich lazurite, ideally $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)(\text{S}_3)^-\cdot n\text{H}_2\text{O}$ // Amer. Mineral. – 2021. – V. 106. – P. 226–234.

26 Lipko S., Tauson V., Smagunov N., Babkin D., Parkhomenko I. Distribution of trace elements (Ag, Pd, Cd, and Mn) between pyrite and pyrrhotite and selectivity of surficial nonautonomous phases in a hydrothermal system // Minerals. – 2022. – V. 12. – Art. 1165.

27 Смагунов Н.В., Липко С.В., Таусон В.Л., Белозерова О.Ю., Бабкин Д.Н. Распределение и формы нахождения лантаноидов в системе магнетит (гематит) – гидротермальный раствор при 450 °C и давлении 100 МПа // Геохимия. – 2023. – Т. 68. – № 9. – С. 938-946.

28 Sapozhnikov A.N., Bolotina N.B., Chukanov N.V., Shendrik R.Yu., Kaneva E.V., Vigasina M.F., Ivanova L.A., Tauson V.L., Lipko S.V. Slyudyankaite, $\text{Na}_{28}\text{Ca}_4(\text{Si}_{24}\text{Al}_{24}\text{O}_{96})(\text{SO}_4)_6(\text{S}_6)_{1/3}(\text{CO}_2)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, a new sodalite – group mineral from the Malo-Bystrinskoe lazurite deposit, Baikal Lake area, Russia // Amer. Mineral. – 2023. – V. 108. – No. 9. – P. 1805-1817.

29 Таусон В.Л., Липко С.В., Смагунов Н.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю. Коэффициенты распределения и сокристаллизации широкого круга типоморфных

элементов в магнетите, гематите и сфалерите в гидротермальных системах // Геология и геофизика. – 2023. – Т. 64. – № 8. – С. 1171-1186.

30 Таусон В.Л., Липко С.В., Арсентьев К.Ю., Смагунов Н.В. Рост кристалла посредством неавтономной фазы: следствия для распределения элементов в рудных системах // Кристаллография. – 2019. – Т. 64. – № 3. – С. 465-476.

31 Королева О.Н. Физико-химическое моделирование структуры силикатных и германатных расплавов с учетом данных высокотемпературной спектроскопии комбинационного рассеяния света // Дисс. докт. хим. наук. Миасс, 2022. – 326 с.

32 Белых Л.Б., Скрипов Н.И., Стеренчук Т.П., Акимов В.В., Таусон В.Л., Лихацкий М.Н., Миленькая Е.А., Корнаухова Т.А., Шмидт Ф.К. Первое применение палладий-фосфорных катализаторов в прямом синтезе пероксида водорода: причины промотирующего действия фосфора // Кинетика и катализ. – 2023. – Т. 64. – № 6. – С. 749-760.

33 Акимов В.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю. Поведение наночастиц золота на межфазной границе кварц-селениды меди и железа при температуре 450 °С и разной активности селена // Геология и геофизика. – 2024. – Т. 65. – № 8. – С. 1060-1079.

34 Akimov V.V. The influence of erosion of an AISI 304 stainless steel target during long-term magnetron spraying on the structural and chemical homogeneity of the obtained thin films // Mater. Chem. Phys. – 2025. – V. 339. – Art. 130741.

35 Smagunov N., Tauson V., Lipko S., Babkin D., Pastushkova T., Belozerova O., Bryansky N. Partitioning and surficial segregation of trace elements in iron oxides in hydrothermal fluid systems // Minerals. – 2021. – V. 11. – No. 1. – Art. 57.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Перечень статей, опубликованных по тематике проекта в 2025 г. в соответствии с государственным заданием

1 В журналах I и II квартилей по Web of Science/Scopus

1 **Akimov V.V.** The influence of erosion of an AISI 304 stainless steel target during long-term magnetron spraying on the structural and chemical homogeneity of the obtained thin films // Mater. Chem. Phys. – 2025. – V. 339. – Art. 130741. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.130741.

2 Amsheev D.Yu., Kashevskii A.V., Ponomarenko I.A., Safronov A.Yu., **Akimov V.V.**, Tauson V.L., Belozerova O.Yu., Klimenkov I.V., Shurygina I.A., Dremina N.N., Trukhan I.S., Lozovskaya E.A., Zavyalova A.S., Nikiforov S.B. Morphology and biological characteristics of the electrochemically modified titanium surface // Bioelectrochemistry. – 2026. – V. 168. – Art. 109156. DOI: 10.1016/j.bioelechem. 2025.109156.

3 Chukanov N.V., Zubkova N.V., Shendrik R.Yu., **Sapozhnikov A.N.**, Pekov I.V., Vigasina M.F., Chervonnaya N.A., Varlamov D.A., Bolotina N.B., Ksenofontov D.A., Pushcharovsky D.Yu. Crystal structure features, spectroscopic characteristics and thermal conversions of sulfur-bearing groups: New natural commensurately modulated hauyne analogue, $\text{Na}_6\text{Ca}_{2-x}(\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4^{2-}, \text{HS}^-, \text{S}_2^{\cdot-}, \text{S}_4, \text{S}_3^{\cdot-}, \text{S}_5^{2-})_{2-y}$ // Minerals. – 2025. – V. 15. – Art. 709. DOI: 10.3390/min15070709.

2 В журналах III и IV и без квартиля по Web of Science/Scopus

1 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л.**, Белозерова О.Ю. Особенности распределения и формы нахождения тонкодисперсного и «невидимого» золота в арсенопиритах и пиритах месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) // Геол. руд. месторожд. – 2025. – Т. 67. – № 2. – С. 161-201. DOI: 10.31857/S0016777025020037.

2 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л.**, Брянский Н.В., **Липко С.В.** «Невидимое» золото на природной поверхности арсенопирита золоторудного месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) по данным ЛА-ИСП-МС // Геология и геофизика. – 2025. – Т. 66. – № 10. – С. 1264-1278. DOI: 10.15372/GiG2025135.

3 Шепелев И.И., Пиляева О.В., **Головных Н.В.**, Пригарин В.А. Использование отходов теплоэлектростанций в качестве сырьевой добавки в процессе получения глинозема из нефелиновых руд // Экология и промышленность России. – 2025. – Т. 29. – № 6. – С. 16-21. DOI: 10.18412/1816-0395-2025-6-16-21.

3 В журналах РИНЦ, ВАК

1 Павлюк Н.С., Макшаков А.С., Кравцова Р.Г. Золотосодержащее серебро и самородное золото Au-Ag месторождения Дукат (Северо-Восток России) // Науки о Земле и недропользование. – 2026. (принята в печать).

3 Статьи участников проекта в рамках грантов РНФ

1 **Сапожников А.Н., Таусон В.Л., Липко С.В.,** Данилов Б.С., Чуканов Н.В. О температурных условиях образования розового S₄-содержащего гаюина из Мало-Быстринского лазуритового месторождения // ЗРМО. – 2025. – Ч. 154. – № 1. – С. 107-117. DOI: 10.31857/S0869605525010057.

2 **Kravtsova R.G., Makshakov A.S., Tauson V.L., Lipko S.V.,** Belozerova O.Yu. Gold in ores of the Natalka giant deposit (North East Russia): Content, distribution and speciation // Rus. J. Earth Sci. – 2025. – V. 25. – ES1014. DOI: 10.2205/2025es000990.

3 **Липко С.В.,** Николаев А.В., **Бабкин Д.Н., Таусон В.Л.** Аккумуляция примесных элементов при гидротермальной кристаллизации пирита: селективность поверхностных фаз // Записки Горного института, принята в печать. ИФ=2.9, Q1 SJR.

4 **Tauson V.L., Sapozhnikov A.N., Lipko S.V.,** Mikhlin Yu.L., Danilov B.S., Shendrik R.Yu., Sofich D.O., Arsentyev K.Yu., Belozerova O.Yu. Spectroscopic and physicochemical study of the color grain-size effect in lazurite-type minerals // Am. Mineral. – 2026. – V. 111. – No.1. DOI: 10.2138/am-2024-9656. IF=2.7, SJR 2024 - Q1.

5 **Липко С.В., Таусон В.Л., Кравцова Р.Г., Смагунов Н.В., Макшаков А.С.,** Николаев А.В. Селективность поглощения микроэлементов поверхностью кристаллов рудного пирита: данные ИСП-МС // Геология и геофизика, принята в печать.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б
Показатели выполнения проекта в 2025 г.

Показатель	Значение показателя
1. Общее количество научных сотрудников – исполнителей	11
<i>в том числе:</i>	
академиков РАН	0
членов-корреспондентов РАН	0
докторов наук	4
кандидатов наук	5
молодых ученых (до 39 лет включительно)	2
2. Количество основных публикаций	
<i>в том числе:</i>	
рецензируемых монографий, энциклопедий (наличие ISBN)	0
глав в рецензируемых монографиях	0
статей, опубликованных по теме проекта в журналах, индексируемых в WoS Core Collection и (или) Scopus	6*
статей, опубликованных по теме проекта в журналах, индексируемых только в РИНЦ	1
объектов интеллектуальной собственности (патентов и других РИД)	0
докладов в материалах конференций	5
3. Число защищенных диссертаций по теме исследования	
<i>в том числе:</i>	
кандидатских	0
докторских	0

*Не указано 5 статей, опубликованных участниками проекта и принятых в печать в 2025 г. в рамках грантов РНФ

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Копия Государственного задания на 2025 г. по данной теме–проекту

1 – Моделирование состава флюидов, формирующих рудные месторождения в различных геохимических обстановках, с использованием опубликованных аналитических данных и полученных при реализации проекта валовых и парциальных (относящихся к разным ФН) коэффициентов сокристаллизации примесных элементов. 2 – Оценка содержаний Au и Ag в рудообразующих флюидах, формирующих месторождения разных формаций с учетом двойственности коэффициента распределения (минерал-флюид). 3 – Обобщить результаты изучения особенностей распределения и форм нахождения золота и серебра в рудах и минералах орогенных золоторудных месторождений Наталкинское, Дегдекан, Дорожное, Мальдяк (Приколымье) и эпимеральных Au-Ag месторождений Роговик, Дальнее, Кварцевая Сопка, Дукат (Охотско-Чукотский вулканогенный пояс). Использовать полученные данные для выявления источника рудоносных флюидов и первоисточника Au и Ag. 4 – Построение физико-химических моделей образования и развития месторождений БМ разного типа с учетом активности летучих компонентов ($f\text{O}_2$, $f\text{S}_2$, $f\text{Se}_2$, $f\text{Te}_2$), дефектности и размерности минеральных фаз, содержащих элементы переменной валентности (ЭПВ). 5 – Разработать алгоритмы расчета минеральных ассоциаций терригенных озерных отложений по данным химического анализа. 6 – Определить термодинамические свойства и закономерности образования газовых гидратов в условиях криолитозоны, донных отложений и ядер комет, выяснить роль гидратов газов в природных процессах и определить закономерности их формирования и распространения.

ПРИЛОЖЕНИЕ Г

Перечень публикаций по проекту за 2021 – 2025 гг.

(Участники проекта выделены жирным шрифтом)

2021 г.

1 **Makshakov A.S., Kravtsova R.G.** Stream sediments of the Pestrinsk silver-bearing system (Northeastern Russia) // Minerals. – 2021. – V. 11. – No. 1. – Art. 65. DOI: 10.3390/min11010065.

2 **Smagunov N., Tauson V., Lipko S., Babkin D., Pastushkova T.**, Belozerova O., Bryansky N. Partitioning and surficial segregation of trace elements in iron oxides in hydrothermal systems // Minerals. – 2021. – V.11. – No. 1. – Art. 57. DOI: 10.3390/min11010057.

3 **Sapozhnikov A.N., Tauson V.L., Lipko S.V.**, Shendrik R.Yu., Levitskii V.I., Suvorova L.F., Chukanov N.V., Vigasina M.F. On the crystal chemistry of sulfur-rich lazurite, ideally $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)(\text{S}_3)^-$ • nH₂O // Amer. Mineral. – 2021. – V. 106. – No. 2. – P. 226-234. DOI: 10.2138/am-2020-7317.

4 Koroleva O.N., **Bychinsky V.A., Tupitcyn A.A.** Thermodynamic modelling of M₂O-SiO₂ (M – Li, Na, K) melts as applying to mixed alkali systems // J. Non-Cryst. Solids. – 2021. – V. 57. – Art. 121065. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2021.

5 Grushko I.S., **Bychinskii V.A., Chudnenko K.V.** Physicochemical simulation of the melting process of silicon-containing waste from the energy complex // Journal of the Minerals Metals & Materials Society (JOM). – 2021. – V. 73. – No. 10. – P. 3000-3009. DOI: 10.1007/s11837-021-04820-w.

6 Belykh L.B., Skripov N.I., Sterenchuk T.P., **Akimov V.V., Tauson V.L.**; Milenkaya E.A., Schmidt F.K. Structurally disordered Pd-P nanoparticles as effective catalysts for the production of hydrogen peroxide by the anthraquinone method // Eur. J. Inorg. Chem. – 2021. – V. 44. – P. 4586-4593. DOI: 10.1002/ejic.202100712.

7 **Bychinsky V.**, Charykova M., Omara R. Geochemical modeling of soils and technogenic sediments interactions with natural waters using SELECTOR software (Chaabet-el-Hamra mine, Algeria) // Geochemistry; Chemie der Erde. – 2021. – V. 81. – No.4 – 125799. DOI: 10.1016/j.chemer.2021.125799.

8 Лесничая М.В., Жмуро́ва А.В., **Сапожников А.Н.** Синтез и характеристика водорастворимых арабиногалактан - стабилизированных наночастиц теллурида висмута // Журнал общей химии. – 2021. – Т. 91. – № 7. – С. 1120-1129. DOI: 10.31857/S0044460X21070167.

9 Opekunov A.Y., Opekunova M.G., Janson S.Y., **Bychinskii V.A.**, Somov V.V., Kukushkin S.Y., Paryan E.E. Mineral and geochemical characteristics of soils and bottom sediments in the area affected by mining dumps (a case study of the Sibay ore deposit) // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – 2021. – V. 817. No.1. – 012078 (21.07.2021). DOI: 10.1088/1755-1315/817/1/012078.

10 **Филиппова А.А.**, Мехоношин А.С., **Бычинский В.А.**, **Чудненко К.В.** Физико-химические особенности флюидов, сформировавших апогипербазитовые и апокарбонатные нефриты // Изв. Томского политех. Ун-та. – 2021. – Т. 332. – № 3. – С. 168-178. DOI: 10.18799/24131830/2021/3/3112.

11 **Сапожников А.Н.**, Чуканов Н.В., Шендрик Р.Ю., Вигасина М.Ф., **Таусон В.Л.**, **Липко С.В.**, Белаковский Д.И., Левицкий В.И., Суворова Л.Ф., Иванова Л.А. Лазурит: подтверждение статуса минерального вида с формулой $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)\text{S}_3^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ и новые данные // Зап. РМО. – 2021. – Т.150. - № 4. – С. 92-102. DOI: 10.31857/S0869605521040055.

12 Alokla R., Chuvashova I.S., Rasskazov S.V., **Oshchepkova A.V.**, Fileva T.S. Identifying clay minerals from upper cenozoic stratos in barguzin valley of the baikal rift zone // Geology and Mineral Resources of Siberia – 2021. – № 2. – P. 68-80. DOI: 10.20403/2078-0575-2020-2-68-80.

13 **Просекин С.Н.**, **Бычинский В.А.**, **Чудненко К.В.** Особенности состава атмосферных аэрозолей в районах промышленного воздействия, оценка наземных источников: новый подход // Наукосфера. – 2021. – №2(2). – С.16-23. DOI: 10.5281/zenodo.4549685.

14 **Акимов В.В.** Структурно-химические свойства механически активированных суперкварцитов Восточного Саяна и влияние на них термической ($T=450$ oC) и гидротермальной ($T=450$ oC, $P=1$ кбар) обработка // Труды Всероссийского ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии (ВЕСЭМПГ-2021, 25-26 мая 2021 г). М.: ГЕОХИ РАН, 2021. – 4 с.

15 **Акимов В.В.**, **Просекин С.Н.** Физико-химическое моделирование природных и химико-технологических наносистем с помощью компьютерной технологии «Селектор» // Материалы XIII Всероссийского петрографического совещания (с участием зарубежных ученых). 6–13 сентября 2021 г. – Иркутск: Изд-во Института географии им. В.Б. Сочавы СО РАН, 2021. – Т. 1. – С.23-26.

16 **Артименко М.В.** Термодинамическое равновесие Al_2SiO_5 полиморфов в тройной точке // Материалы XIII Всероссийского петрографического совещания (с участием

зарубежных ученых). 6–13 сентября 2021 г. – Иркутск: Изд-во Института географии им. Б. Сочавы СО РАН, 2021. – Т. 1. – С.40-41.

17 **Смагунов Н.В., Таусон В.Л., Липко С.В.** Типохимизм магнетита: распределение и формы нахождения элементов-индикаторов. Материалы XIII Всероссийского петрографического совещания (с участием зарубежных ученых). 6-13 сентября 2021 г., Иркутск, изд-во Института географии им. В.Б.Сочавы СО РАН, 2021. – Т. 3. – С. 73-76.

18 **Просекин С.Н., Знаменская Т.И., Бычинский В.А.** Физико-химические особенности изменения гумуса под воздействием техногенных аэрозолей // Байкальская молодежная научная конференция по геологии и геофизике. Материалы VI Всероссийской молодежной научной конференции, посвященной памяти академика Н.Л. Добрецова (23–27 августа 2021 г., Улан-Удэ – Горячинск): электрон. Вариант. Улан-Удэ, Изд. БНЦ СО РАН, 2021. – С. 81 – 84.

19 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Белозерова О.Ю., Татаринов В.В.** Микровключения и примеси в сульфидных минералах золоторудного месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) по данным РСМА // Байкальская молодежная научная конференция по геологии и геофизике: мат-лы VI Всерос. Молодеж. Науч. конф., посвящ. Памяти академика Н.Л. Добрецова (23–27 августа 2021 г., Улан-Удэ – Горячинск): электрон. Вариант. Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН, 2021. – С. 59–62.

20 Шендрик Р.Ю., Канева Е.В., Радомская Т.А., Богданов А.И., **Сапожников А.Н.**, Чуканов Н.В., Логинова П.С. Спектроскопия синих хромофоров $S_3^{..}$ и $(CO_3)^{..}$ в минералах // Минералы: строение, свойства, методы исследования, 2021. – № 12. – С. 169.

21 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С.** Минералого-геохимические особенности магматических пород Омсукчанского прогиба и их связь с золото-серебряным и серебряным оруденением (Северо-Восток России) // Петрология и геодинамика геологических процессов: Материалы XIII Всероссийского петрографического совещания (с участием зарубежных ученых). 06–13 сент. 2021 г., Иркутск. Иркутск: Изд-во Ин-та географии им. В.Б. Сочавы СО РАН, 2021. – Т. 2. – С. 47–50.

22 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Куликова З.И., Павлова Л.А.** Петро-геохимические особенности рудной минерализации золото-кварцевого месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) // Петрология и геодинамика геологических процессов: Материалы XIII Всероссийского петрографического совещания (с участием зарубежных ученых). 06–13 сентября 2021 г., Иркутск. Иркутск: Изд-во Ин-та географии им. В.Б. Сочавы СО РАН, 2021. – Т. 2. – С. 51–55.

23 **Головных Н.В., Бычинский В.А., Шепелев И.И.** Компьютерная физико-химическая модель спекания нефелиновой шихты с техногенными добавками // Научные

основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы 26 Национальной научно-технической конференции 26-27 мая 2021 г. Екатеринбург: Изд. ООО “Типография ФортДиалог”, 2021. – С. 104-109.

24 **Головных Н.В.**, Жижаев А.М., Шепелев И.И. Технологические особенности переработки техногенного алюминиевого сырья по способу спекания в составе нефелиновой шихты// Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы 26 Национальной научно-технической конференции 26-27 мая 2021 г. Екатеринбург: Изд. ООО “Типография ФортДиалог”, 2021. – С. 109-113.

2022 г.

1 Savva N.E., **Kravtsova R.G.**, Anisimova G.S., Palyanova G.A. Typomorphism of native gold (geological-industrial types of gold deposits in the North-East of Russia) // Minerals. – 2022. – V. 12 – Art. 561. DOI: 10.3390/min12050561.

2 Chukanov N.V., Shendrik R.Yu., Vigasina M.F., Pekov I.V., **Sapozhnikov A.N.**, Shcherbakov V.D., Varlamov D.A. Crystal chemistry, isomorphism, and thermal conversions of extra-framework components in sodalite-group minerals // Minerals. – 2022. – V. 12. – Art. 887. DOI: 10.3390/min12070887.

3 **Sapozhnikov A.N.**, Bolotina N.B., Chukanov N.V., Kaneva E.V., Shendrik R.Y., Vigasina M.F., Ivanova L.A. Slyudyankaite, IMA 2021-062a, in: CNMNC Newsletter 65 // Eur. J. Mineral. – 2022. - V. 34. - P. 143-144. DOI: 10.5194/ejm-34-143-2022.

4 Koroleva O.N., Shtenberg M.V., **Bychinskii V.A.** Melts and glasses of the K₂O-GeO₂ system: Physicochemical modelling with correction based on the results of Raman spectroscopy // J. Non-Crystal. Solids. – 2022. – V. 594. – Art. 121795. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2022.121795.

5 Maltsev A.E., Krivonogov S.K., Vosel Yu.S., **Bychinsky V.A.**, Miroshnichenko L.V., Shavekin A.S., Leonova G.A., Solotchin P.A. Geochemistry of Early Diagenesis in Sediments of Russian Arctic Glacial Lakes (Norilo–Pyasinskaya Water System). // Minerals. – 2022. – V. 2. – № 4. – Art. 468. DOI: 10.3390/min12040468.

6 Chubarov V., Cherkashina T., Maltsev A., Chuparina E., Amosova A., **Prosekin S.** Investigation of Soils and Pine Needles Using WDXRF and TXRF Techniques for Assessment of the Environmental Pollution of Shelekhov District, Eastern Siberia, by the Aluminum Industry and Heat Power Engineering // Agronomy. – 2022. – V. 12. – № 2. – Art. 454. DOI: 10.3390/agronomy12020454.

7 Bogush A.A., Leonova G.A., Krivonogov S.K., **Bychinsky V.A.**, Bobrov V.A., Maltsev A.E., Tikhova V.D., Miroshnichenko L.V., Kondratyeva L.M., Kuzmina A.E. Biogeochemistry

and element speciation in sapropel from freshwater Lake Dukhovoe (East Baikal region, Russia) // Applied Geochem. – 2022. – V. 143. – Art. 105384. DOI: 10.1016/j.apgeochem.2022.105384.

8 **Lipko S., Tauson V., Smagunov N., Babkin D., Parkhomenko I.** Distribution of trace elements (Ag, Pd, Cd, and Mn) between pyrite and pyrrhotite and selectivity of surficial nonautonomous phases in a hydrothermal system // Minerals. – 2022. – V. 12. – Art. 1165. DOI: 10.3390/min12091165.

9 Chukanov N.V., Shchipalkina N.V., Shendrik R.Yu., Vigasina M.F., **Tauson V.L., Lipko S.V., Varlamov D.A., Shcherbakov V.D., Sapozhnikov A.N., Kasatkin A.V., Zubkova N.V., Pekov I.V.** Isomorphism and mutual transformations of S-bearing componenets in feldspathoids with microporous structure // Minerals. – 2022. – V. 12. – Art. 1456. DOI: 10.3390/min12111456.

10 Леонова Г.А., Мальцев А.Е., Айсуева Т.С., Бобров В.А., Меленевский В.Н., **Бычинский В.А.**, Мирошниченко Л.В. Геохимия раннего диагенеза болотных отложений на примере голоценового разреза Торфяника Дулиха (Восточное Прибайкалье) // Геология и геофизика. – 2022. – Т. 63. – № 6. – С. 830-850. DOI: 10.15372/GiG2021114.

11 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л., Белозерова О.Ю., Татаринов В.В.** Формы нахождения золота в рудах и минералах Наталкинского месторождения (Северо-Восток России) // Геодинамика и тектонофизика. – 2022. – Т. 13. – № 2s. – Статья 0595. DOI: 10.5800/GT-2022-13-2s-0595.

12 Александрова Г.П., Богомяков А.С., **Сапожников А.Н.**, Овчаренко В.И. Дизайн нанокомпозита феррита висмута в полисахаридной матрице // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2022. – Т. 71. – № 7. – С. 1453-1463. DOI: 10.1007/s11172-022-3551-x.

13 Пресняков Р.В., Пещерова С.М., Чуешова А.Г., **Бычинский В.А.**, Непомнящих А.И. Взаимодействие примесей при выращивании mc-Si на основе UMG-Si // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. – 2022. – Т. 12. – № 1. – С. 15-29. DOI: 10.21285/2227-2925-2022-12-1-15-29.

14 Баенгуев Б.А., Белоголова Г.А., Чупарина Е.В., **Просекин С.Н.**, Долгих П.Г., Пастухов М.В. Распределение содержания свинца и формы его соединений в техногенной почве г. Свирска (Южное Прибайкалье). Известия Томского политехнического университета. Инженеринг георесурсов. – 2022. – Т. 333. – № 8. – С. 205–214. DOI: 10.18799/24131830/2022/8/3670.

15 Холодова М.С., Пастухов М.В., **Бычинский В.А., Просекин С.Н.**, Белозерова О.Ю. Минерально-вещественный состав твердого осадка снегового покрова в различных функциональных зонах г. Усолье-Сибирское // Известия Томского политехнического

университета. Инжиниринг георесурсов. – 2022. – Т. 333. – № 9. – С.219-230. DOI 10.18799/24131830/2022/9/3687.

16 Мальцев А.Е., **Бычинский В.А.**, Кривоногов С.К., Леонова Г.А., Мирошниченко Л.В., Шавекин А.С., Нечепуренко С.Ф. Геохимия раннего диагенеза лимногляциальных отложений на примере озер Норило-Пясинской водной системы (Российская Арктика) // Геология и минерально-сырьевые ресурсы Сибири. – 2022. – № 3. – С. 55-71. DOI: 10.20403/2078-0575-2022-3-55-71.

17 **Sapozhnikov A.N.**, Chukanov N.V., Shendrik R.Yu., Vigasina M.F., **Tauson V.L.**, **Lipko S.V.**, Belakovskiy D.I., Levitskii V.I., Suvorova L F., Ivanova L.A. Lazurite: Validation as a mineral species with the formula $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)\text{S}_3^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ and new data // Geology of Ore Deposits – 2022. – V. 64 – No. 7. – P. 470–475. DOI: 10.1134/S1075701522070078.

18 **Tauson V.L.**, **Lipko S.V.**, **Smagunov N.V.**, **Babkin D.N.**, Belozerova O.Yu. Cocrystallization of main impurity elements and noble metal admixtures in sphalerite in hydrothermal systems: the effect of sulfur fugacity // Experiment in Geosciences. – 2022. – V. 28. – № 1. – P. 104-107.

19 Шепелев И.И., Жуков Е.И., Еськова Е.Н., **Головных Н.В.**, Кирюшин Е.В., Пиляева О.В. Применение кальций содержащих техногенных материалов глиноземного производства в качестве мелиорантов [Электрон. ресурс] // АгроЭкоИнфо: Электронный научно-производственный журнал. – 2022. – №2. – Режим доступа: http://agroecoinfo.ru/STATYI/2022/2/st_219.pdf. DOI: 10.51419/202122219.

20 **Таусон В.Л.**, **Липко С.В.**, **Смагунов Н.В.**, **Бабкин Д.Н.**, Белозерова О.Ю. Сокристаллизация основных элементов-примесей и примесей благородных металлов в сфалерите в гидротермальных системах: влияние летучести серы // Труды Всероссийского ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии. Москва, 19-20 апреля 2022 / Отв.редактор О.А.Луканин. – М., ГЕОХИ РАН, 2022. – С.195-200.

21 **Таусон В.Л.**, **Липко С.В.**, **Смагунов Н.В.**, **Бабкин Д.Н.**, Белозерова О.Ю. Коэффициенты распределения и сокристаллизации широкого круга типоморфных элементов в магнетите, гематите и сфалерите в гидротермальных системах // Тезисы докладов XVIII Российского Совещания по экспериментальной минералогии. (Иркутск 5-10 сентября 2022 г.). – Иркутск: Изд. ИГ СО РАН, 2022. – С. 15.

22 **Акимов В.В.**, **Смагунов Н.В.** Формы вхождения БМ и особенности роста кристаллов минеральной ассоциации борнит-нукундамит в гидротермальных условиях при $T = 450$ °C и $P = 1$ кбар // Тезисы докладов XVIII Российского Совещания по экспериментальной минералогии. (Иркутск 5-10 сентября 2022 г.). – Иркутск: Изд. ИГ СО РАН, 2022. – С. 19.

23 Таусон В.Л., Липко С.В., Сапожников А.Н., Канева Е.В., Михлин Ю.Л. Прибайкальские лазуриты как природные клатрасилы, их структурный и химический типоморфизм, индикаторные свойства // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 167-171.

24 Нургатин Р.И., Бычинский В.А. Применение аддитивных методов расчета термодинамических свойств газовых гидратов на примере газогидрата метана // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 74-76.

25 Ощепкова А.В., Безрукова Е.В., Бычинский В.А. Определение минерального состава донных отложений оз. Хикушка методом физико-химического моделирования // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 77-80.

26 Тушицын А.А., Ясько С.В., Бычинский В.А. Моделирование диаграммы состояния системы CaO-CaC₂ // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 178-179.

27 Цветкова Е.А., Полетаева В.И., Бычинский В.А. Трансформация гидрохимического состава вод р. Ангара в зоне воздействия техногенных источников // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 201-203.

28 Чачанагова О.И., Блинов А.В., Просекин С.Н., Горячев Н.А., Александров И.С. Применение открытых ГИС для оптимизации геолого-геохимической оценки на обнаружение твердых полезных ископаемых (золото, медь) // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 2. – С. 210-214.

29 Акимов В.В. Поведение наночастиц благородных металлов в гидротермальных условиях при P=1 кбар, T=450°C и в «сухих» системах при заданной активности летучих компонентов (S и Se) и T=450°C (экспериментальное изучение) // Современные

направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 1. – С. 16-19.

30 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С.**, Татаринов В.В. Особенности распределения и уровни концентрирования золота в рудах Наталкинского месторождения (Северо-Восток России) // Современные направления развития геохимии: Материалы Всероссийской конференции (с участием зарубежных ученых). (Иркутск 21–25 ноября 2022 г.) – Иркутск: Изд-во Института географии СО РАН, 2022. – В 2-х томах. – Т. 1. – С. 249-253.

31 **Головных Н.В.**, Жуков Е.И., Кирюшин Е.В., Шепелев И.И. Геохимические аспекты использования диоксида углерода в производстве глинозема // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы 27 Международной научно-технической конференции, проводимой в рамках XX Уральской горнопромышленной декады. – Екатеринбург, 2022. – С. 60-64.

32 **Головных Н.В., Бычинский В.А., Шепелев И.И., Кирюшин Е.В., Жуков Е.И.** Расчеты процессов карбонизации оборотных растворов и вод глиноземного производства // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы 27 Международной научно-технической конференции, проводимой в рамках XX Уральской горнопромышленной декады. – Екатеринбург, 2022. – С. 65-70.

2023 г.

1 **Sapozhnikov A.N.**, Bolotina N.B., Chukanov N.V., Shendrik R.Yu., Kaneva E.V., Vigasina M.F., Ivanova L.A., **Tauson V.L., Lipko S.V.** Slyudyankaite, $\text{Na}_{28}\text{Ca}_4(\text{Si}_{24}\text{Al}_{24}\text{O}_{96})(\text{SO}_4)_6(\text{S}_6)_{1/3}(\text{CO}_2) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, a new sodalite – group mineral from the Malo-Bystrinskoe lazurite deposit, Baikal Lake area, Russia // Amer. Mineral. – 2023. – V. 108. – No. 9. – P. 1805-1817. DOI: 10.2138/am-2022-8598.

2 Bolotina N.B., **Sapozhnikov A.N.**, Chukanov N.V., Vigasina M.F. Structure modulations and symmetry of lazurite-related sodalite-group minerals // Crystals. – 2023. – V. 13. – No.5. – Art. 768. DOI: 10.3390/crust13050768.

3 Chukanov N.V., **Sapozhnikov A.N.**, Shendrik R.Yu., Zubkova N.V., Vigasina M.F., Potekhina N.V., Ksenofontov D.A., Pekov I.V. Crystal chemistry, thermal and radiation-induced conversions and indicatory significance of S-bearing groups in balliranoite // Minerals. – 2023. – V. 13. – No. 6. – Art. 822. DOI: 10.3390/min13060822.

4 Chukanov N.V., **Sapozhnikov A.N.**, Kaneva E.V., Varlamov D.A., Vigasina M.F. Bystrite, $\text{Na}_7\text{Ca}(\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24})\text{S}_5^{2-}\text{Cl}^-$: formula redefinition and relationships with other four-layer

cancrinite-group minerals // Miner. Mag. – 2023. – V. 87. – No. 3. – P. 455-464. DOI: 10.1180/mgm.2023.29.

5 Amosova A.A., Chubarov V.M., Prosekin S.N., Kaneva E.V. X-ray fluorescence analysis of snow cover solid phase for investigation of emissions by aluminum industry and combined heat and power complex // At. Spectroscopy. – 2023. – V. 44. – No. 3. – P. 169-177. DOI: 10.46770/AS.2023.115.

6 Тупицын А.А., Бычинский В.А., Штенберг М.В., Фомичев С.В., Королева О.Н. Оценка стандартной энタルпии образования кристаллических боратов щелочных металлов // ЖНХ. – 2023. – Т. 68. – № 3. – С. 1-8. DOI: 10.31857/S0044457X22601808.

7 Тупицын А.А., Ясько С.В., Бычинский В.А., Фомичев С.В., Ширибазарова Э.Б., Королева О.Н. Оценка величин стандартной теплоемкости кристаллических боратов щелочных металлов // ЖНХ. – 2023. – Т. 68. – № 5. – С. 630-637. DOI: 10.31857/S0044457X22602267.

8 Тупицын А.А., Ясько С.В., Бычинский В.А., Королева О.Н., Фомичев С.В. Оценка величин стандартной энтропии кристаллических боратов щелочных металлов // ЖНХ. – 2023. – Т. 68. – № 12. – С. 1762-1768. DOI: 10.31857/S0044457X23601074.

9 Смагунов Н.В., Липко С.В., Таусон В.Л., Белозерова О.Ю., Бабкин Д.Н. Распределение и формы нахождения лантаноидов в системе магнетит (гематит) – гидротермальный раствор при 450 °С и давлении 100 МПа // Геохимия. – 2023. – Т. 68. – № 9. – С. 938-946. DOI: 10.31857/S0016752523090091.

10 Таусон В.Л., Липко С.В., Смагунов Н.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю. Коэффициенты распределения и сокристаллизации широкого круга типоморфных элементов в магнетите, гематите и сфалерите в гидротермальных системах // Геология и геофизика. – 2023. – Т. 64. – № 8. – С. 1171-1186. DOI: 10.15372/GiG2023120.

11 Леонова Г.А., Мальцев А.Е., Кривоногов С.К., Бобров В.А., Меленевский В.Н., Бычинский В.А., Богуш А.А., Кондратьева Л.М., Мирошниченко Л.В. Биогеохимические особенности формирования голоценовых отложений озера Духовое на стадии раннего диагенеза, Восточное Прибайкалье // Геология и геофизика. – 2023. – Т. 64. – № 4. – С. 516-546. DOI: 10.15372/GiG2022116.

12 Chubarov V.M., Oshchepkova A.V., Belozerova O.Y., Kaneva E.V. Integrated approach to determining the phase composition of ores. In: Marin, Y. (ed). XIII General Meeting of the Russian Mineralogical Society and the Fedorov Session. GMRMS 2021. Springer Proceedings in Earth and Environmental Sciences. Springer, Cham., 2023. – P. 446-452. DOI: 10.1007/978-3-031-23390-6_56.

13 Жуков Е.И., Пиляева О.В., **Головных Н.В.**, Шепелев И.И. Снижение выбросов мелкодисперсной пыли в процессе спекания нефелиново-известняковой шихты // Экология и промышленность России. – 2023. – Т. 27. – № 8. – С. 16-21. DOI: 10.18412/1816-0395-2023-11-4-8.

14 Белых Л.Б., Скрипов Н.И., Стеренчук Т.П., **Акимов В.В., Таусон В.Л.**, Лихацкий М.Н., Миленькая Е.А., Корнаухова Т.А., Шмидт Ф.К. Первое применение палладий-fosфорных катализаторов в прямом синтезе пероксида водорода: причины промотирующего действия фосфора // Кинетика и катализ. – 2023. – Т. 64. – № 6. – С. 749-760. DOI: 10.31857/S0453881123060023.

15 **Кравцова Р.Г.,** Дриль С.И., **Макшаков А.С.** Возраст и изотопный состав золото-серебряных месторождений и рудопроявлений Эвенской группы (Охотско-Чукотский вулканогенный пояс, Северо-Восток России) // Тихоокеанская геология. – 2023. – № 6. – С. 131-147. DOI: 10.30911/0207-4028-2023-42-6-131-147.

16 **Просекин С.Н.,** Амосова А.А., Чубаров В.М., **Бычинский В.А.** Оценка экологогеохимического состояния техногенно-нагруженных пригородных районов г. Шелехов и г. Иркутск по данным снегогеохимического мониторинга // Геосферные исследования. – 2023. – № 3. – С. 140-153. DOI: 10.17223/25421379/28/10.

17 Zvereva M.V., Zhmurova A.V., **Sapozhnikov A.N.** The study of antioxidant activity of silver nanoparticles by the method of luminol-activated chemiluminescence in the H₂O₂-horseradish peroxidase system // Russian Journal of General Chemistry. – 2023. – V.93 (Suppl 1). – P. S371 – S381. DOI: 10.1134/S1070363223140153.

18 Пиляева О.В., Шепелев И.И., **Головных Н.В.**, Жуков Е.И. Снижение выбросов угарного газа в атмосферу при сжигании мазута в технологических теплоэнергетических установках // Экология и промышленность России. – 2023. – Т.27. – № 11. – С.4-8. DOI: 10.18412/1816-0395-2023-11-4-8.

19 Брюквина Л.И., Леонова Н.В., Глазунов Д.С., **Липко С.В.** Структурные нанодефекты кристалла фторида лития, образованные за счёт влияния приповерхностной электронной плазмы, созданной высокоинтенсивными фемтосекундными лазерными импульсами // Труды XXVI Международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2023)”. 21-25 августа 2023 г., Ярославль, 2023. – Т. 2. – С. 158-161.

20 Перепелов А.Б., Макрыгина В.А., Воронцов А.А., Сотникова И.А., Горячев Н.А., Безрукова Е.В., **Таусон В.Л.**, Непомнящих А.И., Шабанова Е.В. Геохимические и физико-химические исследования природных, техногенных и экспериментальных систем // В кн. Фундаментальные исследования в Восточной Сибири (к 75-летию академической науки в

Восточной Сибири) / [редкол.: И.В. Бычков (отв. ред.) и др.]; Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, Иркутский филиал. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2023. – Раздел 1.2.

21 **Головных Н.В., Зимин М.Д., Жуков Е.И., Шепелев И.И.** Развитие термохимических методов и процессов при утилизации отходов алюминиевого производства // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: материалы 28 Международной научно-технической конференции 6-7 апреля 2023 г., проводимой в рамках 21 Уральской горнопромышленной декады 3-12 апреля 2023г. – Екатеринбург: Изд-во ООО «Типография ФортДиалог», 2023. – С. 71–75.

22 **Головных Н.В., Зимин М.Д., Бычинский В.А., Шепелев И.И.** Совершенствование рециклинга сырьевых и технологических компонентов в производстве алюминия // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: материалы 28 Международной научно-технической конференции 6-7 апреля 2023 г., проводимой в рамках 21 Уральской горнопромышленной декады 3-12 апреля 2023 г. – Екатеринбург: Изд-во ООО «Типография ФортДиалог», 2023. – С. 76–80.

2024 г.

1 Chukanov N.V., Bolotina N.B., Shendrik R.Y., **Sapozhnikov A.N.**, Zubkova N.V., Pekov I.V., Vigasina M.F., Sandalov F.D., Ksenofontov D.A. Crystal chemistry and refined formula of tounkite // Minerals. – 2024. – V. 14. – Art. No. 382. DOI: 10.3390/min14040382.

2 Bolotina N.B., Chukanov N.V., **Sapozhnikov A.N.**, Zubkova N.V., Pekov I.V., Varlamov D.A., Vigasina M.F., Bulakh M.O., Yapaskurt V.O., Ksenofontov D.A. Vladimirivanovite revised: General crystal chemistry and isomorphous substitutions of extra-framework species // Minerals. – 2024. – V. 14. – Art. No. 883. DOI: 10.3390/min14090883.

3 **Makshakov A.S., Kravtsova R.G.** Features of sampling stream sediments of large river valleys under cryolithogenesis conditions in the Balygychan–Sugoy trough, North–East of Russia // Acta Geochimica. – 2024. – V. 43. – № 4. – P. 638–660. DOI: 10.1007/s11631-023-00666-y.

4 **Акимов В.В., Бабкин Д.Н., Белозерова О.Ю.** Поведение наночастиц золота на межфазной границе кварц-селениды меди и железа при температуре 450 °С и разной активности селена // Геология и геофизика. – 2024. – Т. 65. – № 8. – С. 1060-1079. DOI: 10.15372/GiG2024106.

5 **Таусон В.Л., Липко С.В., Бабкин Д.Н., Смагунов Н.В., Белозерова О.Ю., Канева Е.В.** Генезис Au-Ag минерализации в сфалеритовых рудах по данным о сокристаллизации сфалерита с Ag и Au в модельных гидротермальных системах // Геология и геофизика. – 2024. – Т. 65. – № 11. – С. 1535-1551. DOI: 10.15372/GIG2024123.

6 Мальцев А.Е., Бобров В.А., Леонова Г.А., Прейс Ю.И., Климин М.А., **Бычинский В.А.** Биогеохимия торфяных отложений голоценового разреза Выдринского болота – Южное Прибайкалье) // Геохимия. – 2024. – Т. 69. – № 8. – С. 693-713. DOI: 10.31857/S0016752524080047.

7 Пиляева О., Шепелев И., Жуков Е., Сахачев А., **Головных Н.** Извлечение ценных компонентов в процессе рециклинга техногенных материалов глиноземного производства // Экология и промышленность России. – 2024. – Т. 28. – № 4. – С. 15-19. DOI: 10.18412/1816-0395-2024-4-15-19.

8 Пиляева О.В., Шепелев И.И., Жуков Е.И., **Головных Н.В.** Пути повышения экологической безопасности при размещении отходов глиноземного производства на шламохранилище // Экология и промышленность России. – 2024. – Т. 28. – № 9. – С. 4-9. DOI: 10.18412/1816-0395-2024-9-4-9.

9 Леонова Г.А., Мальцев А.Е., Кондратьева Л.М., **Бычинский В.А.**, Мирошниченко Л.В., Кривоногов С.К. Геохимия раннего диагенеза донных отложений плеистоценового разреза озера Котокель (Восточное Прибайкалье) // Геология и геофизика. – 2024. – Т. 65. – № 12. – С. 1707-1731. DOI: 10.15372/GiG2024137.

10 **Tauson V.L., Lipko S.V., Babkin D.N., Smagunov N.V.**, Belozerova O.Yu. Origin of Au-Ag mineralization in sphalerite ores: Evidence from hydrothermal study of ZnS-Ag-Au and ZnS-Ag-Au-Sn systems // Experiment in Geosciences. – 2024. – V. 30. – No. 1. – P. 109-111.

11 **Таусон В.Л., Липко С.В., Бабкин Д.Н., Смагунов Н.В.**, Белозерова О.Ю. Генезис Au-Ag минерализации в сфалеритовых рудах по данным гидротермального исследования систем ZnS-Ag-Au и ZnS-Ag-Au-Sn // Труды Всероссийского ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии. Москва. 16-17 апреля 2024. / Отв. редактор О.А. Луканин, – М: ГЕОХИ РАН – 2024. – С. 142-147.

12 **Макшаков А.С., Кравцова Р.Г.** Особенности опробования аллювия крупных речных долин при поисках рудной минерализации (Северо-Восток России) // Сборник тезисов докладов XIII Международной научно-практической конференции «Научно-методические основы прогноза, поисков, оценки месторождений алмазов, благородных и цветных металлов». 10–12 апреля 2024 г., Москва, ФГБУ «ЦНИГРИ». – М.: ЦНИГРИ, 2024. – С. 237-239.

13 Тетиали Б.Я., **Бычинский В.А.** Физико-химическое моделирование процессов образования углеводородных газов озера Байкал // Континентальный рифтогенез, сопутствующие процессы. Материалы V Всероссийской конференции с участием иностранных ученых, посвященной памяти академика Н.А.Логачева в связи с 95-летием со дня рождения. Иркутск, 16-19 апреля 2024 г. – Иркутск: Изд-во ИГУ, 2024. – С. 170.

14 Пиляева О. В., Шепелев И. И., Жуков Е. И., **Головных Н. В.** Экологические аспекты использования техногенных мелкодисперсных добавок при переработке нефелинового сырья // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы XXIX Международной научно-технической конференции, 04-05 апреля 2024 г., проводимой в рамках XXII Уральской горнопромышленной декады 01-10 апреля 2024 г., Екатеринбург: Издательство ИП Русских А.В., 2024. – С. 87-90.

15 **Головных Н.В.** Методы локальной очистки подшламовой воды в оборотной системе глиноземного предприятия // Научные основы и практика переработки руд и техногенного сырья: Материалы XXIX Международной научно-технической конференции, 04-05 апреля 2024 г., проводимой в рамках XXII Уральской горнопромышленной декады 01-10 апреля 2024 г., Екатеринбург: Издательство ИП Русских А.В., 2024. – С. 91-95. – ISBN 978-5-6047797-3-6.

2025 г.

1 **Akimov V.V.** The influence of erosion of an AISI 304 stainless steel target during long-term magnetron spraying on the structural and chemical homogeneity of the obtained thin films // Mater. Chem. Phys. – 2025. – V. 339. – Art. 130741. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.130741.

2 Amsheev D.Yu., Kashevskii A.V., Ponomarenko I.A., Safronov A.Yu., **Akimov V.V.**, **Tauson V.L.**, Belozerova O.Yu., Klimenkov I.V., Shurygina I.A., Dremina N.N., Trukhan I.S., Lozovskaya E.A., Zavyalova A.S., Nikiforov S.B. Morphology and biological characteristics of the electrochemically modified titanium surface // Bioelectrochemistry. – 2026. – V. 168. – Art. 109156. DOI: 10.1016/j.bioelechem. 2025.109156.

3 Chukanov N.V., Zubkova N.V., Shendrik R.Yu., **Sapozhnikov A.N.**, Pekov I.V., Vigasina M.F., Chervonnaya N.A., Varlamov D.A., Bolotina N.B., Ksenofontov D.A., Pushcharovsky D.Yu. Crystal structure features, spectroscopic characteristics and thermal conversions of sulfur-bearing groups: New natural commensurately modulated hauyne analogue, $\text{Na}_6\text{Ca}_{2-x}(\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4^{2-}, \text{HS}^-, \text{S}_2^{2-}, \text{S}_4, \text{S}_3^{2-}, \text{S}_5^{2-})_{2-y}$ // Minerals. – 2025. – V. 15. – Art. 709. DOI: 10.3390/min15070709.

4 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л.**, Белозерова О.Ю. Особенности распределения и формы нахождения тонкодисперсного и «невидимого» золота в арсенопиритах и пиритах месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) // Геол. руд. месторожд. – 2025. – Т. 67. – № 2. – С. 161-201. DOI: 10.31857/S0016777025020037.

5 **Кравцова Р.Г., Макшаков А.С., Таусон В.Л.**, Брянский Н.В., **Липко С.В.** «Невидимое» золото на природной поверхности арсенопирита золоторудного

месторождения Наталкинское (Северо-Восток России) по данным ЛА-ИСП-МС // Геология и геофизика. – 2025. – Т. 66. – № 10. – С. 1264-1278. DOI: 10.15372/GiG2025135.

6 Шепелев И.И., Пиляева О.В., **Головных Н.В.**, Пригарин В.А. Использование отходов теплоэлектростанций в качестве сырьевой добавки в процессе получения глинозема из нефелиновых руд // Экология и промышленность России. – 2025. – Т. 29. – № 6. – С. 16-21. DOI: 10.18412/1816-0395-2025-6-16-21.

7 **Павлюк Н.С., Макшаков А.С., Кравцова Р.Г.** Золотосодержащее серебро и самородное золото Au-Ag месторождения Дукат (Северо-Восток России) // Науки о Земле и недропользование. – 2026. (принята в печать).

8 **Павлюк Н.С., Макшаков А.С., Кравцова Р.Г.** Золотосодержащее серебро и самородное золото Au-Ag месторождения Дукат (Северо-Восток России) // Современные проблемы геохимии – 2025: Материалы Всероссийской конференции молодых ученых, посвященной 130-летию со дня рождения академика А.П. Виноградова (Иркутск, 15–20 сентября 2025 г.). Иркутск: ИГХ СО РАН, 2025. – С. 106–109.

9 **Таусон В.Л., Сапожников А.Н., Липко С.В., Шендрик Р.Ю., Бабкин Д.Н.** Молекула CO₂ в минералах семейства лазурита (МСЛ) как индикатор фугитивности углекислого газа в геохимической системе // Тезисы докл. Всерос. ежегодного семинара по эксперим. минералогии, петрологии и геохимии. Москва, 15-16 апреля 2025 г. М.: ГЕОХИ РАН, 2025. – № 114.

10 **Таусон В.Л., Сапожников А.Н.** О природе цветового размерного эффекта в лазуритах // Материалы науч. семинара Минералогия и музеи: синергия науки и искусства. Иркутск, 31 марта- 1 апреля 2025 г. Иркутск: ИГХ СО РАН, Гос. Минер. Музей ИРНИТУ, 2025. – С. 57-63.

11 **Таусон В.Л., Сапожников А.Н., Липко С.В., Шендрик Р.Ю., Бабкин Д.Н.** Экспериментальное изучение вхождения CO₂ в минералы семейства лазурита // Материалы IV геологической конференции “Граниты и эволюция Земли: геодинамические обстановки, происхождение и рудный потенциал гранитоидного магматизма” (с участием зарубежных ученых). 02-07 июня 2025 г. – Иркутск: Изд-во Института географии им. В.Б.Сочавы СО РАН. – 2025. – С. 125-127.

12 Аксенов С.М., Зарубина Е.С., **Таусон В.Л.**, Расцветаева Р.К. Кристаллохимия природных и синтетических силикатов редкоземельных элементов из гранитов и гранитоидных систем // Материалы IV геологической конференции “Граниты и эволюция Земли: геодинамические обстановки, происхождение и рудный потенциал гранитоидного магматизма” (с участием зарубежных ученых). 02-07 июня 2025 г. – Иркутск: Изд-во Института географии им. В.Б.Сочавы СО РАН. – 2025. – С. 7-9.

Статьи со ссылкой на РНФ участников проекта, опубликованные и принятые в печать

1 **Сапожников А.Н., Таусон В.Л., Липко С.В.,** Данилов Б.С., Чуканов Н.В. О температурных условиях образования розового S₄-содержащего гаюина из Мало-Быстринского лазуритового месторождения // ЗРМО. – 2025. – Ч. 154. – № 1. – С. 107-117. DOI: 10.31857/S0869605525010057.

2 **Kravtsova R.G., Makshakov A.S., Tauson V.L., Lipko S.V.,** Belozerova O.Yu. Gold in ores of the Natalka giant deposit (North East Russia): Content, distribution and speciation // Rus. J. Earth Sci. – 2025. – V. 25. – ES1014. DOI: 10.2205/2025es000990.

3 **Липко С.В.,** Николаев А.В., **Бабкин Д.Н., Таусон В.Л.** Аккумуляция примесных элементов при гидротермальной кристаллизации пирита: селективность поверхностных фаз // Записки Горного института, принята в печать. ИФ=2.9, Q1 SJR.

4 **Tauson V.L., Sapozhnikov A.N., Lipko S.V.,** Mikhlin Yu.L., Danilov B.S., Shendrik R.Yu., Sofich D.O., Arsentev K.Yu., Belozerova O.Yu. Spectroscopic and physicochemical study of the color grain-size effect in lazurite-type minerals // Am. Mineral. – 2026. – V. 111. – No.1. DOI: 10.2138/am-2024-9656. IF=2.7, SJR 2024 - Q1.

5 **Липко С.В., Таусон В.Л., Кравцова Р.Г., Смагунов Н.В., Макшаков А.С.,** Николаев А.В. Селективность поглощения микроэлементов поверхностью кристаллов рудного пирита: данные ИСП-МС // Геология и геофизика, принята в печать.