

Термодинамическое моделирование форм нахождения микроэлементов в поверхностных водах рек Богачуха и Уруп (Карачаево-Черкесская республика).

Громова В.А.¹, Липатникова О.А.²

*1 - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, 2 - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, Москва, Россия
E-mail: leragro@gmail.com*

Процессы миграции элементов и их распределение при взаимодействии воды и пород невозможно правильно интерпретировать и прогнозировать, не зная их миграционных форм в водах [1,2].

Объектом исследования являлись поверхностные воды вышедшего из эксплуатации хвостохранилища Урупского горно-обогатительного комбината по переработке медно-колчеданных руд, а также воды рек Богачуха и Уруп, расположенных в непосредственной близости от него. Воды были проанализированы на макрокомпонентный (методами объемного титрования) и микрокомпонентный (методом ИСП-МС) состав на кафедре геохимии МГУ. Полученные аналитические данные использовались в качестве исходных при термодинамическом моделировании форм нахождения микроэлементов.

Моделируемая система включала 16 независимых компонентов – 14 химических элементов (Н, О, Са, Mg, Na, С, S, Cl, Fe, Mn, Zn, Cu, Pb, Cd) и 2 квазиэлемента (гуминовую кислоту, Hu, и фульвокислоту, Fu). Набор растворенных частиц в расчетах включал 89 простых ионов и комплексов, среди которых 70 неорганических и 19 органических комплексов. Для более точного регулирования рН система была открыта по CO_2 . Источником термодинамических данных служила база данных UNITERM (кафедра геохимии МГУ), дополненная данными для органических комплексов металлов. Расчеты равновесного состава системы выполнялись с помощью пакета программ термодинамического моделирования HCh v.4.3 [3], в которой в качестве критерия равновесия используется минимум свободной энергии Гиббса системы.

Результаты расчетов распределения форм нахождения металлов показывают, что в зависимости от преобладающих форм микроэлементов (Cd, Zn, Pb, Cu) пробы можно разделить на 2 группы: 1 группа – незагрязненные воды рек Богачуха и Уруп, 2 группа – воды, испытывающие влияние хвостохранилища. Основной формой нахождения для кадмия в первой группе является свободный ион (90%). Для второй группы заметную роль начинает играть сульфатный комплекс CdSO_4^0 (20-40%). Доминирующей формой нахождения свинца в незагрязненных водах является карбонатный комплекс PbCO_3^0 (96%), в то время как для хвостохранилища характерны сульфатный комплекс PbSO_4^0 (до 55%) и свободный ион (до 45%). Цинк в основном находится в виде свободного иона (54-100%). Вторым по значимости является гидроксокомплекс ZnOH^+ , содержание которого в водах хвостохранилища не превышает 10%, а в незагрязненных водах может достигать 40%. Для незагрязненных вод первой группы преобладающими формами меди являются CuCO_3^0 (70%) для вод р. Богачуха и фульватный CuFu^0 (90%) для вод р. Уруп. Содержание наиболее токсичных форм Cu^{2+} и CuOH^+ не превышает 8%, тогда

как в пробах воды из хвостохранилища медь в основном находится в виде свободного иона (70%) и сульфатного комплекса CuSO_4^0 (30%).

Полученное в результате моделирования распределение форм нахождения микро-элементов в незагрязненных поверхностных водах согласуется с ранее опубликованными данными по природным водам [2]. Распределение форм нахождения в пробах из хвостохранилища и в водах, подверженных его непосредственному влиянию отличается.

Литература

1. Крайнов С.Р., Рыженко Б.Н., Швец В.М. Геохимия подземных вод. Теоретические, прикладные и экологические аспекты. М., Наука, 2004, 667 с.
2. Линник П.Н., Набиванец Б.И. Формы миграции металлов в пресных поверхностных водах. Л., Гидрометеиздат, 1986, 270 с.
3. Шваров Ю.В. HCh: новые возможности термодинамического моделирования геохимических систем, предоставляемые Windows // Геохимия. 2008. № 8. С. 898–903.

Слова благодарности

Авторы выражают благодарность Шестаковой Т.В. за помощь в проведении аналитических исследований.