

УДК 550.4(571.54)

Усманов Марат Тимурович
Marat Usmanov



ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ ВОДА-ПОРОДА НА ПРИМЕРЕ ДРЕНАЖНЫХ ВОД УДОКАНСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ МЕДИ

THERMODYNAMIC MODELING OF WATER-ROCK SYSTEM ON THE EXAMPLE OF THE DRAINAGE WATER UDOKAN COPPER DEPOSIT

В настоящее время на севере Забайкальского края готовится к отработке одно из крупнейших в мире Удоканское месторождение меди. В связи с этим важным становится вопрос изучения возможных экологических последствий деятельности горно-го производства. На основе аналитических данных о составе дренажных вод существующих разведочных выработок Удоканского месторождения и полученных из литературных источников данных о составе руд и вмещающих пород проведено термодинамическое моделирование системы «вода-порода» с целью установления экологической опасности дренажа рудничных вод

Ключевые слова: термодинамическое моделирование, Удокан, месторождение меди, экология

Currently in northern Transbaikalian territory one of the world's largest copper deposits Udokan is prepared for working out. In this regard, the study of possible environmental impacts of mining has become an important question. In this article the author, on the basis of analytical data of drainage waters composition of existing exploratory workings of Udokan and the obtained literature data on the composition of ore and host rock, holds thermodynamic modeling of a water-rock system in order to establish environmental hazard mine water drainage

Key words: thermodynamic modeling, Udokan copper deposit, ecology

Климат района размещения месторождения резко континентальный, характеризующийся значительной контрастностью, связанной с особыми условиями циркуляции атмосферы и радиационным режимом в условиях высокогорного рельефа. Его особенностями являются низкие среднегодовые температуры воздуха, продолжительный зимний период, значительное количество атмосферных осадков и активная солнечная радиация (Железняк И.И., Мальчикова И.Ю., 1992).

Удоканское месторождение медистых песчаников расположено в центральной

части Кодаро-Удоканской структурно-фациальной зоны и приурочено к Намингинской брахисинклинали. В пределах зоны распространены архейские, протерозойские, нижнепалеозойские, мезозойские и четвертичные отложения (Кренделев Ф.П., Бакун Н.Н. и др., 1983).

Рудоносный горизонт месторождения залегает согласно с напластованием вмещающих пород. По минеральному составу в рудах из сульфидов преобладают борнит (Cu_5FeS_4), халькозин (Cu_2S), реже халькопирит (CuFeS_2) и пирит (FeS_2), из гипергенных минералов — суль-

фаты (брошантит ($\text{Cu}_4((\text{OH})_6|\text{SO}_4)$), антлерит ($\text{Cu}_3((\text{OH})_4|\text{SO}_4)$), халькантит ($\text{Cu}(\text{SO}_4) \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) и карбонаты (малахит ($\text{Cu}_2((\text{OH})_2\text{CO}_3)$), азурит ($\text{Cu}_3(\text{OH}|\text{CO}_3)_2$)) меди. Реже встречаются тенорит (CuO), самородная медь, мелантерит ($\text{Fe}(\text{SO}_4) \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) и др. В зависимости от минеральных форм меди выделяются халькозин-борнитовые, халькопирит-пирротиновые и брошантит-малахитовые руды (Чечеткин В.С., Володин Р.Н. и др., 1995). Общая мощность зоны окисления (древняя и современная) на Удоканском месторождении составляет сотни метров, достигая в зонах тектонических нарушений 800 м (Наркелюн Л.Ф., Трубачев А.И. и др., 1987).

Месторождение расположено в зоне сплошного распространения многолетней мерзлоты, достигающей 1200 м. Небольшая мощность сезонно-талого слоя, грубообломочный состав пород определяют высокие скорости водообмена на склонах и аккумуляцию химических веществ в местах перегибов рельефа (гидродинамический барьер).

В настоящее время существует большое количество компьютерных программ термодинамического моделирования. В

данном случае моделирование системы «вода-порода» выполнено автором в среде программного комплекса Selektor. На начальном этапе разработки модели в программном комплексе Selektor возникла проблема неполноты данных по ряду водных и минеральных форм в связи с чем недостающие данные конвертированы автором из баз программы Hydrogeo 32 (Букаты, 1995, 2002).

Термодинамическая модель миграции и современного минерагеза меди (рис. 1) построена на основе следующих исходных данных: усредненный состав руд и вмещающих пород, принятый по (Юргенсон, 1996); состав вод водотоков дренирующих месторождения, получены в лаборатории геоэкологии и гидрогеохимии ИПРЭК СО РАН.

Модель построена по типу проточного реактора, состоящего из пяти резервуаров, на всем протяжении модель открыта по отношению к атмосферному воздуху, подвижной фазой является водный раствор. В модели рассматривается взаимодействие штольневых вод и рудных обломков в штольне с последующей инфильтрацией через безрудный отвал → выход рудного тела → безрудную толщу.



Рис. 1. Схема термодинамической модели миграции и минерагеза меди

С целью приближения модели к реальным условиям криогенного минералообразования часть минералов объединена в твердофазные растворы (сметиты, хлориты, карбонаты и т.п.). Параллельно компьютерному моделированию автором проводился расчет указанной системы по произведениям активности с использованием справочных данных (Лурье, 1979; Наумов и др., 1971)

В работе (Юргенсон Г.А., 1996) выдвигался тезис о том, что формирование карбонатов меди в зоне гипергенеза рас-

сматриваемых месторождений происходило в доледниковый период. Однако результаты термодинамических расчетов указывают на возможность образования в водах потоков рассеяния рудных тел малахита и азурита, что также подтверждается полевыми наблюдениями. Также можно сделать вывод о термодинамической обусловленности образования гидратной формы брошантита (криогенного брошантита, Юргенсон, 1973). Минеральные формы «высаженные» из раствора в каждом из резервуаров приведены в таблице.

Минералы, выпадающие из раствора в резервуарах модели

Номер резервуара	Резервуар 1	Резервуар 2	Резервуар 3	Резервуар 4	Резервуар 5
Минерал, Формула	Кол-во, моль				
SiO ₂	0,812	0,773692	0,771918	0,775962	0,773584
Fe ₂ O ₃			7,56E-08		
FeO(OH)	0,015241	0,014584	0,015241	0,014584	0,014584
NaAlSi ₃ O ₈	0,029673	0,049227	0,050214	0,048103	0,049307
Иллиты:					
KMg ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	4,22E-05	0,000154	0,00017	0,000185	0,000187
NaMg ₃ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	2,16E-07	5,8E-07	6,91E-07	5,46E-07	5,15E-07
KAl ₂ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	0,080661	0,075698	0,075823	0,076693	0,076465
Al ₂ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	0,000148	0,000103	8,8E-05	8,15E-05	7,56E-05
Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	0,006336	0,004412	0,003742	0,003491	0,003237
Сметиты:					
CaAl ₂ Al ₂ Si ₂ O ₁₀ (OH) ₂	2E-12	–	–	–	–
KAl ₂ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	0,000267	1,1E-05	8,51E-06	9,09E-06	8,48E-06
NaAl ₂ AlSi ₃ O ₁₀ (OH) ₂	2,32E-05	7,08E-07	4,9E-07	4,57E-07	3,97E-07
Al ₂ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	4,9E-07	1,5E-08	1,02E-08	9,66E-09	8,38E-09
Mg ₃ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	3,64E-07	4,31E-08	3,96E-08	3,3E-08	2,91E-08
KMg ₂ Al ₃ Si ₂ O ₁₀ (OH) ₂	2,59E-09	2,18E-10	1,71E-10	1,73E-10	1,56E-10
Карбонаты:					
CaCO ₃	0,165354	0,118296	0,118331	0,118378	0,118386
MgCO ₃	0,00041	0,000373	0,000359	0,000363	0,000362
CaMg(CO ₃) ₂	0,00346	0,00313	0,003096	0,003047	0,003041
Карбонаты меди:					
Cu ₃ (CO ₃) ₂ (OH) ₂	8,99E-10	–	2,58E-09		
Cu ₂ CO ₃ (OH) ₂	0,001184	5,43E-09	0,003531		
Гидро брошантит					
Cu ₂ SO ₄ (OH) ₆ (H ₂ O) _{1,65}	0,009182		0,006712		

Распределение форм миграции меди в водном растворе в целом соответствует рассчитанным по константам устойчивости, однако отмечаются некоторые отличия. Это связано с тем, что в процессе модели-

рования в каждом резервуаре достигается локальное равновесие системы «вода-порода», тогда как реальный водный поток неравновесен, к тому же в модели невозможно учесть все факторы, существую-

щие в природных условиях. На фоне общего снижения доли растворенных форм меди по потоку относительное содержание $\text{Cu}(\text{OH})_4^{2-}$ и $\text{Cu}(\text{CO}_3)_2^{2-}$ возрастает. Обнару-

жено, что происходит изменение содержания $\text{Cu}(\text{CO}_3)_2^{2-}$ и $\text{Cu}(\text{CO}_3)_0$ в зависимости от присутствия в исходном составе резервуаров рудных минералов (рис. 2).

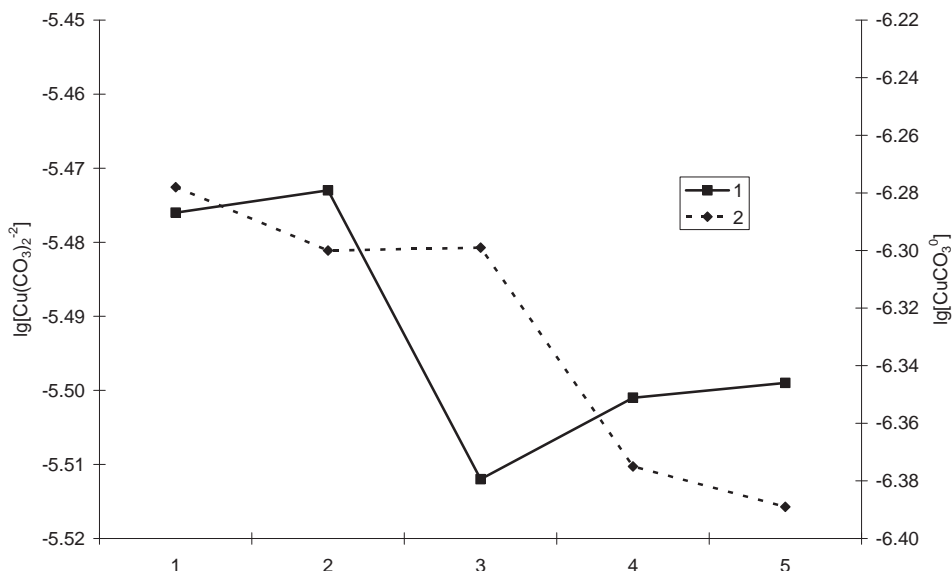


Рис. 2. Содержания форм $\text{Cu}(\text{CO}_3)_2^{2-}$ и $\text{Cu}(\text{CO}_3)_0$. 1 – $\lg[\text{Cu}(\text{CO}_3)_2^{2-}]$; 2 – $\lg[\text{Cu}(\text{CO}_3)_0]$

Необходимо отметить, что полученные данные по вторичным минеральным фазам хорошо соответствуют реальной обстановке в зоне гипергенеза рассматриваемых месторождений. Это позволяет сделать вывод об адекватности модели природной обстановке.

Если в первом резервуаре содержания меди в воде составляют более 5,6 мг/л, а показатель pH около 5, то в резервуарах 4

и 5 концентрации меди в водном растворе снижаются до первых микрограмм, а pH становится околонейтральным. Таким образом, можно сделать вывод о том, что на пути миграции кислых дренажных вод в условиях Удоканского месторождения существует естественный карбонатный геохимический барьер, существенно снижающий экологические риски при отработке месторождения.

Литература

1. Букаты М.Б. Механизмы формирования рудопроявлений стронция в пределах западной части Сибирской платформы // Геология и геофизика, 1995, т. 36, № 2. С. 105-114.
2. Букаты М.Б. Разработка программного обеспечения для решения гидрогеологических задач. // Известия ТПУ. 2002. Т. 305. Вып. 8. С. 348-365.
3. Бычинский В.А., Исаев В.П., Тупицын А.А. Физико-химическое моделирование в нефтегазовой геохимии. Иркутск: Иркут. ун-т, 2004, 158 с.

References

1. Bukaty M.B. *Geologiya i geofizika* (Geology and geophysics), 1995, Vol 36, no 2. P. 105-114.
2. Bukaty M.B. *Izvestiya TPU*. (Proceedings of the TPU). 2002. Vol. 305. Issue. 8. P. 348-365.
3. Bychinsky V.A., Isaev V.P., Tupitsyn A.A. *Fiziko-himicheskoe modelirovanie v neftegazovoy geohimii* (Physico-chemical modeling in petroleum geochemistry). Irkutsk: Irkut.univ-ty, 2004, 158 p.

4. Железняк И.И., Мальчикова И.Ю., Шполянская Н.А., Янушаускас А.И. Курумы Северного Забайкалья. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1992. 182 с.
5. Замана Л.В., Усманов М.Т. Термодинамические и гидрогеохимические условия образования кристаллогидратного брошантита (на примере Удоканского месторождения меди) // Доклады Академии наук. 2007. Т. 413. № 1. С. 82-85.
6. Крайнов С.Р. Анализ соответствия результатов термодинамического моделирования формирования химического состава подземных вод реальным геохимическим свойствам этих вод // Геохимия, 1997, № 7 С. 730-749.
7. Кренделев Ф.П., Бакун Н.Н., Володин Р.Н. Медистые песчаники Удокана. М.: Наука, 1983, 248 с.
8. Лурье Ю.Ю. Справочник по аналитической химии. М.: Химия, 1979, 480 с.
9. Наркелюн Л.Ф., Трубачев А.И., Салихов В.С. и др. Окисленные руды Удокана. Новосибирск: Наука, 1987 102 с.
10. Четкин В.С., Володин Р.Н., Наркелюн Л.Ф. и др. Удоканское месторождение медистых песчаников // Месторождения Забайкалья. М.: Геоинформмарк, 1995. Т. 1, кн. 1. С. 10-19.
11. Юргенсон Г.А. О необычных брошантитах Удоканского месторождения // Зап. Всесоюз. минералог. о-ва. 1973, Вып. 1. С. 103-106.
12. Юргенсон Г.А. Особенности минералогии и формирования зоны окисления в условиях многолетнемерзлых пород // Проблемы рудообразования, поисков и оценки минерального сырья. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1996, С. 127-160.
4. Zheleznyak I.I., Malchikova I.Yu., Shpolyanskaya N.A., Yanushauskas A.I. *Kurумы Severnogo Zabaikaliya*. (Kurums of the northern Transbaikalie). Novosibirsk: Nauka. Sib. branch, 1992. 182 p.
5. Zamana L.V., Usmanov M.T. *Doklady Akademii nauk*. (Reports of the Academy of Sciences) 2007. Vol. 413. no 1. P. 82-85.
6. Krainov S.R. *Geohimiya* (Geochemistry). 1997, no 7. P. 730-749.
7. Krendelev F.P., Bakun N.N., Volodin R.N. *Medistye peschaniki Udokana* (Udokan copper sandstones). Moscow: Nauka, 1983, 248 p.
8. Lurie Yu.Yu. *Spravochnik po analiticheskoy himii* (Reference book in analytical chemistry). Moscow: Khimiya, 1979, 480 p.
9. Narkelyun L.F., Trubachev A.I., Salihov V.S. i dr. *Okislennye rudy Udokana* (Oxidized ores of Udokan). Novosibirsk: Nauka, 1987. 102 p.
10. Chechetkin V.S., Volodin R.N., Narkelyun L.F. i dr. *Mestorozhdeniya Zabaikaliya*. (Deposits of Transbaikalie). Moscow: Geoinformmark, 1995. Vol. 1, Vol. 1. P. 10-19.
11. Yurgenson G.A. *Zap. Vsesoyuz. mineralog. o-va*. (Notes of All-Russian mineralogical society). 1973, vol. 1. P. 103-106.
12. Yurgenson G.A. *Problemy rudoobrazovaniya, poiskov i otsenki mineralnogo syriya*. (Problems of mineralization, exploration and evaluation of mineral resources). Novosibirsk: Publishing House of SB RAS, 1996, P. 127-160.

Коротко об авторе

Briefly about the author

Усманов М.Т., научный сотрудник лаборатории геоэкологии и гидрогеохимии ИПРЭК СО РАН, г. Чита, РФ
usgi@yandex.ru

M. Usmanov, researcher, Laboratory of Geoecology and Hydrogeochemistry INREC SB RAS, Chita, Russia

Научные интересы: гидрогеохимия, моделирование, ГИС системы

Scientific interests: hydrogeochemistry, modeling, GIS system

