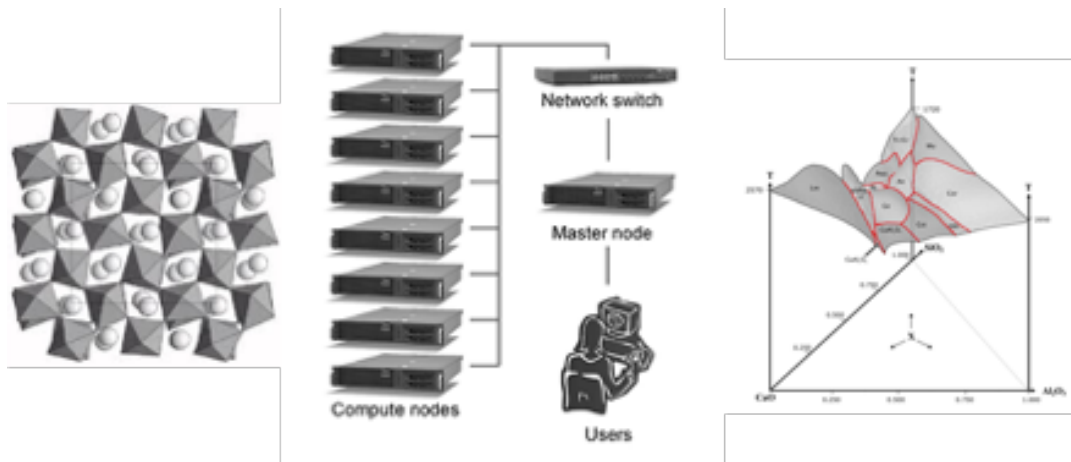


GEOCHIMICA

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_f° , S° , V° , C_p , C_v , α , β , 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