

## G7501 Fyzikální geochemie

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

**Přednáška:** středa 12:00–13:50

**Cvičení:** středa 14:00–14:50

**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	19.02.2025	1. Úvod, historie, základní pojmy
2	26.02.2025	<b>2. Principy:</b> První a druhý zákon termodynamiky I
3	05.03.2025	2. První a druhý zákon termodynamiky II
4	12.03.2025	3. Gibbsova funkce
5	19.03.2025	4. Chemický potenciál roztoků
6	26.03.2025	<b>5. Procesy:</b> Jednosložkové soustavy
7	02.04.2025	6.–8. Vícesložkové soustavy; pevné roztoky
8	09.04.2025	<b>9. Chemicky reaktivní systémy:</b> Rovnováha I
9	16.04.2025	9. Chemicky reaktivní systémy: Rovnováha II
10	23.04.2025	10.–12. Důležité rovnovážné konstanty; rovnovážná elektrochemie I
11	30.04.2025	10.–12. Důležité rovnovážné konstanty; rovnovážná elektrochemie II
12	07.05.2025	<b>13. Dynamika:</b> Rychlost geochemických procesů
13	21.05.2025	14. Principy modelování, 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)
- 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, 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