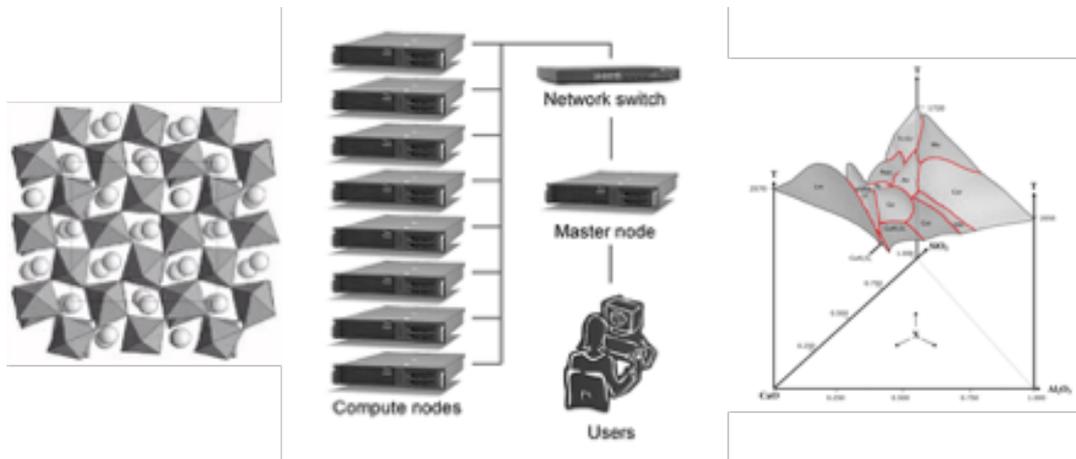


# GEOCHIMICA

## Proprietà termodinamiche e reattive delle matrici naturali



La ricerca verte principalmente sulle matrici cristalline, i liquidi silicatici (e i vetri) le soluzioni acquose e i gas. Mediante principi primi (calcoli *ab-initio*) vengono determinati i parametri termodinamici e termofisici ( $H^{\circ}_f$ ,  $S^{\circ}$ ,  $V^{\circ}$ ,  $C_p$ ,  $C_v$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $dK/dT$ ,  $dK/dP$ ) e le proprietà di frazionamento isotopico (effetti separativi). Mediante lo sviluppo di modelli polimerici vengono studiate le proprietà di miscela di liquidi silicatici multicomponenti e vengono calcolati i diagrammi di fase al liquidus in varie condizioni P,T (diagrammi petrogenetici). Calcoli *ab-initio* ci consentono di definire le proprietà dei soluti in soluzione acquosa e l'interazione con la matrice solida consentendo la definizione delle proprietà di trasporto in falda. L'adozione di procedure di calcolo *real-time*, appaiate a campionature adattive sul terreno ci permettono di produrre carte elementali di distribuzione a varie scale sul territorio nazionale.

### **Parole chiave:**

Geochimica, termodinamica, calcolo

### **Partecipanti del DISTAV:**

DOCENTI: Ottonello Giulio Armando, Vetuschi Zuccolini Marino, Belmonte Donato

### **Enti finanziatori:**

MIUR PRIN, IREN, Ateneo, CNR, Regione Liguria