

G7501 Fyzikální geochemie

Určeno: IV., V. roč., DSP (LS 2/1) 3+2 kreditů

Přednáška: pondělí 13:00–14:50

Cvičení: pondělí 15:00–15:50

Anotace: Přednáška navazuje na základní principy, probrané v kurzu Geochemie I a je pokročilým kurzem magisterského studia geologie. Hlavní pozornost je věnována kvantitativnímu posouzení stability geologických systémů (minerálů a hornin, fluid) za podmínek jejich existence v zemské kůře a možnosti jejich přeměn. Značná část je také věnována studiu dynamiky přeměn geologických systémů a možnostem jejich modelování.

Úspěšné zvládnutí kurzu umožní posluchačům vlastní aplikaci nejnovějších kvantitativních postupů fyzikální geochemie při řešení diplomových témat. Jedná se o širokou škálu problémů otázek geneze (podmínek T , p a *složen*) a časového vývoje geologických systémů od vyvřelých hornin až po hodnocení současných změn v atmosféře Země.

Požadované předběžné znalosti: Pro úspěšné zvládnutí předmětu jsou nutné znalosti geologických disciplin v rozsahu bakalářského studia geologie, zejména základního kurzu geochemie.

Studijní materiály: Přednáška je založena na zahraničních učebních textech a dalších zdrojích, protože není k dispozici moderní text v českém jazyce. Ve velmi omezené míře lze využít starší učebnice:

Zeman J.: Základy fyzikální geochemie, SPN Praha, 1990.

Geochemie se zejména v posledních letech velmi dynamicky rozvíjí a mnoho údajů v uvedených učebnicích již neodpovídá modernímu pohledu, proto je doporučena návštěva přednášek. Další studijní materiály jsou k dispozici na přednáškách a cvičeních, část je zveřejněna v IS na stránkách daného předmětu.

Zkouška: Písemná.

Tématický přehled přednášek

(vzhledem k nestejnému rozsahu témat budou některé části přesahovat ještě do následující přednášky)

1	13.02.2023	1. Úvod, historie, základní pojmy
2	20.02.2023	2. Principy: První a druhý zákon termodynamiky I
3	27.02.2023	První a druhý zákon termodynamiky I
4	06.03.2023	3. Gibbsova funkce
5	13.03.2023	4. Chemický potenciál roztoků
6	20.03.2023	5. Procesy: Jednosložkové soustavy
7	27.03.2023	6.–8. Vícesložkové soustavy; pevné roztoky
8	03.04.2023	9. Chemicky reaktivní systémy: Rovnováha
	10.04.2023	Velikonoce
9	17.04.2023	10.–12. Důležité rovnovážné konstanty; rovnovážná elektrochemie
10	24.04.2023	13. Dynamika: Rychlost geochemických procesů
	01.05.2023	Svátek
	08.05.2023	Svátek
11	15.05.2023	14. Principy modelování
12	22.05.2023	15. Ideální a reálné systémy, souhrn

Podrobný syllabus

1. Úvod:

- předmět studia a význam fyzikální geochemie
- stručná historie důležitých objevů: Benjamin Thompson, Humphry Davy, Julius Robert Mayer, James Prescott Joule, Hermann Helmholtz, Rudolf Clausius, James Watt, Sadi Carnot, Josiah Willard Gibbs
- systém a jeho okolí, typy systémů
- teplo, práce, energie
- stavové proměnné: extenzivní, intenzivní

Principy

2. První a druhý zákon:

- vnitřní energie, teplo, objemová práce, první zákon termodynamiky, entalpie, tepelné kapacity
- entropie, matematická definice, změny entropie systému, okolí a celkové
- standardní stavy pro entalpii a entropii

3. Gibbsova funkce:

- odvození Gibbsovy funkce, vztah mezi změnou Gibbsovy funkce a celkovou entropií
- závislost G na teplotě a tlaku
- vyjadřování složení systémů, závislost G na složení
- parciální molární veličiny

4. Chemický potenciál v roztocích:

- změny G ideálního plynu, směsi plynů a ideálních roztoků: plyných, kapalných, pevných, chemický potenciál
- reálné roztoky, fugacita a aktivita, Raoultův a Henryho zákon
- standardní stavy

Procesy

5. Jednosložkové soustavy:

- skupenství a fáze, fázové přeměny čistých látek, závislost stability na teplotě a tlaku
- fázový diagram, pozice fázových hranic
- tání, var, sublimace, přeměny v pevném stavu
- kritické hodnoty

6. Vícesložkové soustavy I: konstantní složení fází

- minimum G vícesložkové soustavy, fázové složení stabilní asociace
- fázové diagramy T - X , konstrukce diagramů z termodynamických údajů
- vliv těkavých složek na fázové hranice

7. Vícesložkové soustavy II: proměnlivé složení fází

- binární diagramy
- fázové diagramy fluida – pevné fáze s konstantním složením, eutektikum, peritektikum
- fázové diagramy fluida – pevné roztoky
- ternární diagramy

8. Pevné roztoky:

- ideální a reálné chování, dodatkové funkce, Margulesova rovnice
- termodynamické veličiny pevných roztoků
- odmíšení pevných fází

Chemicky reaktivní systémy

9. Rovnováha:

- minimum Gibbsovy funkce, reakční Gibbsova funkce, složení reakční směsi za rovnováhy

- závislost rovnováhy na teplotě a tlaku
- multifázové multikomponentní rovnováhy

10. Acidobazické rovnováhy:

- distribuční diagramy
- acidobazické rovnováhy (silné a slabé jedno- a vícesytné kyseliny a zásady, pH)
- pufrů
- měření pH

Rovnováhy srážení a rozpouštění:

- součin rozpustnosti

11. Komplexotvorné rovnováhy:

- konstanty stability komplexů, kombinace rozpouštěcích a komplexotvorných rovnováh
- distribuční diagramy

12. Rovnovážná elektrochemie:

- Gibbsova funkce tvorby iontů, aktivita elektrolytů, iontová síla roztoků
- elektrochemické poločlánky, reakce v člancích a jejich potenciál
- koncentrační články
- redukční potenciál, oxidačně-redukční (redox) reakce a jejich potenciály
- měření Eh

Dynamika

13. Rychlost geochemických procesů

- reakční kinetika
- vztah mezi kinetikou a termodynamikou
- difuze, povrchy, mezifází a povrchové reakce
- dynamika velkých systémů – rezervoáry a toky

Modelování

14. Principy modelování rovnováh a dynamiky

- Matematické metody řešení rovnovážných systémů
- Řešení v programech: Excel, Mathematica, Geochemist's Workbench
- Matematické modelování dynamiky
- Řešení v programech: Excel, Mathematica, Madonna

15. Ideální a reálné systémy

- vlastnosti ideálního systému
- termodynamika jako matematický model ideálního systému
- termodynamika jako matematický model reálného systému (systém ideální + oprava)

Souhrn

- souhrn základních termodynamických vztahů a jejich vzájemné vazby
- oblasti použití v jednotlivých typech geochemických systémů