

Curso para el Doctorado en Ciencias Geológicas
Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.
Universidad Nacional de Córdoba

Título:

“Modelado de equilibrio de fases en petrología metamórfica”

Profesor:

Dr. Sebastián Verdecchia (Universidad Nacional de Córdoba, Argentina)

Duración: 40 horas

Requisitos: ordenador portátil.

Introducción

Uno de los grandes desafíos en la petrología metamórfica resulta la cuantificación de las condiciones PT de formación. Desde el punto de vista metodológico existen dos posibles estrategias: inverso y directo. El método inverso posibilita el cálculo de las condiciones PT a partir de las composiciones químicas de una asociación mineral en posible equilibrio. Por otro lado, el método directo consiste en reproducir las asociaciones minerales y condiciones PT de formación mediante el modelado termodinámico o del equilibrio de fases. Este método facilita el análisis no solo de las condiciones PT sino también de los procesos metamórficos involucrados. A partir del análisis del equilibrio se obtienen diagramas de fases isoquímicos (pseudosecciones), los cuales representan la estabilidad de asociaciones minerales en función de las relaciones P-T-X para un sistema químico determinado. En las últimas décadas se han realizado importantes avances en esta metodología con el objeto de aproximarnos más al comportamiento real de los complejos sistemas químicos naturales. En este sentido, se han desarrollado diferentes bases de datos de propiedades termodinámicas de minerales y soluciones sólidas (p.e. Berman, 1990; Holland y Powell, 1998), como así también software para el tratamiento de esta información y la construcción los diagramas isoquímicos (THERIAK-DOMINO - de Capitani y Petrakakis, 2010, THERMOCALC – Powell et al. 1998, Perple_X – Connolly, 2005).

El objetivo del presente curso realizar una introducción que permita la construcción e interpretación de los diagramas de fases isoquímicos como así analizar procesos metamórficos a través de ellos.

Contenido y cronograma del curso (incluye teoría y prácticas):

- Días 1 y 2: Introducción a los diagramas de fases, sistema químico, equilibrio químico y regla de las fases. Nociones básicas del modelado de equilibrio de fases. Elección y reducción del número de componentes en el sistema químico. El agua en condiciones subsólidas y suprasólidas. La composición global, selección y correcciones. Volumen de equilibrio y composición efectiva. Construcción e interpretación de diagramas de fases. Cálculo de la composición global a través de mapas de rayos X o moda mineral. Nociones básicas de mapas de rayos X, diferencias entre mapas obtenidos mediante EDS y aquellos con WDS. Obtención de la composición global y construcción de diagramas P-T isoquímicos o pseudosecciones. Estrategias para el modelado de equilibrio de fases. Selección de modelos de solución. La importancia del Fe³⁺.

Práctica: construcción de diagramas P-T isoquímicos o pseudosecciones, obtención y corrección de la composición química global efectiva, extracción de la composición global a partir de mapas composicionales de Rayos X.

- Día 3 y 4: Durante estos dos días nos concentraremos en actividades prácticas: Cálculo de isopleetas de composición y moda. Construcción de diagramas TX y PX. Modelado en sistemas complejos con Ti-Fe³⁺. Comparación de diferentes métodos: THERMOCALC, Perple_X y Theriak-Domino. Uso de software de apoyo para el facilitado de diferentes cálculos como ser isopleetas (ej. TCIInvestigator de Mark Alan Pearce en Thermocalc)

El software más usado para modelado termodinámico está disponible en:

- Thermocalc - <http://www.metamorph.geo.uni-mainz.de/thermocalc/>
- Perplex - <http://www.perplex.ethz.ch/>
- Theriak Domino - <http://titan.minpet.unibas.ch/minpet/theriak/theruser.html>

En este curso utilizaremos especialmente en el Theriak-Domino (de Capitani C. y Petrakakis K. 2010)

Referencias

- Connolly, J.A.D. 2005. Computation of phase equilibria by linear programming: a tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone decarbonation. *Earth and Planetary Science Letters* 236:524-54.
- Berman, R. G. (1988). Internally-consistent thermodynamic data for minerals in the system Na₂O-K₂O-CaO-MgO-FeO-Fe₂O₃-Al₂O₃-SiO₂-TiO₂-H₂O-CO₂. *Journal of petrology*, 29(2), 445-522.
- de Capitani C. and Petrakakis K. (2010): The computation of equilibrium assemblage diagrams with Theriak/Domino software. *American Mineralogist* 95:1006-1016
- Holland, T. J. B., & Powell, R. T. J. B. (1998). An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. *Journal of metamorphic Geology*, 16(3), 309-343.
- Powell, R, Holland, TJB, & Worley, B, 1998. Calculating phase diagrams involving solid solutions via non-linear equations, with examples using THERMOCALC *Journal of Metamorphic Geology* 16, 577–588.