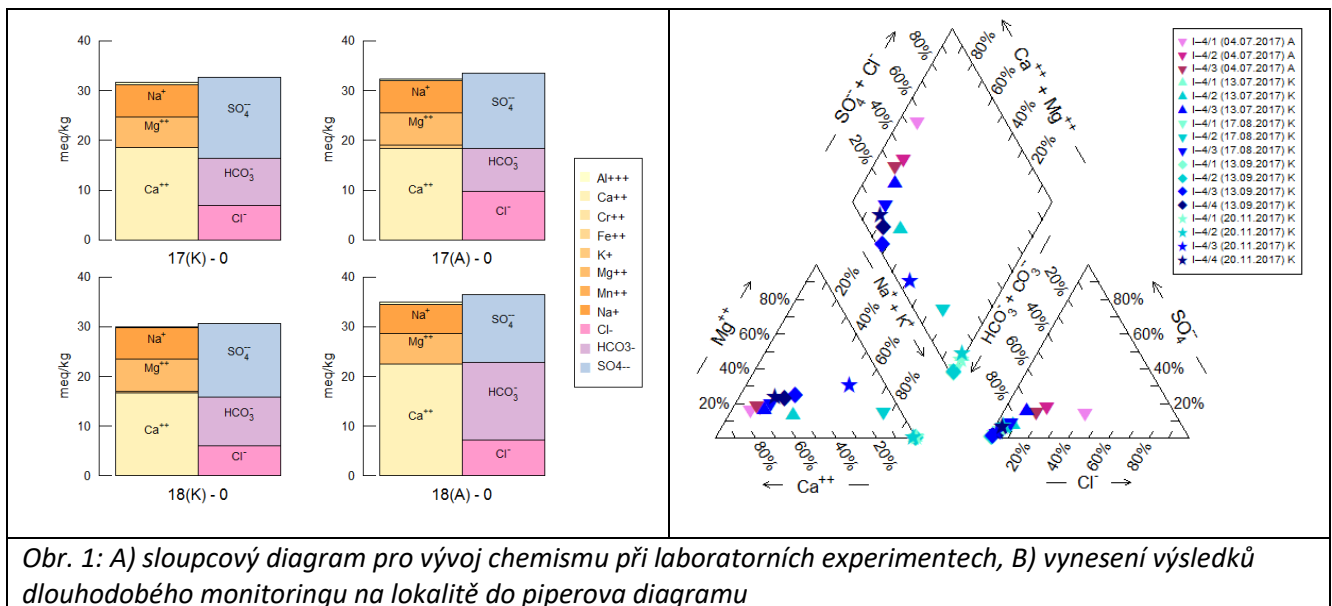


## Geochemické modelování vývoje chemismu ve vodách

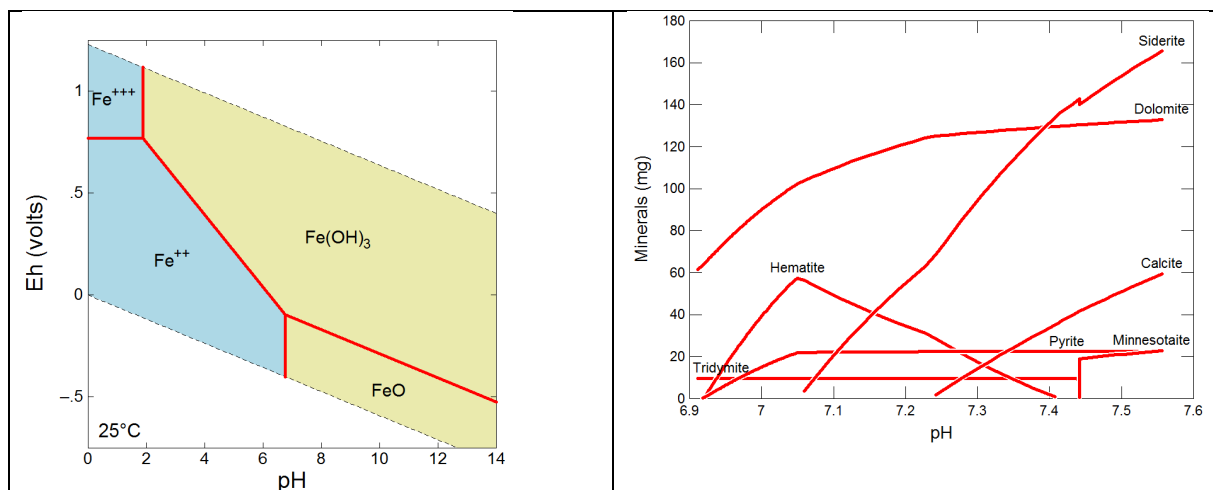
Vyhodnocení a interpretace chemických analýz podzemních vod a měření fyzikálně-chemických parametrů vod pomocí geochemického modelovacího programu The Geochemist's Workbench v. 11.0.8 Profesional, a jeho modulů GSS, Gtplot, Rxn, React a Act2.

Základní výstupy geochemického modelování jsou:

- vyhodnocení správnosti jednotlivých analýz a případné upozornění na nesrovnalosti
- určení typu podzemních vod včetně genetické a hydrochemické interpretace
- přehledné zpracování chemického složení do sloupcových (nebo Stiffových) diagramů (obr. 1A)
- vytvoření piperových a durovových diagramů (obr. 1B)



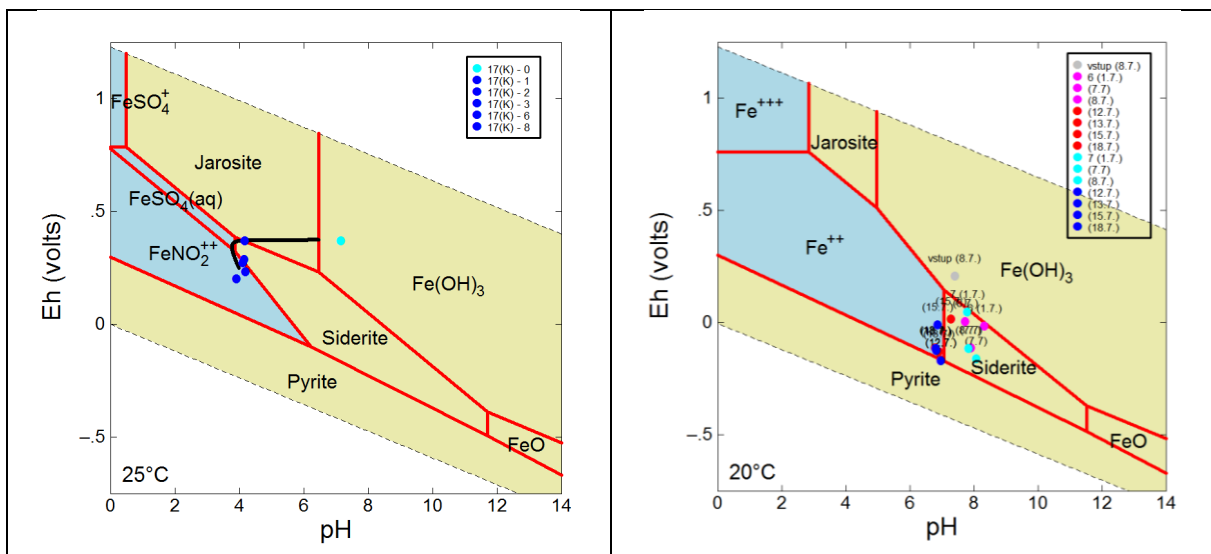
V případě studia nového systému, je před samotnou interpretací složitých vývoje chemismu vhodné se nejprve zaměřit na chování jednotlivých složek systému v čisté vodě (obr. 2A) a na jejich aktivitu (ochotu zapojovat se do reakcí). Následně může být přistoupeno ke geochemické interpretaci a modelování složitých pochodů, ke kterým dochází v saturované zóně horninového prostředí i při jednoduchých laboratorních experimentech.



### B) distribuční diagram krystalizace minerálů během laboratorního experimentu

Navazující výstupy jsou vždy přizpůsobeny individuálním potřebám dle množství požadovaných informací o systému a mohou tvořit např.:

- úplné geochemické modely, pro jednotlivá chemická složení vod
- určení nasycení systému vůči jednotlivým krystalickým fázím pomocí saturačních indexů
- vyhodnocení vývoje systému v podobě distribučních diagramů (obr. 2B)
- vynesení výsledků geochemického modelu v podobě stabilitních pH-Eh diagramů pro všechny složky v systému (obr. 3)
- vynesení souboru dat měřených v terénu do pole diagramů v podobě reakční cesty (obr. 3)
- odvození rovnic pro jednotlivé specie, které určují rovnováhu v systému



Obr. 3: A) porovnání výsledků laboratorního experimentu (modré body) s reakční cestou vynesenu při konstrukci geochemického modelu (černá linie), B) stabilitní pH-Eh diagram pro sloučeniny železa s vnesenými body z laboratorních měření při průchodu reaktivní kolonou

výsledná zpráva obsahuje soubor komplexně zpracovaných dat s velkým množstvím přehledných grafických výstupů a jejich průběžnou i závěrečnou interpretaci.

Geochemické modelování může velmi usnadnit práci se složitým a proměnlivým geochemickým systémem, jako je saturovaná zóna horninového prostředí, a to nejen během přípravy nových laboratorních experimentů a pilotních pokusů, ale i při vyhodnocování vývoje chemismu na dlouhodobě monitorovaných lokalitách.

Geochemické modelování může pomoci

- určit směr, jakým by se měl výzkum ubírat a na co by se měl zaměřit
- popsat předpokládaný vývoj studovaného systému před zahájením experimentů
- významně urychlit a zlevnit práci v laboratoři
- modelovat vývoj systému při reálné aplikaci do horninového prostředí a předvídat jeho konečné složení
- nahlédnout do reakcí uvnitř systému
- získat vždy maximální množství informací na základě dostupného souboru dat