

## G7501 Fyzikální geochemie

**Určeno:** IV. +V. roč. (ZS 2/1) 3+2 kreditů

**Přednáška:** úterý 7:00 – 8:50

**Cvičení:** úterý 9:00 – 9:50

**Anotace:** Přednáška navazuje na základní principy, probrané v kurzu Geochemie I (II. roč.) 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 složení) 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. V omezené míře lze využít starší učebnice:

Bouška J., ed.: Geochemie. Academia, Praha, 1980.

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

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

**Kontrola studia:** Ve cvičení jsou pravidelně zadávány krátké kontrolní testy na zvládnutí základních pojmů a principů. Pro další pokračování ve cvičeních a získání zápočtu je nutná 70% úspěšnost v testech. Zkouška po získání zápočtů.

### Tématický přehled přednášek

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

1	20. 9.	Úvod, historie, základní pojmy.
2	27. 9.	<b>Principy:</b> První a druhý zákon termodynamiky I
3	4. 10.	První a druhý zákon termodynamiky I
4	11. 10.	Gibbsova funkce
5	18. 10.	Chemický potenciál roztoků
6	25. 10.	<b>Procesy:</b> Jednosložkové soustavy
7	1. 11.	Vícesložkové soustavy;
8	8. 11.	Pevné roztoky
9	15. 11.	<b>Chemicky reaktivní systémy:</b> Rovnováha
10	22. 11.	Důležité rovnovážné konstanty
11	29. 11.	Rovnovážná elektrochemie
12	6. 12.	<b>Dynamika:</b> Rychlost geochemických procesů
13	13. 12.	Principy modelování

## 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
- odměšení 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)
- pufrý
- 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, oxidačněredukční (redox) reakce a jejich potenciály
- měření Eh

### **Dynamika:**

#### **13. Rychlost geochemických procesů**

- reakční kinetika
- vztah mezi kinetikou a termodynamikou
- difuze, povrchy, mezifáze 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