

广西大厂锌离子浓度变化的数值模拟分析

刘尧 孙杰华 潘勇

1. 桂林旅游学院旅游数据学院, 中国·广西 桂林 541006
2. 广西文化和旅游智慧技术重点实验室, 中国·广西 桂林 541006

摘要: 本研究针对广西大厂地区锌离子浓度变化展开数值模拟分析, 重点关注其与温度和压力变化的关系。数据来源于吉林大学地下水资源与环境教育部重点实验室给出的 TOUGHREACT 温度和压力变化数值模拟计算得出的结果。经过对模型参数的精心设定与校准, 确保模拟结果具有较高的准确性和可靠性。研究发现, 温度升高会加速锌离子的化学反应速率, 从而影响其浓度变化。而压力的改变则可能影响流体的流动特性, 进而间接影响锌离子的分布。本研究通过深入分析广西大厂锌离子浓度变化与温度和压力的关系, 为隐伏矿体形成机制研究提供一定的科学依据。
关键词: 锌离子浓度; 数值模拟; 温度; 压力; 形成机制

Numerical Simulation Analysis of Zinc Ion Concentration Changes in Guangxi Dachang

Yao Liu Jiehua Sun Yong Pan

1. School of Tourism Data, Guilin Tourism University, Guilin, Guangxi, 541006, China
2. Guangxi Key Laboratory of Culture and Tourism Smart Technology, Guilin, Guangxi, 541006, China

Abstract: This study conducts numerical simulation analysis on the changes in zinc ion concentration in the Dachang area of Guangxi, with a focus on its relationship with temperature and pressure changes. The data is sourced from the numerical simulation results of temperature and pressure changes in TOUGHREACT provided by the Key Laboratory of Groundwater Resources and Environment of Jilin University, Ministry of Education. After careful setting and calibration of model parameters, the simulation results are ensured to have high accuracy and reliability. Research has found that an increase in temperature accelerates the chemical reaction rate of zinc ions, thereby affecting their concentration changes. The change in pressure may affect the flow characteristics of the fluid, indirectly affecting the distribution of zinc ions. This study provides a scientific basis for the study of the formation mechanism of concealed ore bodies by analyzing in depth the relationship between changes in zinc ion concentration and temperature and pressure in Dachang, Guangxi.

Keywords: zinc ion concentration; numerical simulation; temperature; pressure; formation mechanism

0 前言

广西大厂矿田, 作为中国重要的有色金属矿产资源基地之一, 其丰富的锌矿资源在国民经济发展中占据着举足轻重的地位。然而, 随着矿业开发的不断推进, 对环境的影响也日益凸显, 其中锌离子浓度的变化成为一个备受关注的课题。锌离子浓度的变化不仅关系到矿产资源的有效利用, 还与生态环境的保护息息相关。为了更好地理解和掌握广西大厂矿区锌离子浓度变化的规律, 开展数值模拟分析显得尤为重要^[1]。特别是从温度和压力变化方面进行深入研究, 将为该地区的矿产开发和环境保护提供科学依据。

温度是影响化学反应速率和物质溶解度的重要因素之一。在广西大厂地区, 温度的变化可能会对锌离子的浓度产生显著影响。一般来说, 温度升高会加快化学反应速率, 使得锌矿物的溶解速度加快, 从而导致锌离子浓度升高。此外, 温度升高还会影响水体的物理性质, 如密度、粘度等, 进而影响锌离子的迁移和扩散过程^[2]。

压力也是影响物质状态和化学反应的重要因素之一。

在广西大厂地区, 压力的变化可能会对锌离子的浓度产生复杂的影响。一方面, 压力升高可能会使矿物中的孔隙度减小, 从而限制了锌离子的释放和迁移。另一方面, 压力升高也可能促进化学反应的进行, 使锌离子与其他离子结合形成更稳定的矿物。

论文开展广西大厂矿区锌离子浓度变化的数值模拟分析, 特别是从温度和压力变化方面进行深入研究, 具有重要的理论意义和实际应用价值。通过数值模拟分析, 我们可以更好地理解锌离子浓度变化的规律, 为矿产资源的可持续开发和生态环境的保护提供科学依据。

1 矿床地质背景

广西大厂矿区地处华南褶皱系的西南部, 地质构造复杂。从地层上看, 大厂矿区地层发育较为齐全, 不过与成矿关系密切的地层主要有泥盆系、石炭系和二叠系。其中, 泥盆系地层以碳酸盐岩为主, 夹有少量碎屑岩^[3]。碳酸盐岩是很多有色金属矿床形成的主要聚集地, 经常参与多种金属矿

物沉淀的化学反应，给金属矿床的形成提供必要的成矿化学反应场所和容矿空间。广西大厂矿区褶皱和破碎带发育比较丰富，这些地质作用使得矿区有众多裂隙和破碎带，是含矿热液运移和沉淀的主要空间要道^[4]。这些岩石裂隙是探索和研究广西大厂成矿机制的重要线索，在断裂带附近，常伴随着一定规模的有色金属矿床。在矿区中同样发现了丰富的花岗岩，这些岩石恰好证明岩浆岩侵入的位置，岩浆岩的侵入活动为矿区矿产的形成提供了热源和物质来源，是热液型矿床研究的主要依据^[5]。

广西大厂矿田除了锡矿和铋矿储量非常丰富之外，锌矿的含量也十分富足。广西大厂矿区的地质、构造、岩浆岩等地质条件为矿产资源的形成提供了有利的背景。了解大厂矿区的地质背景，对于锌矿床形成机制的深度理解，合理开发利用矿产资源、保护生态环境以及推动矿业经济的可持续发展具有重要意义。

2 数值模拟计算方法

论文主要侧重于通过数值模拟计算的方法，从温度和压力变化对广西大厂矿区锌矿床形成过程中 Zn^{+2} 浓度随温度和压力变化的发展趋势，传统的地质研究方法无法对温度和压力变化对金属离子浓度进行比较量化的研究，而数值模拟计算的方法可以很好的展现其优势，利用计算机进行模拟运算，能够为我们深入理解锌矿成矿过程提供有力的支持。

数值模拟方法可以提供以下三个方面的地质研究优势^[6]：

①提供定量分析，数值模拟分析可以通过建立数学模型，对温度和压力变化下的 Zn^{+2} 浓度进行定量分析。这不仅可以帮助我们更好地理解 Zn^{+2} 浓度变化的规律，还可以为后续深边部隐伏矿的研究和环境保护提供一定的科学参考。

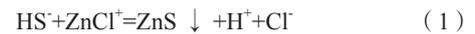
②揭示复杂过程，广西大厂地区的 Zn^{+2} 浓度变化是一个极其复杂的过程，受到温度、压力、围岩物理化学性质、含矿热液化学成分等多种因素的综合影响。通过数值模拟可以分析温度、压力、水流速度、化学反应等因素对锌离子浓度的交互影响，为深入理解锌离子浓度变化的规律提供有力支持。

③优化决策制定，数值模拟分析的优势是可以为隐伏矿体研究和环境保护的决策制定提供一定的科学依据。可以方便地修改不同的方案来进行模拟计算，正确评估温度压力的变化对 Zn^{+2} 浓度变化的影响，从而选择最优的方案。

3 数值模拟结果分析

在采用 TOUGHREACT 软件进行数值模拟计算之前，需要提前设定好溶液的酸碱环境和参与反应的金属阳离子和其他阴离子。

锌矿主要是以闪锌矿 (ZnS) 的形式进行沉淀的，在盐酸溶液的条件下，硫化亚氢 (HS^-) 与氯酸锌阳离子 ($ZnCl^+$) 反应可生成闪锌矿沉淀，也就是硫化锌 (ZnS) 沉淀^[7]，同时生成氢离子 (H^+) 和盐酸根离子 (Cl^-)，化学反应方程式为式子 (1)。



从式子 (1) 可以看出，在形成闪锌矿沉淀后，溶液中将产生大量的盐酸根离子，为了让矿体能源源不断地进行沉淀和富集，必须有大量的消耗酸性溶液的围岩才行，所以碳酸盐岩就起到了非常关键的作用，这也与之前研究的成矿关系密切的地层主要为泥盆系，而泥盆系地层又以碳酸盐岩为主^[8]。具体化学反应方程式见式子 (2)。



从式子 (2) 可以看出，大量的碳酸盐岩消耗闪锌矿形成时产生的盐酸根离子，碳酸盐岩的消耗形成大量二氧化碳气体逸出，为锌矿形成提供容矿空间和闪锌矿沉淀的围岩条件。

根据上述分析所得，将成矿溶液设定成盐酸和碳酸盐的混合环境，把 Zn^{+2} 、 Na^+ 、 H^+ 、 Cl^- 、 Na_2CO_3 同时加入 TOUGHREACT 软件中进行数值模拟计算，计算获得结果见图 1。

从图 1 可以直观地看出盐酸和碳酸盐溶液中 Zn^{+2} 浓度在不同压力值下随温度增加的变化情况，为深入理解广西大厂锌矿床形成的复杂物理化学过程提供了重要依据。以下将对该图进行详细分析，重点强调温度和压力变化以及浓度变化的特殊情况。

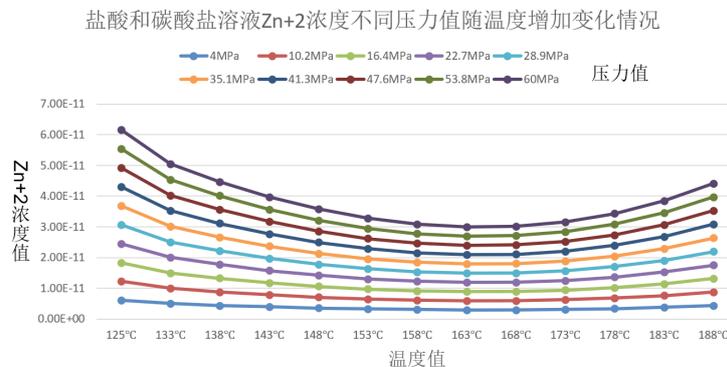


图 1 盐酸和碳酸盐溶液 Zn^{+2} 浓度不同压力值随温度增加变化情况

首先,从温度变化角度来进行分析。从图中可以看出,随着温度的升高, Zn^{+2} 浓度总体呈现出一定的变化趋势。在较低温度范围内,如从 125℃开始, Zn^{+2} 浓度相对较低。随着温度逐渐升高, Zn^{+2} 浓度也有所波动,但并非呈现简单的线性关系。当温度升高到一定程度时,如在 170℃左右及以上, Zn^{+2} 浓度的变化幅度相对较大。这表明温度对 Zn^{+2} 浓度的影响在较高温度区间更为显著。温度升高可能导致以下几个方面的变化,从而影响 Zn^{+2} 浓度:①化学反应速率加快的因素,当温度升高时,盐酸与碳酸盐的反应速率加快,可能促使更多的 Zn^{+2} 从矿物中释放出来,从而导致浓度升高。然而,这种反应也可能受到其他因素的制约,并非单纯随着温度升高而持续增加浓度。②物质溶解度变化的原因,温度的变化会影响 Zn^{+2} 在溶液中的溶解度。一般来说,温度升高可能使溶解度增大,但在特定的溶液体系中,可能会出现复杂的情况。例如,随着温度升高,溶液中的其他离子或物质可能与 Zn^{+2} 发生竞争溶解或沉淀反应,从而影响 Zn^{+2} 的浓度。

其次,压力的变化也对 Zn^{+2} 的浓度带来了一定的影响。从 4MPa 到 60MPa 的压力范围内, Zn^{+2} 浓度呈现出不同的变化趋势。在较低压力下,如 4MPa 和 10.2MPa, Zn^{+2} 浓度相对较低。随着压力的逐渐增加, Zn^{+2} 浓度也有所变化。在某些压力区间,如 16.4~28.9MPa, Zn^{+2} 浓度出现了较为明显的波动。压力对 Zn^{+2} 浓度的影响主要体现在两个方面:①影响化学反应平衡方面,压力的变化可以改变化学反应的平衡状态。在盐酸和碳酸盐溶液中,压力的增加可能促使反应向生成更多 Zn^{+2} 的方向进行,或者相反,使反应向沉淀 Zn^{+2} 的方向移动。②改变物质的物理状态方面,高压可能会使溶液中的物质发生物理状态的变化,例如改变溶液的密度、粘度等,从而影响 Zn^{+2} 的迁移和扩散速度,进而影响浓度。

最后,分析 Zn^{+2} 浓度变化的特殊情况。①温度和压力的交互作用,从图 1 中可以看出,温度和压力并不是独立地影响 Zn^{+2} 浓度,而是存在交互作用。在某些温度和压力组合下, Zn^{+2} 浓度会出现特殊的变化情况。在较高温度和较高压力下, Zn^{+2} 浓度可能会出现明显的升高或降低,这表明温度和压力的共同作用对 Zn^{+2} 浓度的影响更为复杂。②浓度突变点的放生,在图 1 中可以观察到一些温度和压力值下, Zn^{+2} 浓度出现了较为明显的突变。这些突变点可能意味着在特定的温度和压力条件下,发生了特殊的化学反应或物理变化,导致 Zn^{+2} 浓度迅速改变。可能在某个特定的温度和压力组合下,出现了新的矿物相的形成或溶解,从而影响了 Zn^{+2} 的浓度。③浓度稳定区间方面,尽管总体上 Zn^{+2} 浓度随着温度和压力的变化而波动,但在某些温度和压力范围内,浓度相对稳定。这可能是由于在这些条件下,各种影响因素相互平衡,使得 Zn^{+2} 的生成和消耗达到了一种动态平衡状态。

4 结论

通过分析结果可以知道,广西大厂闪锌矿的形成过程中,含矿热液是经过碳酸盐岩时发生剧烈反应产生沉淀和容矿空间的。热液中 Zn^{+2} 浓度随温度和压力的变化情况是一个复杂的物理化学过程,并非常规的线性增长或降低,温度在 Zn^{+2} 浓度变化中起着重要作用。在较低温度范围,如从 125℃开始, Zn^{+2} 浓度相对较低。随着温度逐渐升高, Zn^{+2} 浓度并非呈简单线性变化,而是呈现出一定的波动。在较高温度区间,如 170℃左右及以上, Zn^{+2} 浓度变化幅度相对较大。

不同压力值对 Zn^{+2} 浓度也有明显影响。从 4MPa 到 60MPa 的压力范围内, Zn^{+2} 浓度呈现出不同的变化趋势。在较低压力下,如 4MPa 和 10.2MPa, Zn^{+2} 浓度相对较低。随着压力逐渐增加, Zn^{+2} 浓度也发生变化。在某些压力区间,如 16.4~28.9MPa, Zn^{+2} 浓度出现较为明显的波动。

综上所述,广西大厂矿区中的锌矿形成时, Zn^{+2} 浓度随温度和压力的变化是一个复杂的过程,受到温度、压力以及化学反应、物质溶解度、物理状态变化等多个因素的综合影响。深入理解这一过程以及在相关的工业生产和科学研究中具有重要意义。通过进一步的研究和分析,可以更好地掌握 Zn^{+2} 浓度变化的规律,为深部部隐伏矿体探究和保护环境等方面提供科学依据。

参考文献:

- [1] 鞠明辉.广西大厂矿田非线性成矿动力耦合过程数值模拟研究[D].长沙:中南大学,2011.
- [2] 李扬.广西南丹县拉么锌铜矿床成因研究[D].北京:中国地质大学(北京),2017.
- [3] 杨婉秋.广西大厂黑水沟矽卡岩型锌铜矿床地球化学特征及成矿过程[D].昆明:昆明理工大学,2022.
- [4] 燕永锋,贾福聚,杨光树,等.基于大数据分析的铜坑锡钨多金属矿床Sn-Zn-Pb矿化规律及其地质意义[J].岩石学报,2019,35(11):3398-3406.
- [5] 肖昌浩,韦昌山,张宇,等.广西丹池成矿带拔旺铁锌锡矿床方解石U-Pb定年和微区XRF面扫描[J/OL].地球科学,1-25[2024-09-06].
- [6] 肖凡,陈信宇.基于数值模拟与勘查数据协同驱动的矿产定量预测——以凡口铅锌矿为例[J/OL].大地构造与成矿学,1-23[2024-09-06].
- [7] 张艳,韩润生,魏平堂.碳酸盐岩型铅锌矿床成矿流体中铅锌元素运移与沉淀机制研究综述[J].地质评论,2016,62(1):187-201.
- [8] 张艳,韩润生,胡体才,等.构造—流体—成矿耦合机制——以会泽超大型富锗铅锌矿床为例[J].大地构造与成矿学,2023,47(5):969-983.

基金项目:论文是“隐伏矿体形成过程的多场耦合数值模拟研究”项目的研究成果,项目任务书编号:桂科AD21220152;项目编号:2021AC19224。