

РАВНОВЕСНЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ГЛУБИННЫХ ВОД РЕЗЕРВУАРОВ ОЗ. БАЙКАЛ

Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В.

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, e-mail: astra@igc.irk.ru

Методами равновесной термодинамики исследованы формы нахождения элементов в глубинных водах оз. Байкал и проведено их сравнение в системах пяти резервуаров оз. Байкал. Для этого использованы составы изученных независимых компонентов систем «Глубинные воды» пяти резервуаров озера Байкал – исходные векторы мольных количеств [Астраханцева, 2002; 2004] (табл. 1). Все термодинамические свойства газов, зависимых компонентов водного раствора и минералов, параметры состояния НКФ [Johnson et al., 1992; Tanger et al., 1988] взяты из базы данных SPRONS.

Таблица 1

Концентрации компонентов в системах пяти резервуаров озера Байкал

Компо-нент	Резерву-ары	Глубинные		Компо-нент	Резерву-ары	Глубинные		Компо-нент	Резерву-ары	Глубинные	
		моль/кг	мг/кг			моль/кг	мг/кг			моль/кг	мг/кг
K	Южный	2.402·10 ⁻⁵	0.9392	Cl	Южный	1.416·10 ⁻⁵	0.5021	Sr	Южный	1.268·10 ⁻⁶	0.1111
	Селенг.	3.405·10 ⁻⁵	1.331		Селенг.	1.417·10 ⁻⁵	0.5023		Селенг.	2.981·10 ⁻⁶	0.2612
	Средний	3.146·10 ⁻⁵	1.23		Средний	1.416·10 ⁻⁵	0.502		Средний	2.979·10 ⁻⁶	0.2611
	Ушкан.	2.984·10 ⁻⁵	1.167		Ушкан.	1.416·10 ⁻⁵	0.502		Ушкан.	3.14·10 ⁻⁶	0.2751
	Север.	2.505·10 ⁻⁵	0.9792		Север.	1.416·10 ⁻⁵	0.5022		Север.	3.141·10 ⁻⁶	0.2752
Na	Южный	1.331·10 ⁻⁴	3.061	N	Южный	7.135·10 ⁻⁶	0.09994	Zn	Южный	1.137·10 ⁻⁷	7.433·10 ⁻³
	Селенг.	1.737·10 ⁻⁴	3.993		Селенг.	9.47·10 ⁻⁶	0.1326		Селенг.	9.373·10 ⁻⁸	6.129·10 ⁻³
	Средний	1.605·10 ⁻⁴	3.69		Средний	1.186·10 ⁻⁵	0.1661		Средний	9.368·10 ⁻⁸	6.126·10 ⁻³
	Ушкан.	1.523·10 ⁻⁴	3.502		Ушкан.	1.106·10 ⁻⁵	0.155		Ушкан.	9.522·10 ⁻⁸	6.226·10 ⁻³
	Север.	1.278·10 ⁻⁴	2.938		Север.	1.352·10 ⁻⁵	0.1893		Север.	9.524·10 ⁻⁸	6.228·10 ⁻³
Ca	Южный	4.023·10 ⁻⁴	16.13	P	Южный	2.783·10 ⁻⁷	8.62·10 ⁻³	Co	Южный	8.09·10 ⁻¹⁰	4.77·10 ⁻⁵
	Селенг.	3.985·10 ⁻⁴	15.97		Селенг.	2.799·10 ⁻⁷	8.67·10 ⁻³		Селенг.	6.48·10 ⁻¹⁰	3.818·10 ⁻⁵
	Средний	4.021·10 ⁻⁴	16.11		Средний	3.553·10 ⁻⁷	0.01101		Средний	6.47·10 ⁻¹⁰	3.816·10 ⁻⁵
	Ушкан.	3.231·10 ⁻⁴	12.95		Ушкан.	3.657·10 ⁻⁷	0.01133		Ушкан.	7.16·10 ⁻¹⁰	4.217·10 ⁻⁵
	Север.	3.901·10 ⁻⁴	15.64		Север.	8.933·10 ⁻⁷	0.02767		Север.	8.52·10 ⁻¹⁰	5.022·10 ⁻⁵
Mg	Южный	1.364·10 ⁻⁴	3.314	As	Южный	4.021·10 ⁻⁹	3.01·10 ⁻⁴	U	Южный	1.688·10 ⁻⁹	4.017·10 ⁻⁴
	Селенг.	1.364·10 ⁻⁴	3.315		Селенг.	4.021·10 ⁻⁹	3.01·10 ⁻⁴		Селенг.	1.688·10 ⁻⁹	4.019·10 ⁻⁴
	Средний	1.363·10 ⁻⁴	3.313		Средний	4.021·10 ⁻⁹	3.012·10 ⁻⁴		Средний	1.687·10 ⁻⁹	4.016·10 ⁻⁴
	Ушкан.	1.363·10 ⁻⁴	3.313		Ушкан.	4.021·10 ⁻⁹	3.012·10 ⁻⁴		Ушкан.	1.94·10 ⁻⁹	4.619·10 ⁻⁴
	Север.	1.364·10 ⁻⁴	3.314		Север.	4.022·10 ⁻⁹	3.013·10 ⁻⁴		Север.	1.941·10 ⁻⁹	4.62·10 ⁻⁴
Al	Южный	1.303·10 ⁻⁷	3.52·10 ⁻³	B	Южный	8.649·10 ⁻⁷	9.351·10 ⁻³	V	Южный	7.886·10 ⁻⁹	4.017·10 ⁻⁴
	Селенг.	1.8·10 ⁻⁶	0.0486		Селенг.	8.649·10 ⁻⁷	9.351·10 ⁻³		Селенг.	8.874·10 ⁻⁹	4.521·10 ⁻⁴
	Средний	3.479·10 ⁻⁶	0.09388		Средний	8.649·10 ⁻⁷	9.351·10 ⁻³		Средний	8.87·10 ⁻⁹	4.518·10 ⁻⁴
	Ушкан.	3.479·10 ⁻⁶	0.09388		Ушкан.	8.649·10 ⁻⁷	9.351·10 ⁻³		Ушкан.	9.067·10 ⁻⁹	4.619·10 ⁻⁴
	Север.	1.898·10 ⁻⁶	0.05122		Север.	8.649·10 ⁻⁷	9.351·10 ⁻³		Север.	9.759·10 ⁻⁹	4.971·10 ⁻⁴
Si	Южный	3.171·10 ⁻⁵	0.8905	Cr	Южный	8.015·10 ⁻⁹	4.168·10 ⁻⁴	Br	Южный	2.765·10 ⁻⁹	2.209·10 ⁻⁴
	Селенг.	6.007·10 ⁻⁵	1.687		Селенг.	1.15·10 ⁻⁸	5.977·10 ⁻⁴		Селенг.	3.017·10 ⁻⁹	2.411·10 ⁻⁴
	Средний	4.564·10 ⁻⁵	1.282		Средний	1.149·10 ⁻⁸	5.974·10 ⁻⁴		Средний	5.026·10 ⁻⁹	4.016·10 ⁻⁴
	Ушкан.	4.561·10 ⁻⁵	1.281		Ушкан.	1.062·10 ⁻⁸	5.522·10 ⁻⁴		Ушкан.	2.765·10 ⁻⁹	0.02209
	Север.	3.648·10 ⁻⁵	1.024		Север.	1.062·10 ⁻⁸	5.524·10 ⁻⁴		Север.	2.388·10 ⁻⁹	1.908·10 ⁻⁴
Mn	Южный	2.468·10 ⁻⁸	1.36·10 ⁻³	Cu	Южный	1.541·10 ⁻⁸	9.792·10 ⁻⁴	Rb	Южный	9.283·10 ⁻⁹	7.934·10 ⁻⁴
	Селенг.	2.194·10 ⁻⁸	1.21·10 ⁻³		Селенг.	1.565·10 ⁻⁸	9.946·10 ⁻⁴		Селенг.	3.761·10 ⁻⁹	3.215·10 ⁻⁴
	Средний	2.193·10 ⁻⁸	1.21·10 ⁻³		Средний	1.564·10 ⁻⁸	9.94·10 ⁻⁴		Средний	3.759·10 ⁻⁹	3.213·10 ⁻⁴
	Ушкан.	2.193·10 ⁻⁸	1.21·10 ⁻³		Ушкан.	5.53·10 ⁻⁸	3.514·10 ⁻³		Ушкан.	4.505·10 ⁻⁹	3.851·10 ⁻⁴
	Север.	2.925·10 ⁻⁸	1.62·10 ⁻³		Север.	1.818·10 ⁻⁸	1.155·10 ⁻³		Север.	4.583·10 ⁻⁹	3.917·10 ⁻⁴
Fe	Южный	4.496·10 ⁻⁷	0.02511	Cd	Южный	1.03·10 ⁻¹⁰	1.155·10 ⁻³	Mo	Южный	9.421·10 ⁻⁹	9.038·10 ⁻⁴
	Селенг.	6.206·10 ⁻⁷	0.03466		Селенг.	2.06·10 ⁻¹⁰	2.311·10 ⁻³		Селенг.	6.649·10 ⁻⁹	6.379·10 ⁻⁴
	Средний	6.203·10 ⁻⁷	0.03464		Средний	2.05·10 ⁻¹⁰	2.309·10 ⁻³		Средний	6.646·10 ⁻⁹	6.376·10 ⁻⁴
	Ушкан.	6.203·10 ⁻⁷	0.03464		Ушкан.	2.41·10 ⁻¹⁰	2.711·10 ⁻³		Ушкан.	7.431·10 ⁻⁹	7.129·10 ⁻⁴
	Север.	5.305·10 ⁻⁷	0.02963		Север.	3.4·10 ⁻¹⁰	3.816·10 ⁻³		Север.	9.317·10 ⁻⁹	8.939·10 ⁻⁴
S	Южный	4.354·10 ⁻⁵	1.396	Hg	Южный	1.252·10 ⁻⁹	2.511·10 ⁻⁴	H	Южный	0.00113	1.139
	Селенг.	4.433·10 ⁻⁵	1.422		Селенг.	1.252·10 ⁻⁹	2.512·10 ⁻⁴		Селенг.	0.00124	1.25
	Средний	4.399·10 ⁻⁵	1.411		Средний	1.251·10 ⁻⁹	2.51·10 ⁻⁴		Средний	1.173·10 ⁻³	1.182
	Ушкан.	4.357·10 ⁻⁵	1.397		Ушкан.	1.602·10 ⁻⁹	3.213·10 ⁻⁴		Ушкан.	1.156·10 ⁻³	1.165
	Север.	4.023·10 ⁻⁴	16.13		Север.	4.01·10 ⁻¹⁰	8.035·10 ⁻⁵		Север.	0.0012	1.21
C	Южный	4.412·10 ⁻⁵	1.415	Pb	Южный	1.939·10 ⁻⁹	4.017·10 ⁻⁴	O	Южный	4.397·10 ⁻³	70.35
	Селенг.	1.305·10 ⁻³	15.68		Селенг.	2.255·10 ⁻⁹	4.671·10 ⁻⁴		Селенг.	4.391·10 ⁻³	70.25
	Средний	0.00145	17.42		Средний	2.253·10 ⁻⁹	4.669·10 ⁻⁴		Средний	4.441·10 ⁻³	71.06
	Ушкан.	1.397·10 ⁻³	16.78		Ушкан.	2.229·10 ⁻⁹	4.619·10 ⁻⁴		Ушкан.	4.198·10 ⁻³	67.16
	Север.	1.312·10 ⁻³	15.76		Север.	1.939·10 ⁻⁹	4.017·10 ⁻⁴		Север.	3.913·10 ⁻³	62.61

Расчеты проводились с помощью программного комплекса (ПК) Селектор-С [Карпов et al., 1997]. Физико-химическое моделирование глубинных вод резервуаров оз. Байкал представляло расчет химического равновесного состояния систем. Использовано 32 независимых компонента: Na, K, Ca, Mg, Al, Si, Mn, Fe, S, C, Cl, N, P, H, O, As, B, Cr, Cu, Cd, Hg, Pb, Sr, Zn, Co, U, V, Br, Rb, Mo, Ti, e, где e обозначает электрон (электропотенциальность компонента). C, N, P, S представлены суммарным количеством минеральной и органической форм. Для всех систем использовался одинаковый набор зависимых компонентов из термодинамических баз данных: a_sprons98.DB (водные компоненты), g_sprons98.DB (газы), s_sprons98.DB (твердые фазы). Общее число зависимых (вероятных) компонентов 246, включая H₂O как растворитель. Газовая фаза включает 6 компонентов. Твердые фазы представлены списком тех минералов, которые потенциально могут присутствовать в равновесии: карбонаты, сульфаты, оксиды и гидрооксиды. Моделирование проводилось при среднегодовых температурах каждой системы. Озеро Байкал – открытая система, обменивающаяся с атмосферой веществом и энергией. Учет в модели газов, растворенных в байкальской воде, производится, исходя из следующих предположений. Кислород и углекислый газ участвуют в геологическом и биологическом круговоротах вещества. Следовательно, необходимо знать их количественные характеристики в водах оз. Байкал (аналитические данные) и использовать для построения имитационных моделей термодинамических систем. Газообразный азот важен, прежде всего, тем, что он фиксируется цианобактериями в водах озера и вступает в биологический круговорот. В наших базах данных он представлен как N_{org} и NO₃⁻. Благородные газы Ne и Ar – химически инертны, в геологическом и биологическом круговоротах вещества не участвуют. Рассчитан полный компонентный состав, включая ионы, сложные нейтральные и заряженные ассоциаты глубинных вод пяти резервуаров оз. Байкал при среднемноголетних, присущих каждой системе температурах (табл. 2). Модели систем оз. Байкал показали, что характеристики кислотно-основных и окислительно-восстановительных состояний геохимических систем, определяемых соответственно величинами pH и Eh, для систем оз. Байкал различаются, также, как и их общая минерализация. Установлено, в виде каких химических соединений независимые компоненты присутствуют в водных системах, все зависимые компоненты образуют ионные пары, причем в нескольких формах, только макрокомпоненты на 99% представлены в виде свободных незакомплексованных ионов. Доминирующая форма серы – SO₄²⁻, углерода – HCO₃⁻. Хлор присутствует в виде иона Cl⁻. У всех биогенных компонентов и микроэлементов, кроме Br, основные формы находления в водах Байкала – ионные комплексы. Причем у таких компонентов, как Al, Cu, Cr, Fe, As, P, Hg, U, V, доминирующие формы находления в разных системах различаются.

Таблица 2
Содержания форм компонентов в глубинных водах пяти резервуаров оз. Байкал,
рассчитанные методом минимизации свободной энергии Гиббса

Резервуар Компонент	Глубинные воды									
	Южный		Селенгинский		Средний		Ушканьескостровский		Северный	
	моль/кг	мг/кг								
Водный раствор										
Al(OH) ₂ ⁺	1.39x10 ⁻⁹	8.5x10 ⁻⁵	3.26x10 ⁻⁸	1.99x10 ⁻³	5.54x10 ⁻⁸	3.38x10 ⁻³	3.31x10 ⁻⁸	2.02x10 ⁻³	2.15x10 ⁻⁸	1.31x10 ⁻³
Al(OH) ₃ ⁰	6.18x10 ⁻⁸	4.82x10 ⁻³	9.96x10 ⁻⁷	7.77x10 ⁻²	1.85x10 ⁻⁶	0.145	1.59x10 ⁻⁶	0.124	9.18x10 ⁻⁷	7.16x10 ⁻²
Al(OH) ₄ ⁻	6.02x10 ⁻⁸	5.72x10 ⁻³	6.59x10 ⁻⁷	6.27x10 ⁻²	1.37x10 ⁻⁶	0.13	1.68x10 ⁻⁶	0.16	8.57x10 ⁻⁷	8.14x10 ⁻²
B(OH) ₄ ⁻	4.61x10 ⁻⁸	3.63x10 ⁻³	3.08x10 ⁻⁸	2.42x10 ⁻³	3.61x10 ⁻⁸	2.84x10 ⁻³	4.84x10 ⁻⁸	3.82x10 ⁻³	4.32x10 ⁻⁸	3.41x10 ⁻³
BO ₃ ²⁻	5.83x10 ⁻⁹	2.49x10 ⁻⁴	3.78x10 ⁻⁹	1.62x10 ⁻⁴	4.61x10 ⁻⁹	1.97x10 ⁻⁴	5.99x10 ⁻⁹	2.56x10 ⁻⁴	5.36x10 ⁻⁹	2.29x10 ⁻⁴
Al(OH) ⁺²	2.36x10 ⁻¹¹	1.04x10 ⁻⁶	8.16x10 ⁻¹⁰	3.59x10 ⁻⁵	1.24x10 ⁻⁹	5.46x10 ⁻⁵	5.24x10 ⁻¹⁰	2.3x10 ⁻⁵	3.82x10 ⁻¹⁰	1.68x10 ⁻⁵
Al ⁺³	7.26x10 ⁻¹³	1.96x10 ⁻⁸	3.57x10 ⁻¹¹	9.63x10 ⁻⁷	5.16x10 ⁻¹¹	1.39x10 ⁻⁶	1.47x10 ⁻¹¹	3.97x10 ⁻⁷	1.21x10 ⁻¹¹	3.27x10 ⁻⁷
AlOH ₂ ⁺	2.36x10 ⁻¹¹	1.04x10 ⁻⁶	8.16x10 ⁻¹⁰	3.59x10 ⁻⁵	1.24x10 ⁻⁹	5.46x10 ⁻⁵	5.24x10 ⁻¹⁰	2.3x10 ⁻⁵	3.82x10 ⁻¹⁰	1.68x10 ⁻⁵
B(OH) ₃ ⁰	8.13x10 ⁻⁷	5.03x10 ⁻²	8.3x10 ⁻⁷	5.13x10 ⁻²	8.24x10 ⁻⁷	0.051	8.11x10 ⁻⁷	5.01x10 ⁻²	8.16x10 ⁻⁷	5.05x10 ⁻²
Br	2.77x10 ⁻⁹	2.21x10 ⁻⁴	3.02x10 ⁻⁹	2.41x10 ⁻⁴	5.03x10 ⁻⁹	4.02x10 ⁻⁴	2.76x10 ⁻⁷	2.21x10 ⁻²	2.39x10 ⁻⁹	1.91x10 ⁻⁴
CO ₂ ⁰	1.78x10 ⁻⁴	7.84	2.8x10 ⁻⁴	12.3	2.38x10 ⁻⁴	10.5	1.7x10 ⁻⁴	7.5	1.84x10 ⁻⁴	8.1
CO ₃ ²⁻	6.98x10 ⁻⁷	4.19x10 ⁻²	4.78x10 ⁻⁷	2.87x10 ⁻²	5.52x10 ⁻⁷	3.31x10 ⁻²	7.48x10 ⁻⁷	4.49x10 ⁻²	6.36x10 ⁻⁷	3.81x10 ⁻²
CaCO ₃	2.63x10 ⁻⁷	2.64x10 ⁻²	1.8x10 ⁻⁷	0.018	2.05x10 ⁻⁷	2.05x10 ⁻²	2.8x10 ⁻⁷	0.028	2.33x10 ⁻⁷	2.34x10 ⁻²
Ca(HCO ₃) ⁺	4.35x10 ⁻⁶	0.44	4.5x10 ⁻⁶	0.455	4.44x10 ⁻⁶	0.449	4.38x10 ⁻⁶	0.443	4.11x10 ⁻⁶	0.416

Ca ²⁺	3.96x10 ⁻⁴	15.9	3.92x10 ⁻⁴	15.7	3.96x10 ⁻⁴	15.9	3.92x10 ⁻⁴	15.7	3.84x10 ⁻⁴	15.4
CaCl ⁺	2.05x10 ⁻⁹	1.55x10 ⁻⁴	2.04x10 ⁻⁹	1.54x10 ⁻⁴	2.03x10 ⁻⁹	1.53x10 ⁻⁴	2.03x10 ⁻⁹	1.53x10 ⁻⁴	1.99x10 ⁻⁹	1.5x10 ⁻⁴
CaCl ₂ ⁰	1.87x10 ⁻¹⁴	2.08x10 ⁻⁹	1.87x10 ⁻¹⁴	2.08x10 ⁻⁹	1.85x10 ⁻¹⁴	2.05x10 ⁻⁹	1.87x10 ⁻¹⁴	2.07x10 ⁻⁹	1.83x10 ⁻¹⁴	2.03x10 ⁻⁹
CaHSiO ₃ ⁺	3.86x10 ⁻¹⁰	4.52x10 ⁻⁵	4.75x10 ⁻¹⁰	5.57x10 ⁻⁵	4.26x10 ⁻¹⁰	4.99x10 ⁻⁵	5.8x10 ⁻¹⁰	6.8x10 ⁻⁵	4.03x10 ⁻¹⁰	4.72x10 ⁻⁵
CaOH ⁺	8.36x10 ⁻¹¹	4.77x10 ⁻⁶	5.76x10 ⁻¹¹	3.29x10 ⁻⁶	6.21x10 ⁻¹¹	3.54x10 ⁻⁶	8.95x10 ⁻¹¹	5.11x10 ⁻⁶	7.82x10 ⁻¹¹	4.47x10 ⁻⁶
CaSO ₄ ⁰	1.34x10 ⁻⁶	0.182	1.36x10 ⁻⁶	0.185	1.33x10 ⁻⁶	0.181	1.33x10 ⁻⁶	0.181	1.32x10 ⁻⁶	0.18
Cd ²⁺	1.03x10 ⁻¹⁰	1.15x10 ⁻⁵	2.05x10 ⁻¹⁰	2.31x10 ⁻⁵	2.05x10 ⁻¹⁰	2.31x10 ⁻⁵	2.41x10 ⁻¹⁰	2.71x10 ⁻⁵	3.39x10 ⁻¹⁰	3.81x10 ⁻⁵
CdCl ⁺	1.48x10 ⁻¹³	2.19x10 ⁻⁸	1.88x10 ⁻¹³	2.78x10 ⁻⁸	2.93x10 ⁻¹³	4.34x10 ⁻⁸	3.45x10 ⁻¹³	5.11x10 ⁻⁸	5.01x10 ⁻¹³	7.41x10 ⁻⁸
CdCl ₂ ⁰	1.11x10 ⁻¹⁷	2.04x10 ⁻¹²	1.4x10 ⁻¹⁷	2.57x10 ⁻¹²	2.2x10 ⁻¹⁷	4.02x10 ⁻¹²	2.62x10 ⁻¹⁷	4.8x10 ⁻¹²	3.84x10 ⁻¹⁷	7.04x10 ⁻¹²
CdO ⁰	4.37x10 ⁻¹⁸	5.61x10 ⁻¹³	2.57x10 ⁻¹⁸	3.3x10 ⁻¹³	4.94x10 ⁻¹⁸	6.34x10 ⁻¹³	1.17x10 ⁻¹⁷	1.5x10 ⁻¹²	1.36x10 ⁻¹⁷	1.74x10 ⁻¹²
CdOH ⁺	2.73x10 ⁻¹⁴	3.53x10 ⁻⁹	2.32x10 ⁻¹⁴	3.01x10 ⁻⁹	4.1x10 ⁻¹⁴	5.31x10 ⁻⁹	6.76x10 ⁻¹⁴	8.75x10 ⁻⁹	8.78x10 ⁻¹⁴	1.14x10 ⁻⁸
Cl ⁻	1.42x10 ⁻⁵	0.502								
Co ²⁺	8.09x10 ⁻¹⁰	4.77x10 ⁻⁵	6.48x10 ⁻¹⁰	3.82x10 ⁻⁵	6.47x10 ⁻¹⁰	3.82x10 ⁻⁵	7.15x10 ⁻¹⁰	4.22x10 ⁻⁵	8.52x10 ⁻¹⁰	5.02x10 ⁻⁵
CoCl ⁺	1.52x10 ⁻¹⁴	1.44x10 ⁻⁹	1.75x10 ⁻¹⁴	1.65x10 ⁻⁹	1.19x10 ⁻¹⁴	1.12x10 ⁻⁹	1.36x10 ⁻¹⁴	1.28x10 ⁻⁹	1.81x10 ⁻¹⁴	1.71x10 ⁻⁹
CoO ⁰	4.76x10 ⁻¹⁶	3.57x10 ⁻¹¹	3.46x10 ⁻¹⁶	2.59x10 ⁻¹¹	2.15x10 ⁻¹⁶	1.61x10 ⁻¹¹	4.8x10 ⁻¹⁶	3.6x10 ⁻¹¹	4.74x10 ⁻¹⁶	3.55x10 ⁻¹¹
CoOH ⁺	9.05x10 ⁻¹⁴	6.88x10 ⁻⁹	6.91x10 ⁻¹⁴	5.25x10 ⁻⁹	5.24x10 ⁻¹⁴	3.98x10 ⁻⁹	8.37x10 ⁻¹⁴	6.36x10 ⁻⁹	9.91x10 ⁻¹⁴	7.53x10 ⁻⁹
Cr ₂ O ₇ ²⁻	7.61x10 ⁻¹⁷	1.64x10 ⁻¹¹	3.04x10 ⁻¹⁶	6.57x10 ⁻¹¹	2.47x10 ⁻¹⁶	5.34x10 ⁻¹¹	1.2x10 ⁻¹⁶	2.6x10 ⁻¹¹	1.5x10 ⁻¹⁶	3.25x10 ⁻¹¹
CrO ₄ ²⁻	7x10 ⁻⁹	8.12x10 ⁻⁴	9.45x10 ⁻⁹	1.1x10 ⁻³	9.7x10 ⁻⁹	1.13x10 ⁻³	9.38x10 ⁻⁹	1.09x10 ⁻³	9.23x10 ⁻⁹	1.07x10 ⁻³
Cu ⁺²	1.41x10 ⁻⁸	8.97x10 ⁻⁴	1.49x10 ⁻⁸	9.45x10 ⁻⁴	1.48x10 ⁻⁸	9.37x10 ⁻⁴	5.03x10 ⁻⁸	3.19x10 ⁻³	1.68x10 ⁻⁸	1.07x10 ⁻³
CuO ⁰	5.93x10 ⁻¹⁰	4.72x10 ⁻⁵	2.85x10 ⁻¹⁰	2.27x10 ⁻⁵	3.49x10 ⁻¹⁰	2.78x10 ⁻⁵	2.41x10 ⁻⁹	1.92x10 ⁻⁴	6.34x10 ⁻¹⁰	5.04x10 ⁻⁵
CuOH ⁺	6.95x10 ⁻¹⁰	5.6x10 ⁻⁵	4.92x10 ⁻¹⁰	3.96x10 ⁻⁵	5.42x10 ⁻¹⁰	4.37x10 ⁻⁵	2.62x10 ⁻⁹	2.11x10 ⁻⁴	7.74x10 ⁻¹⁰	6.24x10 ⁻⁵
Fe ²⁺	8.65x10 ⁻¹⁴	4.83x10 ⁻⁹	7.44x10 ⁻¹³	4.16x10 ⁻⁸	2.55x10 ⁻¹³	1.42x10 ⁻⁸	1.27x10 ⁻¹³	7.09x10 ⁻⁹	2.13x10 ⁻¹³	1.19x10 ⁻⁸
Fe ³⁺	4.4x10 ⁻¹²	2.46x10 ⁻⁷	1.82x10 ⁻¹¹	1.02x10 ⁻⁶	1.43x10 ⁻¹¹	7.97x10 ⁻⁷	4.74x10 ⁻¹²	2.65x10 ⁻⁷	5.97x10 ⁻¹²	3.33x10 ⁻⁷
FeO ₂ ⁻	3.38x10 ⁻⁷	2.97x10 ⁻²	3.08x10 ⁻⁷	0.027	3.48x10 ⁻⁷	3.06x10 ⁻²	4.92x10 ⁻⁷	4.32x10 ⁻²	3.87x10 ⁻⁷	0.034
FeOH ⁺	1.47x10 ⁻¹⁶	1.07x10 ⁻¹¹	8.52x10 ⁻¹⁶	6.21x10 ⁻¹¹	3.27x10 ⁻¹⁶	2.38x10 ⁻¹¹	2.3x10 ⁻¹⁶	1.67x10 ⁻¹¹	3.42x10 ⁻¹⁶	2.49x10 ⁻¹¹
FeOH ²⁺	1.12x10 ⁻⁷	8.14x10 ⁻³	3.13x10 ⁻⁷	2.28x10 ⁻²	2.72x10 ⁻⁷	1.98x10 ⁻²	1.29x10 ⁻⁷	9.37x10 ⁻³	1.44x10 ⁻⁷	1.05x10 ⁻²
H ₂ PO ₄ ⁻	2.78x10 ⁻⁷	0.027	2.8x10 ⁻⁷	2.72x10 ⁻²	3.55x10 ⁻⁷	3.45x10 ⁻²	3.66x10 ⁻⁷	3.55x10 ⁻²	1.26x10 ⁻⁶	0.122
H ₂ VO ₄ ⁻	6.93x10 ⁻⁹	8.1x10 ⁻⁴	8.14x10 ⁻⁹	9.52x10 ⁻⁴	8.03x10 ⁻⁹	9.39x10 ⁻⁴	7.93x10 ⁻⁹	9.27x10 ⁻⁴	8.64x10 ⁻⁹	1.01x10 ⁻³
H ₃ AsO ₄ ⁰	9.05x10 ⁻¹⁵	1.29x10 ⁻⁹	2.01x10 ⁻¹⁴	2.85x10 ⁻⁹	1.52x10 ⁻¹⁴	2.16x10 ⁻⁹	7.83x10 ⁻¹⁵	1.11x10 ⁻⁹	1.02x10 ⁻¹⁴	1.45x10 ⁻⁹
H ₃ PO ₄ ⁰	1.62x10 ⁻¹²	1.59x10 ⁻⁷	2.46x10 ⁻¹²	2.41x10 ⁻⁷	2.7x10 ⁻¹²	2.64x10 ⁻⁷	1.99x10 ⁻¹²	1.95x10 ⁻⁷	7.77x10 ⁻¹²	7.61x10 ⁻⁷
H ₃ VO ₄ ⁰	3.2x10 ⁻¹²	3.77x10 ⁻⁷	5.41x10 ⁻¹²	6.39x10 ⁻⁷	4.8x10 ⁻¹²	5.66x10 ⁻⁷	3.33x10 ⁻¹²	3.93x10 ⁻⁷	4.22x10 ⁻¹²	4.98x10 ⁻⁷
HAIO ₂ ⁰	6.76x10 ⁻⁹	4.05x10 ⁻⁴	1.1x10 ⁻⁷	6.59x10 ⁻³	2x10 ⁻⁷	0.012	1.74x10 ⁻⁷	1.04x10 ⁻²	1.01x10 ⁻⁷	6.03x10 ⁻³
HASO ₄ ²⁻	4.02x10 ⁻⁹	5.63x10 ⁻⁴								
HCO ₃ ⁻	1.12x10 ⁻³	68.4	1.16x10 ⁻³	71	1.15x10 ⁻³	70.3	1.13x10 ⁻³	69.3	1.09x10 ⁻³	66.3
HCrO ₄ ⁻	1.01x10 ⁻⁹	1.18x10 ⁻⁴	2.05x10 ⁻⁹	2.4x10 ⁻⁴	1.79x10 ⁻⁹	2.09x10 ⁻⁴	1.25x10 ⁻⁹	1.46x10 ⁻⁴	1.4x10 ⁻⁹	1.63x10 ⁻⁴
HCuO ₂ ⁻	2.44x10 ⁻¹⁶	2.36x10 ⁻¹¹	8.05x10 ⁻¹⁷	7.78x10 ⁻¹²	1.08x10 ⁻¹⁶	1.04x10 ⁻¹¹	1.07x10 ⁻¹⁵	1.03x10 ⁻¹⁰	2.5x10 ⁻¹⁶	2.41x10 ⁻¹¹
HMnO ₄ ⁻	1.06x10 ⁻¹¹	1.71x10 ⁻⁶	1.1x10 ⁻¹¹	1.78x10 ⁻⁶	9.75x10 ⁻¹²	1.57x10 ⁻⁶	7.67x10 ⁻¹²	1.23x10 ⁻⁶	1.08x10 ⁻¹¹	1.75x10 ⁻⁶
HPbO ₂ ⁻	1.48x10 ⁻¹⁸	3.57x10 ⁻¹³	0	0	0	0	0	0	4.75x10 ⁻¹³	1.39x10 ⁻¹⁸
HSO ₄ ⁻	1.03x10 ⁻¹⁰	9.97x10 ⁻⁶	1.59x10 ⁻¹⁰	1.54x10 ⁻⁵	1.34x10 ⁻¹⁰	1.3x10 ⁻⁵	9.64x10 ⁻¹¹	9.36x10 ⁻⁶	1.11x10 ⁻¹⁰	1.07x10 ⁻⁵
HSiO ₃ ⁻	1.13x10 ⁻⁷	8.69x10 ⁻³	1.4x10 ⁻⁷	1.08x10 ⁻²	1.25x10 ⁻⁷	9.67x10 ⁻³	1.71x10 ⁻⁷	1.32x10 ⁻²	1.21x10 ⁻⁷	9.34x10 ⁻³
HVO ₄ ²⁻	9.55x10 ⁻¹⁰	1.11x10 ⁻⁴	7.32x10 ⁻¹⁰	8.48x10 ⁻⁵	8.35x10 ⁻¹⁰	9.68x10 ⁻⁵	1.14x10 ⁻⁹	1.32x10 ⁻⁴	1.12x10 ⁻⁹	1.3x10 ⁻⁴
HZnO ₂ ⁻	2.23x10 ⁻¹⁵	2.19x10 ⁻¹⁰	5.76x10 ⁻¹⁶	5.67x10 ⁻¹¹	7.95x10 ⁻¹⁶	7.82x10 ⁻¹¹	2.29x10 ⁻¹⁵	2.25x10 ⁻¹⁰	1.61x10 ⁻¹⁵	1.59x10 ⁻¹⁰
Hg ²⁺	4.48x10 ⁻¹³	8.98x10 ⁻⁸	6x10 ⁻¹³	1.2x10 ⁻⁷	5.86x10 ⁻¹³	1.18x10 ⁻⁷	5.3x10 ⁻¹³	1.06x10 ⁻⁷	1.23x10 ⁻¹³	2.46x10 ⁻⁸
HgOH ⁺	1.25x10 ⁻⁹	2.72x10 ⁻⁴	1.25x10 ⁻⁹	2.72x10 ⁻⁴	1.25x10 ⁻⁹	2.72x10 ⁻⁴	1.6x10 ⁻⁹	3.48x10 ⁻⁴	4x10 ⁻¹⁰	8.71x10 ⁻⁵
K ⁺	2.4x10 ⁻⁵	0.939	3.4x10 ⁻⁵	1.33	3.15x10 ⁻⁵	1.23	2.98x10 ⁻⁵	1.17	2.5x10 ⁻⁵	0.979
KCl ⁰	4.83x10 ⁻¹³	3.6x10 ⁻⁸	6.97x10 ⁻¹³	5.2x10 ⁻⁸	6.26x10 ⁻¹³	4.67x10 ⁻⁸	6.04x10 ⁻¹³	4.51x10 ⁻⁸	5.08x10 ⁻¹³	3.79x10 ⁻⁸
KOH ⁰	2.11x10 ⁻¹³	1.18x10 ⁻⁸	2.03x10 ⁻¹³	1.14x10 ⁻⁸	2.08x10 ⁻¹³	1.17x10 ⁻⁸	2.8x10 ⁻¹³	1.57x10 ⁻⁸	2.09x10 ⁻¹³	1.17x10 ⁻⁸
KSO ₄ ⁰	6.28x10 ⁻⁹	8.48x10 ⁻⁴	9.11x10 ⁻⁹	1.23x10 ⁻³	8.25x10 ⁻⁹	1.12x10 ⁻³	7.83x10 ⁻⁹	1.06x10 ⁻³	6.66x10 ⁻⁹	9x10 ⁻⁴
MgCO ₃ ⁰	4.99x10 ⁻⁸	4.21x10 ⁻³	3.44x10 ⁻⁸	2.9x10 ⁻³	3.89x10 ⁻⁸	3.28x10 ⁻³	5.35x10 ⁻⁸	4.51x10 ⁻³	4.56x10 ⁻⁸	3.84x10 ⁻³
Mg(HCO ₃) ⁺	1.43x10 ⁻⁶	0.122	1.49x10 ⁻⁶	0.127	1.46x10 ⁻⁶	0.125	1.45x10 ⁻⁶	0.124	1.39x10 ⁻⁶	0.119
MgHSiO ₃ ⁺	2.7x10 ⁻¹⁰	2.74x10 ⁻⁵	3.35x10 ⁻¹⁰	3.4x10 ⁻⁵	2.99x10 ⁻¹⁰	3.03x10 ⁻⁵	4.1x10 ⁻¹⁰	4.15x10 ⁻⁵	2.91x10 ⁻¹⁰	2.95x10 ⁻⁵
Mg ²⁺	1.35x10 ⁻⁴	3.28								
MgCl ⁺	1.22x10 ⁻⁹	7.32x10 ⁻⁵	1.23x10 ⁻⁹	7.33x10 ⁻⁵	1.22x10 ⁻⁹	7.28x10 ⁻⁵	1.22x10 ⁻⁹	7.32x10 ⁻⁵	1.23x10 ⁻⁹	7.33x10 ⁻⁵
MgOH ⁺	6.66x10 ⁻¹⁰	2.75x10 ⁻⁵	4.6x10 ⁻¹⁰	1.9x10 ⁻⁵	4.97x10 ⁻¹⁰	2.05x10 ⁻⁵	7.2x10 ⁻¹⁰	2.98x10 ⁻⁵	6.42x10 ⁻¹⁰	2.65x10 ⁻⁵
Mn ²⁺	2.46x10 ⁻⁸	1.35x10 ⁻³	2.19x10 ⁻⁸	1.2x10 ⁻³	2.19x10 ⁻⁸	1.2x10 ⁻³	2.19x10 ⁻⁸	1.2x10 ⁻³	2.92x10 ⁻⁸	1.6x10 ⁻³
MnCl ⁺	1.27x10 ⁻¹³	1.15x10 ⁻⁸	1.1x10 ⁻¹³	9.94x10 ⁻⁹	1.11x10					

RbOH ⁰	1.36x10 ⁻¹⁶	1.39x10 ⁻¹¹	3.71x10 ⁻¹⁷	3.8x10 ⁻¹²	4.11x10 ⁻¹⁷	4.21x10 ⁻¹²	6.95x10 ⁻¹⁷	7.12x10 ⁻¹²	6.31x10 ⁻¹⁷	6.47x10 ⁻¹²
SO ₄ ²⁻	4.22x10 ⁻⁵	4.05	4.29x10 ⁻⁵	4.12	4.26x10 ⁻⁵	4.09	4.22x10 ⁻⁵	4.05	4.28x10 ⁻⁵	4.11
SiO ₂ ⁰	3.16x10 ⁻⁵	1.9	5.99x10 ⁻⁵	3.6	4.55x10 ⁻⁵	2.73	4.54x10 ⁻⁵	2.73	3.64x10 ⁻⁵	2.18
SrHCO ₃ ⁺	1.16x10 ⁻⁸	1.72x10 ⁻³	2.85x10 ⁻⁸	4.24x10 ⁻³	2.77x10 ⁻⁸	4.11x10 ⁻³	2.91x10 ⁻⁸	4.33x10 ⁻³	2.79x10 ⁻⁸	4.15x10 ⁻³
Sr+2	1.26x10 ⁻⁶	0.11	2.95x10 ⁻⁶	0.259	2.95x10 ⁻⁶	0.259	3.11x10 ⁻⁶	0.273	3.11x10 ⁻⁶	0.273
SrCO ₃₀	2.67x10 ⁻¹⁰	3.94x10 ⁻⁵	4.33x10 ⁻¹⁰	6.39x10 ⁻⁵	4.89x10 ⁻¹⁰	7.22x10 ⁻⁵	7.08x10 ⁻¹⁰	1.05x10 ⁻⁴	6.03x10 ⁻¹⁰	8.91x10 ⁻⁵
SrCl+	7.08x10 ⁻¹²	8.71x10 ⁻⁷	1.67x10 ⁻¹¹	2.06x10 ⁻⁶	1.65x10 ⁻¹¹	2.03x10 ⁻⁶	1.75x10 ⁻¹¹	2.16x10 ⁻⁶	1.76x10 ⁻¹¹	2.16x10 ⁻⁶
SrOH+	7.6x10 ⁻¹⁴	7.96x10 ⁻⁹	1.24x10 ⁻¹³	1.3x10 ⁻⁸	1.33x10 ⁻¹³	1.39x10 ⁻⁸	2.03x10 ⁻¹³	2.13x10 ⁻⁸	1.82x10 ⁻¹³	1.9x10 ⁻⁸
UO ₂₂ +	5.14x10 ⁻¹³	1.39x10 ⁻⁷	9.45x10 ⁻¹³	2.55x10 ⁻⁷	8.43x10 ⁻¹³	2.28x10 ⁻⁷	4.91x10 ⁻¹³	1.32x10 ⁻⁷	5.93x10 ⁻¹³	1.6x10 ⁻⁷
UO ₃₀	1.69x10 ⁻⁹	4.83x10 ⁻⁴	1.69x10 ⁻⁹	4.83x10 ⁻⁴	1.69x10 ⁻⁹	4.82x10 ⁻⁴	1.94x10 ⁻⁹	5.55x10 ⁻⁴	1.94x10 ⁻⁹	5.55x10 ⁻⁴
VO ₂ +	9.8x10 ⁻¹⁶	8.13x10 ⁻¹¹	2.46x10 ⁻¹⁵	2.04x10 ⁻¹⁰	1.94x10 ⁻¹⁵	1.61x10 ⁻¹⁰	9.51x10 ⁻¹⁶	7.89x10 ⁻¹¹	1.35x10 ⁻¹⁵	1.12x10 ⁻¹⁰
VO ₄ -3	5.23x10 ⁻¹⁶	6.01x10 ⁻¹¹	2.66x10 ⁻¹⁶	3.06x10 ⁻¹¹	3.51x10 ⁻¹⁶	4.03x10 ⁻¹¹	6.6x10 ⁻¹⁶	7.59x10 ⁻¹¹	5.76x10 ⁻¹⁶	6.62x10 ⁻¹¹
Zn+2	1.11x10 ⁻⁷	7.27x10 ⁻³	9.23x10 ⁻⁸	6.03x10 ⁻³	9.21x10 ⁻⁸	6.02x10 ⁻³	9.29x10 ⁻⁸	6.08x10 ⁻³	9.32x10 ⁻⁸	6.09x10 ⁻³
ZnCl+	5.75x10 ⁻¹³	5.8x10 ⁻⁸	4.84x10 ⁻¹³	4.88x10 ⁻⁸	4.69x10 ⁻¹³	4.73x10 ⁻⁸	4.79x10 ⁻¹³	4.84x10 ⁻⁸	4.82x10 ⁻¹³	4.86x10 ⁻⁸
ZnCl ₂₀	1.3x10 ⁻¹⁷	1.77x10 ⁻¹²	1.1x10 ⁻¹⁷	1.5x10 ⁻¹²	1.06x10 ⁻¹⁷	1.44x10 ⁻¹²	1.09x10 ⁻¹⁷	1.48x10 ⁻¹²	1.09x10 ⁻¹⁷	1.49x10 ⁻¹²
ZnO0	1.19x10 ⁻¹²	9.72x10 ⁻⁸	4.59x10 ⁻¹³	3.73x10 ⁻⁸	5.59x10 ⁻¹³	4.55x10 ⁻⁸	1.14x10 ⁻¹²	9.3x10 ⁻⁸	9.07x10 ⁻¹³	7.38x10 ⁻⁸
ZnOH+	2.54x10 ⁻⁹	2.09x10 ⁻⁴	1.45x10 ⁻⁹	1.2x10 ⁻⁴	1.57x10 ⁻⁹	1.29x10 ⁻⁴	2.28x10 ⁻⁹	1.88x10 ⁻⁴	2.04x10 ⁻⁹	1.68x10 ⁻⁴
OH-	3.45x10 ⁻⁸	5.86x10 ⁻⁴	2.31x10 ⁻⁸	3.92x10 ⁻⁴	2.62x10 ⁻⁸	4.46x10 ⁻⁴	3.65x10 ⁻⁸	6.2x10 ⁻⁴	3.25x10 ⁻⁸	5.53x10 ⁻⁴
H+	5.48x10 ⁻⁸	5.52x10 ⁻⁵	8.09x10 ⁻⁸	8.16x10 ⁻⁵	7.22x10 ⁻⁸	7.28x10 ⁻⁵	5.06x10 ⁻⁸	5.11x10 ⁻⁵	5.73x10 ⁻⁸	5.77x10 ⁻⁵
H ₂ O	55.5	1	55.5	1	55.5	1	55.5	1	55.5	1
Взвесь										
SiO ₂	0	0	8.40x10 ⁻⁶	0.505	0	0	0	0	0	0
Минерал изация, мг/кг	99.52		105.52		103.95		102.49		98.01	
pH	7.28		7.11		7.16		7.32		7.26	
Eh, вольт	0.82		0.80		0.82		0.81		0.80	
T ⁰ С	3.43		3.6		3.3		3.4		3.47	
P, бар	55.17		26.4		67.59		34.91		35.87	

Несмотря на то, что Байкал – ультрапресное озеро, оно имеет большой диапазон содержаний химических компонентов, и этот диапазон индивидуален для каждого резервуара и систем в этих резервуарах (поверхностных, прибрежных, глубинных, придонных вод, донных отложений). Рассчитанные химические равновесные модели глубинных вод пяти резервуаров оз. Байкал показали (табл. 1, 2), что характеристики геохимических сред – общая минерализация, характеристики кислотно-основных и окислительно-восстановительных состояний, а также концентрации форм нахождения компонентов – в этих водах являются индивидуальными для каждого резервуара.

Литература

Астраханцева О.Ю. Принципы создания модели «Мегасистема «Оз. Байкал», база данных // Проблемы земной цивилизации. Сборник статей «Поиск решения проблем выживания и безопасности Земной цивилизации». Вып.6, ч.1. – Иркутск, ASPrint, 2002. С. 72-121.

Астраханцева О.Ю. База данных химического состава вод и потоков оз. Байкал // Экосистемы и природные ресурсы горных стран. Материалы Первого Междунар. симпоз. «Байкал. Современное состояние поверхности и подземной гидросферы горных стран». – Новосибирск: Наука. 2004. С. 233-260.

Johnson J.W., Oelkers E.H., Helgeson H.C. SUPCRT 92: A software package for calculating the standard thermodynamic properties of minerals, gases, aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bars and 0° to 1000°C // Computers and Geosciences. 1992. V. 18. № 7. P. 899-947.

Karpov I.K., Chudnenko K.V., Kulik D.A. Modeling chemical mass transfer in geochemical processes: Thermodynamic relations, conditions of equilibria and numerical algorithms. // [American Journal of Science](#). 1997. V. 297. № 8. P. 767-806.

Tanger J.C.IV, Helgeson H.C. Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Revised equations of state for standard partial molal properties of ions and electrolytes // [American Journal of Science](#). 1988. V. 288. № 1. P. 19-98.