

El modelado geoquímico de rocas ígneas: una aproximación a los procesos naturales

María del Sol Hernández-Bernal

Escuela Nacional de Estudios Superiores, UNAM, Unidad Morelia

Resumen

En este trabajo se presenta una revisión de la importancia de los cálculos y modelado de los procesos que dan origen a las rocas magmáticas. Por medio del manejo de algunas ecuaciones, se considera una serie de variables y parámetros que podrían modificar a los magmas a partir de su generación por fusión parcial de rocas del manto y las modificaciones químicas y mineralógicas que suceden durante su ascenso a través de la corteza terrestre. Se muestra que una vez planteado un proceso magmático hipotético y con el uso de matemáticas sencillas y hojas de cálculo, es posible obtener un primer acercamiento a la comprensión del comportamiento químico de los magmas. Se incluye una hoja de cálculo que permite revisar la metodología expuesta con los todos los ejemplos que se explican en el texto ([ModelosProcesosMagmaticos.xls](#)).

Abstract

In this paper we review the significance of calculations and modelling of the processes that give rise to magmatic rocks. Through the use of some equations, it

is considered a number of variables and parameters that could change the magmas from their generation by partial melting of mantle rocks to mineralogical and chemical changes that occur during its ascent through the crust. It is shown that once established a hypothetical magmatic process plus the use of simple math and spreadsheets, it can be a first approach to comprehension of the chemical behavior of magmas. It is included a spreadsheet that allows to review the methodology set with all the examples discussed in the text ([ModelosProcesosMagmaticos.xls](#)).

Introducción

La geoquímica se plantea la descripción de la Tierra como un Sistema y cuantifica los parámetros y variables relacionadas con los procesos geológicos. Los procesos que se pueden modelar son muy variados e incluyen materiales sólidos (rocas), líquidos (aguas superficiales y subterráneas) y gaseosos (atmósfera), así como una combinación de ellos.

Un modelo es un sistema en sí, es una representación simple de la realidad que se puede trasladar a otros sistemas con ciertas características comunes y definidas (Lecomte, 2003). El modelado de los procesos magmáticos consiste en la integración de toda la información posible de un conjunto de rocas ígneas que definen un proceso magmático: datos de campo, petrográficos, mineralógicos y geoquímicos, los cuales nos permiten simular las condiciones físicas y químicas en los que ocurrieron estos procesos; ya sea en un ambiente volcánico, sub-volcánico o plutónico. La importancia de modelar el comportamiento de los magmas radica en que a partir de la composición química, texturas y estructuras asociadas a un conjunto petrogenético, se puede realizar una aproximación a los procesos de formación y evolución de los magmas formadores de rocas ígneas.

Un magma se origina a partir del proceso de fusión parcial de las rocas parentales de la litósfera, ya sea del manto o de la corteza y es una mezcla conformada por un componente líquido silicatado, una fase volátil (principalmente H₂O, CO₂, H₂S y SO₂) y otra sólida (cristales de minerales silicatados). A partir del comienzo de la fusión parcial, en la roca parental permanece un cierto volumen sólido, el cual está formado por los minerales más refractarios (residuo).

Como se ha mencionado, al fundir la roca original se produce un volumen de líquido rico en sílice (SiO₂); sin embargo, también hay presentes otros elementos mayores tales como el Fe, Mg, Ca, Al, K y Na, así como elementos menores como el P y Ti y muchos más elementos traza. La fracción de volumen fundido o líquido, cambiará

su composición y contenido de fases dependiendo de los procesos que ocurran durante su posterior movimiento, el cual es generalmente ascendente en el interior de la litósfera, generando un cambio denominado “Diferenciación Magmática”:

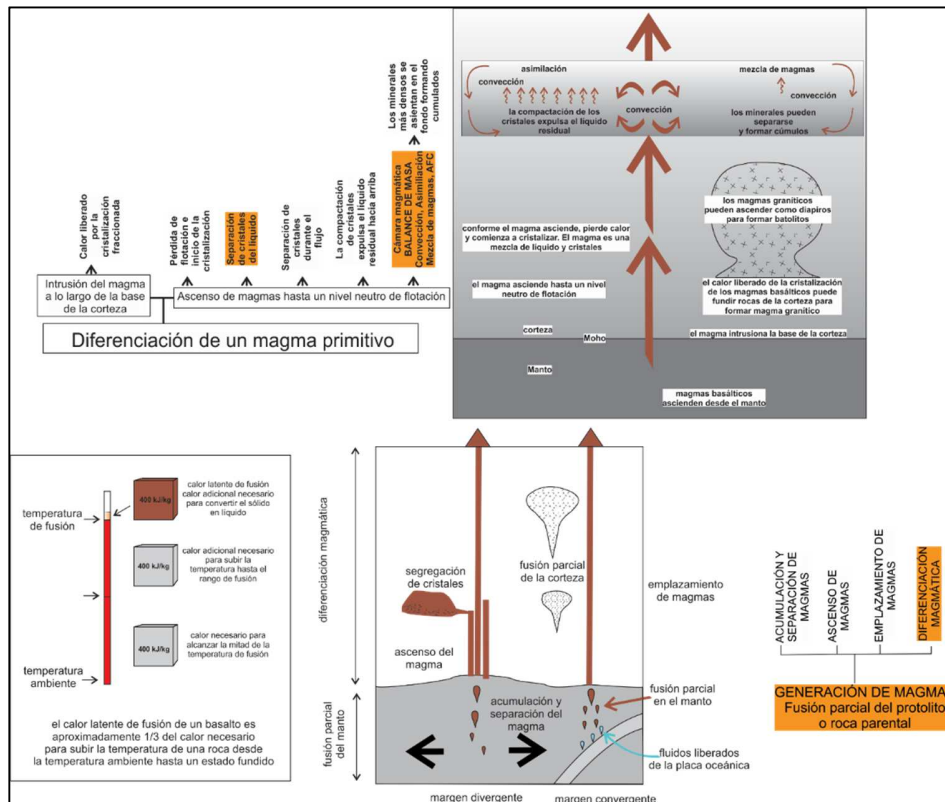


Figura 1. Principales procesos magmáticos que ocurren en la generación y diferenciación de magmas mencionados en el texto. En color naranja se muestran los procesos que son analizados con los ejemplos de este trabajo. Esquemas basados en Kumar y Singh (2014) y en Klein y Philpotts (2013).

Los factores responsables de la diferenciación magmática son varios y su importancia depende del ambiente tectónico, de la composición original del fundido y del tiempo de permanencia en diferentes condiciones físicas de temperatura y presión en el sistema. Algunos de estos factores son conocidos como: i) el porcentaje de fusión parcial, ii) mecanismo de transporte del líquido, iii) porcentaje de cristalización fraccionada, iv) mecanismo de emplazamiento, v) porcentaje de mezcla y asimilación cortical, vi) porcentaje de asimilación y cristalización fraccionada (AFC) (Figura 1). Algunos de estos factores se pueden estimar y cuantificar a partir de las observaciones microscópicas de su textura, así como de

la composición química de los productos magmáticos iniciales o finales de un hipotético proceso magmático, usando como base las variaciones de los contenidos de elementos mayores, traza y relaciones isotópicas, (Albarède, 1995; Kumar y Singh, 2014).

Uno de los modelados matemáticos más comunes se refiere al cálculo de la mineralogía normativa CIPW (nombrada por 4 petrólogos, Cross, Iddings, Pirsson y Washington, que la desarrollaron en 1931). Con base en la composición química de los elementos mayores, este modelado o norma establece la proporción de los minerales teóricos que en forma ideal estarían presentes en una roca. Este modelado resulta muy útil principalmente en rocas volcánicas, debido a la relativa ausencia de cristales visibles (textura afanítica). Por otra parte, la proyección de los elementos menores (0.1-1.0 wt%) y traza (<0.1 wt%), por medio de los diagramas de multielementos, también representan valores normalizados con referencia a rocas que se consideran modelos, por ejemplo la condrita, el manto empobrecido, o la Tierra Total. Estas proyecciones en general se interpretan como la ponderación de firmas químicas de las rocas en relación con un ambiente tectónico y/o su afinidad con componentes (corticales y mantélicos) que participan en su génesis.

A partir de la década de los años setenta, se han desarrollado una serie de ecuaciones fundamentales que permiten modelar los procesos magmáticos desde un punto de vista geoquímico y petrológico (Shaw, 1970; 1979; Hertogen y Gijbels, 1976; Hanson, 1978; 1980, entre otros). Estas ecuaciones son útiles no sólo para modelar el comportamiento de los magmas, sino de otros sistemas naturales como la hidrósfera y la atmósfera, entre otros.

Aunque existen trabajos recientes que abordan el tema de modelado petrológico con gran detalle (Albarède, 1995; Kumar y Singh, 2014), la mayor parte son obras muy extensas y algunas veces poco accesibles para un estudiante o para un primer acercamiento a este tema. Algunos trabajos en el idioma español que desarrollan estos temas son los de Benito-García y López Ruiz, 1994; Cebriá y López-Ruiz, 1994; y Hernández-Bernal et al., 1997; 2000. Del mismo modo, en la actualidad hay varios programas de cómputo que permiten realizar el análisis integral de datos químicos para cuantificar procesos magmáticos. Sin embargo, con frecuencia se trata de software comercial, poco accesible o de difícil manejo. Por su uso sencillo y común, en este trabajo se sugiere utilizar hojas de cálculo para realizar los modelados petrológicos y geológicos. Se considera que con ello el usuario programará directamente y podrá visualizar las ecuaciones clásicas del modelado,

facilitando un mayor entendimiento de los parámetros físico-químicos involucrados en los procesos hipotéticos que participan en la generación de los magmas.

En este trabajo se revisan los fundamentos teóricos básicos de las variables y parámetros que influyen o modifican a los magmas durante su proceso de ascenso en la corteza a partir de la fusión parcial de rocas del manto. Se presentan cuatro ejemplos de modelado de rocas magmáticas en hojas de cálculo, los cuales nos permiten visualizar de manera general el comportamiento de las variables del proceso de diferenciación magmática.

Generación de magmas: fusión parcial

Cuando se incrementa la temperatura las rocas se funden parcialmente. Esto significa que una roca no se fundirá de forma homogénea y que el líquido generado no tendrá la misma composición que la roca original. Esto ocurre debido a que los componentes minerales tienen diferentes puntos de fusión; por ello, al aumentar el calor en el sistema, aumenta la temperatura y cuando en el sistema rocoso se alcanza la temperatura de fusión ésta se mantiene constante y el calor adicional, el calor latente de fusión, se utiliza para pasar del estado sólido al líquido (Figura 1). Los componentes minerales de menor punto de fusión comenzarán a fundir a lo largo de las superficies de contacto entre cristales debido a que en esta superficie, generalmente se tiene un menor punto de fusión en comparación con el núcleo de cada mineral por separado. Esto explica por qué una mezcla de minerales tiene un punto de fusión menor al de sus minerales individuales (Klein y Philpotts, 2013). El líquido resultante representa la porción más fácil de fundir ya que necesita menor cantidad de energía. El porcentaje de fusión parcial es limitado ya que el calor latente de fusión puede representar hasta 1/3 de la energía total para alcanzar el estado fundido. Una vez producido el líquido, éste tiende a migrar hacia zonas de menor presión, dejando un residuo sólido refractario.

Los procesos de mayor importancia para fundir las rocas de la litósfera son: a) el aumento de temperatura debido al ascenso convectivo de una porción del manto inferior (pluma); su contraste de temperatura induce a que la geoterma alcance el solidus y genere fusión parcial a mayor profundidad ya que el exceso de calor se transforma en calor latente de fusión, adelgazando térmicamente la litósfera (Schubert et al, 2001; Gill, 2010; Rey, 2015); b) el adelgazamiento de la litósfera y su reemplazamiento por manto astenosférico, generando fusión parcial debido al descenso de punto de fusión por descompresión (dorsales), y c) por la adición de

volátiles procedentes de los sedimentos acarreados por la placa oceánica a la cuña del manto en las zonas de subducción y liberados por reacciones metamórficas. Los productos magmáticos generados en los diferentes ambientes tectónicos muestran una gama de proporción y composición mineralógica, así como de elementos mayores y traza.

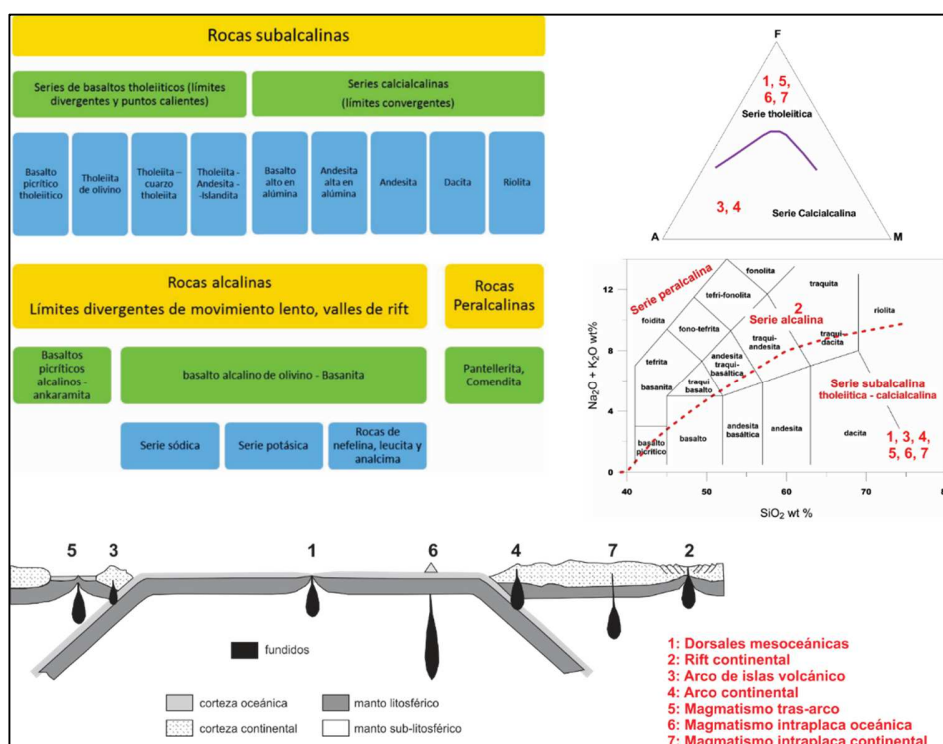


Figura 2. Clasificación de las rocas volcánicas en relación a las series magmáticas (alcalina y subalcalina). Se muestra un esquema de los posibles ambientes tectónicos relacionados a cada serie. Diagramas de series magmáticas, álcalis totales ($\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$ wt%), AFM (FeO_{tot} wt% - MgO wt% - $\text{Na}_2\text{O} + \text{K}_2\text{O}$ wt%) y ambientes tectónicos basados en Klein y Philpotts (2013), Le Maitre et al. (1989), Irvine y Baragar (1971) y Winter (2001).

De manera general, en relación con sus firmas geoquímicas se puede plantear que en los ambientes de divergencia de placas y en los puntos calientes predominan las rocas basálticas de tipo toleítico, mientras que en las zonas de convergencia generalmente predominan las rocas andesíticas de tipo calcialcalino y en menor proporción basaltos, dacitas y riolitas. En las zonas de divergencia de movimiento lento, predominan las rocas alcalinas (Klein y Philpotts, 2013, Figura 2).

TABLA 1

Ecuaciones para determinar la concentración de elementos traza en diferentes casos de fusión parcial (Shaw, 1970 y Hertogen y Gijbels, 1976).

Fusión	el líquido resultante	fusión parcial modal	fusión parcial no modal
Intermitente o por lotes (Batch Melting)	se encuentra en equilibrio con el residuo sólido	caso 1 $\frac{C_L}{C_0} = \frac{1}{D + F(1-D)}$	caso 2 $\frac{C_L}{C_0} = \frac{1}{D + F(1-P)}$ $C_s = \frac{C_0}{1-F} \left(1 - \frac{C_L}{C_0} F \right)$
Fraccionada (Fractional Melting)	se separa continuamente del sólido restante	caso 3 $\frac{C_L}{C_0} = \frac{1}{D} [1 - F]^{\left(\frac{1}{D}\right)}$ $\frac{C_s}{C_0} = [1 - F]^{\left(\frac{1}{D}\right)}$ $\frac{\bar{C}_L}{C_0} = \frac{1}{F} \left[1 - (1 - F)^{\left(\frac{1}{D}\right)} \right]$	caso 4 $\frac{C_L}{C_0} = \frac{1}{D} \left[1 - \frac{PF}{D} \right]^{\left(\frac{1}{P}\right)}$ $\frac{C_s}{C_0} = \frac{1}{1-F} \left[1 - \frac{PF}{D} \right]^{\left(\frac{1}{P}\right)}$ $\frac{\bar{C}_L}{C_0} = \frac{1}{F} \left[1 - \left(1 - \frac{PF}{D} \right)^{\left(\frac{1}{P}\right)} \right]$

En donde

- C_0 = concentración del elemento en el sólido inicial
- C_s = concentración del elemento en el sólido residual
- C_L = concentración del elemento en el líquido producido por la fusión parcial (fusión fraccionada)
- $\bar{C}_L$ = concentración del elemento en el agregado líquido final (fusión fraccionada)
- C_L = concentración del elemento en el líquido producido por la fusión parcial (fusión intermitente)
- D = coeficiente de distribución volumétrico modal
- P = coeficiente de distribución volumétrico no modal
- F = proporción de material fundido (grado de fusión parcial)

Modelado matemático de fusión parcial de rocas

Para la fusión parcial de una roca podemos imaginarnos dos esquemas contrastantes: i) fusión intermitente o por lotes (batch melting), en donde el líquido que se forma y el sólido refractario permanecen en contacto conservando un equilibrio termodinámico durante todo el evento de fusión; ii) fusión fraccionada (fractional melting) en donde, el material fundido es constantemente separado del material sólido (refractario) por cualquier proceso de migración o ascenso del magma.

La formulación matemática de estos dos procesos de fusión parcial ha sido derivada por Shaw (1970). Este autor se basa esencialmente en la composición química del líquido, la cual se asume será una función de la contribución de cada uno de los minerales fundidos. Sin embargo, la fusión parcial podría ocurrir en forma proporcional a la abundancia mineralógica modal en la roca (*fusión modal*), o bien puede seguir una secuencia de diferenciación térmica como las series de reacción (*fusión no modal*); este autor ha considerado cuatro alternativas distintas para modelar la evolución química de un magma formado por fusión parcial, en donde se definen D y P, como los coeficientes de distribución volumétrico modal y no modal (Tabla 1). Una explicación sencilla y detallada de cada una de ellas se puede consultar en Benito-García y López-Ruiz (1992; 1994) y Hernández-Bernal et al. (1997).

Parámetros de modelado de fusión parcial

El *coeficiente de distribución mineral-líquido* (K_d), es la fracción en peso de un elemento traza en un mineral dividido por la fracción en peso de ese mismo elemento en un líquido coexistente. Si se asume que el mineral y el fundido se encuentran en equilibrio, entonces el coeficiente de distribución está dado por:

$$K_d = \frac{C_s}{C_l}$$

en donde K_d = coeficiente de distribución del elemento

C_s = concentración del elemento en la fase sólida

C_l = concentración del elemento en el líquido

Se considera que el elemento es *compatible* si $K_d > 1$, es decir, el elemento “prefiere” residir en el cristal; si $K_d < 1$, se dice que el elemento es *incompatible* ya que tiende a residir en el líquido. Por ejemplo: para el elemento lutecio (Lu^{+3}) el coeficiente del granate tiene un valor de $K_{Gt}^{Lu} = 6.95$, para la plagioclasa de $K_{Plg}^{Lu} = 0.02$. Para el europio (Eu^{+2}), el granate tiene un valor de $K_{Gt}^{Eu} = 0.24$, la plagioclasa de $K_{Plg}^{Eu} = 1.50$. Estos valores implican que el líquido resultante de la fusión parcial de una roca que tenga esta mineralogía estaría muy empobrecido en Lu ya que este elemento prefiere residir en el residuo sólido o mineral; así mismo, si el líquido estuviera enriquecido en plagioclasas, éste tendría un enriquecimiento de Eu. Sin embargo, el coeficiente de distribución de un elemento es dependiente de las condiciones de presión, temperatura y composición química en que se forme un fundido. Por ejemplo, se observa que los coeficientes de distribución de los Elementos de Tierras

Raras son generalmente más grandes en líquidos graníticos que en líquidos basálticos.

El *coeficiente de distribución volumétrico modal* D es el valor del coeficiente de distribución de un elemento en el total del sistema en estudio, dependiendo de las proporciones de cada uno de los componentes en el sistema original:

$$D = X^1 K_d^1 + X^2 K_d^2 + X^3 K_d^3 + \dots + X^i K_d^i$$

en donde D = coeficiente de distribución volumétrico modal,

X^i = fracción en peso de la fase i en el sólido,

K_d^i = coeficiente de distribución de un elemento para la fase i .

Por otra parte, el *coeficiente de distribución volumétrico no modal* P es el valor del coeficiente de distribución de un elemento en el total del sistema en estudio cuando las fases funden en proporciones diferentes a la proporción modal de cada uno de los componentes del sistema.

$$P = p^1 K_d^1 + p^2 K_d^2 + p^3 K_d^3 + \dots + p^i K_d^i$$

en donde P = coeficiente de distribución volumétrico no modal

p^i = fracción de la contribución de la fase i al fundido

K_d^i = coeficiente de distribución de un elemento para la fase i .

Durante la fusión parcial de una roca, los elementos traza y los isótopos estables sufren fraccionamiento (separación de elementos o de isótopos en función de su punto de ebullición, radio iónico y/o masa), mientras que las relaciones isotópicas radiogénicas no varían. Por lo tanto, los líquidos producto de la fusión parcial heredarán las firmas isotópicas de la roca parental, permitiendo identificar su origen. Para mostrar este proceso se presenta un ejemplo donde se puede calcular la variación de la concentración de elementos traza en un proceso de fusión parcial¹.

Ejemplo 1. Cálculo de composición de líquido y residuo derivados de fusión parcial

Calcular la concentración de Rb y Sr en el líquido producido por **fusión en equilibrio** de una granodiorita constituida por 20 % cuarzo (Qz) + 15 % feldespato potásico (FK) + 50 % plagioclasa (Plg) + 8 % biotita (Bt) + 7 % anfíbol (Hb), cuando se alcanza una tasa de fusión del 60 %. Se asume que la concentración de Rb (C_{Rb})

¹Se anexa una hoja de cálculo Excel con todos los ejemplos de este trabajo.

es = 140 ppm y de Sr (C_{Sr})= 478 ppm en la roca y que el cuarzo, feldespato potásico y plagioclasa son las únicas fases que participan en el proceso de fusión en un porcentaje del 30, 20 y 50 %, respectivamente. Los valores de los coeficientes de distribución se muestran en la Tabla 2 (Modificado de Benito-García y López-Ruiz, 1994).

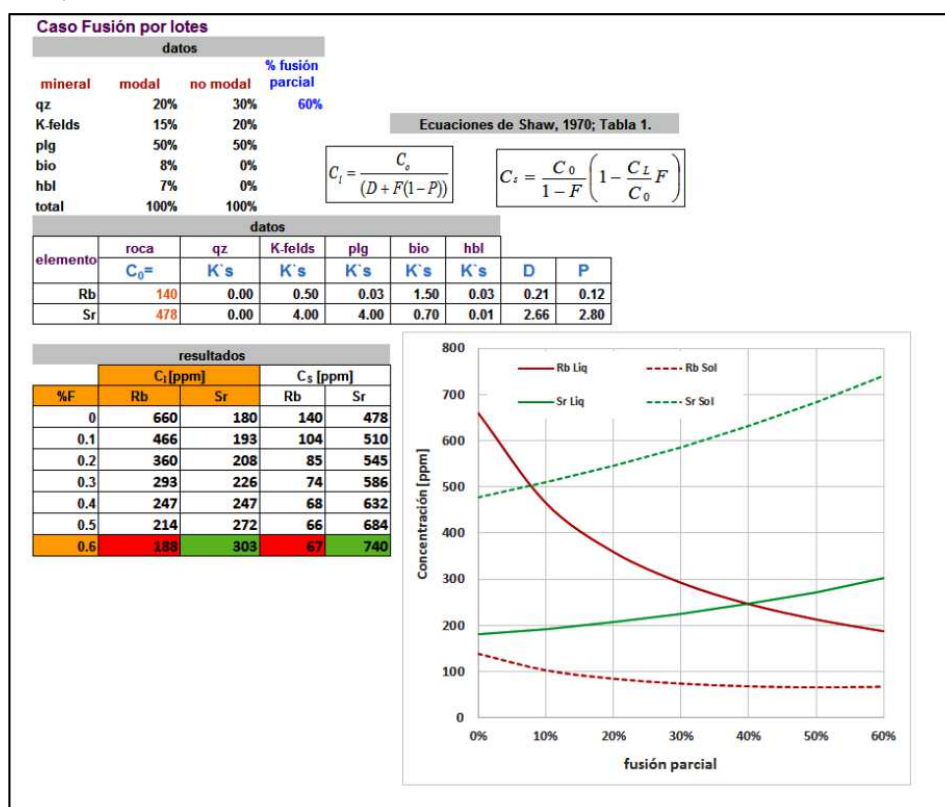


Figura 3. Solución al ejemplo 1. Cálculo de concentración de Rb y Sr en un líquido producido por 60% de fusión parcial en equilibrio de una roca parental en proporción no modal. Se observa que conforme avanza el porcentaje de fusión parcial el líquido se enriquece en Rb respecto al sólido. Contrariamente, el Sr se empobrece en el líquido y se enriquece en el sólido residual, debido a que el Rb tienen coeficientes de distribución < 1 , mientras que el Sr es altamente compatible con coeficientes de distribución > 1 . Se muestran las ecuaciones que lo resuelven. Para detalles de la programación ver la hoja de cálculo anexa.

Para resolver este problema, es necesario utilizar la ecuación para el caso de fusión en equilibrio (por lotes) no modal. En la Figura 3 se muestra la solución utilizada en la hoja de cálculo anexa a este trabajo (Ejemplos en el archivo ModelosProcesos Magmaticos.xls).

Se observa que el Rb se comporta como un elemento incompatible, ya que su valor de D y P es <1 ; por ello, a bajos grados de fusión parcial (F) el líquido se enriquece en Rb. Por otra parte, el Sr se comporta como un elemento compatible, ya que los valores de D y P son >1 , enriqueciendo el sólido en Sr conforme aumenta el grado de fusión parcial.

TABLA 2
Coeficientes de distribución del Rb y Sr en diferentes minerales
(tomados de Benito-García y López-Ruiz, 1994).

Coeficientes de distribución					
Elemento	Cuarzo	Feldespato Potásico	Plagioclasea	Biotita	Hornblenda
Rb	0.0	0.5	0.03	1.5	0.03
Sr	0.0	4.0	4.0	0.7	0.01

Modelado matemático de diferenciación magmática

La mayor parte de los magmas que llegan a la superficie no son líquidos primarios; es decir, son diferentes a los líquidos generados por la fusión parcial inicial. En otras palabras, los magmas invariablemente experimentan un proceso de evolución durante su ascenso. Algunos de los mecanismos que provocan esta diferenciación (cambio en la composición química de los magmas) son la cristalización fraccionada, la recarga o aumento de volumen de magmas, la mezcla de magmas diferentes, la asimilación cortical o una combinación de ellos. Cuando el líquido inicial o parental se separa del residuo comienza el proceso de ascenso en condiciones adiabáticas. Al alcanzar niveles corticales más someros, el contraste de densidad entre el magma y la corteza que lo aloja tiende a ser menor, por lo que el ascenso se detiene, ocupando un nuevo espacio con otras condiciones físicas de presión y temperatura y dando origen a los reservorios o cámaras magmáticas. Si la temperatura desciende a umbrales propicios, entonces comenzará la cristalización y sucesivamente el fraccionamiento del líquido residual (Figura 1).

Asimilación-Cristalización Fraccionada (AFC)

Durante el enfriamiento de un magma, los primeros cristales que se forman son los de mayor temperatura de fusión como el olivino, espinela y piroxenos. Si estos

cristales son separados del líquido restante por algún proceso físico (por ejemplo, la gravedad) pueden formar cúmulos o agregados ricos en Mg, Fe, Cr y Ni, mientras que el líquido silicatado restante estará enriquecido en Si, Al y álcalis. A este proceso se denomina cristalización fraccionada y puede ocurrir varias veces a lo largo del enfriamiento de la cámara magmática. Sin embargo, si los cristales permanecen en la solución magmática, su equilibrio de fases y/o su composición pueden cambiar por el efecto de reacciones con el líquido o pueden disolverse en forma parcial formando texturas de reabsorción. De acuerdo a los experimentos de la secuencia de cristalización realizados por Bowen a principios del siglo XX, se distinguen dos tipos de series de reacciones, la reacción continua (grupo de feldespatos) y la reacción discontinua (grupo de ferromagnesianos).

Por otro lado, la secuencia de cristalización puede ocurrir en condiciones de equilibrio o bien de disequilibrio. En la primera, los cristales permanecen en contacto con el líquido residual y continuamente se reequilibran, manteniendo la composición del magma original. En el segundo caso, aunque los cristales y el líquido permanecen en contacto, la velocidad de cristalización es mayor a la velocidad de difusión, por lo que no hay reequilibrio y el líquido residual se enriquece en elementos incompatibles. El conjunto del líquido y los cristales, comúnmente zoneados, tendrá la composición del magma original pero con una gran diferencia en la distribución de sus elementos en la matriz (líquido) y los cristales, que dependerá de su compatibilidad ($k_d^i = \text{coeficiente de distribución}$). Una tercera opción es el caso cuando los cristales se separan inmediatamente del líquido residual, dando lugar a rocas con una composición química muy diferente al magma original (Cebriá y López-Ruiz, 1994).

Finalmente, un último caso se refiere cuando un magma derivado del manto durante su ascenso se pone en contacto con rocas de diferente composición, las cuales pueden ser parcialmente asimiladas y por tanto contaminan al magma inicial, cambiando la secuencia de reacción del proceso de cristalización fraccionada. Cuando un magma asimila porciones de la roca encajonante, éstas no se funden completamente ya que no hay suficiente calor en el sistema. Sin embargo, si ocurre cristalización fraccionada simultáneamente, el calor latente de fusión liberado por ésta será capaz de fundir en mayor grado a la roca asimilada². Este proceso se denomina Asimilación-Cristalización Fraccionada (AFC, por sus siglas en inglés) y

² Recordemos que para fundir una roca, el sistema absorbe cierta cantidad de calor latente de fusión; al suceder lo contrario, al cristalizar el magma, esta misma cantidad de calor es liberada y regresada al sistema.

ha sido expresado por las ecuaciones descritas por Allègre y Minster (1978) y De Paolo (1981).

TABLA 3

Composición química de un magma andesítico y olivino
(tomado de Hernández-Bernal et al., en revisión).

óxidos [peso %]	Magma andesítico	Olivino Fo ₈₄
SiO ₂	58.25	40.01
TiO ₂	0.83	0.00
Al ₂ O ₃	16.43	0.01
Fe ₂ O ₃ Tot	6.45	15.06
MnO	0.08	0.20
MgO	6.02	44.51
CaO	6.43	0.11
Na ₂ O	3.39	----
K ₂ O	1.88	----

Ejemplo 2. Cálculo de la composición del líquido residual (RL) en un proceso de diferenciación magmática

Un magma andesítico (MP) contiene olivino (ol) Fo₈₄; su composición se muestra en la tabla 3 (Hernández-Bernal et al., en revisión). Al comenzar la cristalización el olivino se fracciona (separa), dejando un líquido residual (RL). Calcule la composición del líquido residual (LR) después del fraccionamiento del 5, 10 y 15% de cristales de olivino.

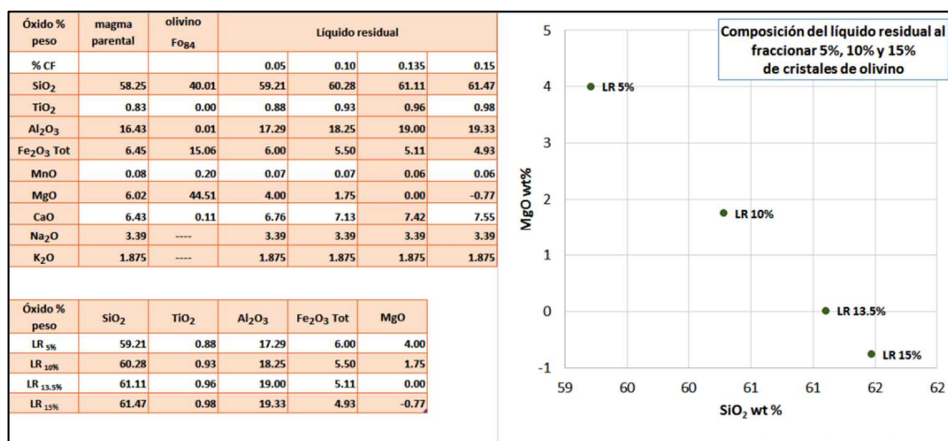


Figura 4. Solución al ejemplo 2. Cálculo de la composición del líquido residual después de separar diferentes fracciones de olivino. Se observa que cuando se cristaliza el 13.5 % del olivino, el MgO se agota. Las ecuaciones que lo resuelven se muestran en el texto. Para detalles de la programación ver la hoja de cálculo anexa.

Considerando al magma como la mezcla (MP), al olivino (ol) como una fase a y al líquido residual (LR) como otra fase b, entonces tenemos:

$$c_{MP}^i = (f_{ol} * c_{ol}^i) + (1 - f_{ol}) * c_{LR}^i$$

O bien,

$$c_{LR}^i = \frac{c_{MP}^i - (f_{ol} * c_{ol}^i)}{1 - f_{ol}}$$

Donde

f_{ol} = porcentaje de mezcla de olivino y líquido residual.

c_{ol}^i = concentración del componente i en el olivino

c_{MP}^i = concentración del componente i en la mezcla

c_{LR}^i = concentración del componente i en el líquido residual

Como se puede observar en la hoja de cálculo y en la figura 4, conforme se fracciona el olivino el líquido residual se empobrece en magnesio ya que este catión entra en la red cristalina del olivino magnésico. El valor negativo de Mg en el 15% de fraccionamiento indica que se ha agotado el olivino. El olivino se agota al fraccionarlo un 13.5%. El Na y K no entran estequiométricamente en la red cristalina del olivino ya que sus coeficientes de distribución varían entre 0.01 y 0.02 para el Na y entre 0.006 y 0.009 para el K (Geochemical Earth Reference Model (GERM)).

Balance de masa en sistemas magmáticos

Un sistema termodinámico está constituido por componentes y fases que mantienen ciertas relaciones de equilibrio. Uno de los grandes problemas que generalmente se presenta al estudiar un sistema magmático consiste en el gran número de dimensiones que se requieren para definir las relaciones entre componentes y fases al aplicar a un sistema la regla de fases de Gibbs:

$$f = C + 2 - \phi$$

Donde

f = número de grados de libertad; indica cuantas variables pueden ser cambiadas sin cambiar el número de fases presentes.

C = número de componentes químicos; son las unidades químicas que construyen las fases;

ϕ = número de fases separadas (minerales, fluidos o incluso magma)

Una fase, que puede ser un mineral en un sistema geoquímico se caracteriza por presentar propiedades químicas relativamente homogéneas y por tanto permanece físicamente distinguible en una mezcla. Al contrario, un componente de un sistema, el cual puede ser un elemento químico o un compuesto, al combinarse o mezclarse con otros componentes para formar una fase pierde su identidad química.

Desde el punto de vista matemático o de modelado de un sistema geoquímico, las relaciones entre fases y componentes, así como toda combinación de fases puede ser expresada por medio de otra combinación de multicomponentes y multifases ideales teóricas que mantienen ciertas relaciones lineales entre sí. Ambos términos pueden denominarse componentes ideales (*end members*) ó bien vectores composicionales de un sistema.

El manejo de componentes ideales o vectores de composición nos permite considerar cualquier composición total de una roca (sistema) o de una fase linealmente relacionada a un sistema para que puedan ser calculados como una combinación lineal de una serie de vectores de composición y viceversa. El uso de vectores composicionales nos permite reducir la dimensión matemática para representar espacialmente la combinación de una o más propiedades químicas de las rocas y minerales. Para ampliar la aplicación de álgebra lineal aplicado a la petrología se sugiere consultar Miesch y Reed (1979) y Albarède (1995; 2009).

Otra ventaja de establecer relaciones lineales entre fases y componentes consiste en que a partir de la determinación de una o más concentraciones de los componentes de las fases de la mezcla, es posible calcular la proporción en que estas fases estarían mezcladas mediante la regla de la palanca (Albarède, 1995) o balance de masas.

Considerando el balance de masas entre dos miembros finales que se pueden mezclar, tenemos que:

$$f = \frac{c_{mix}^i - c_{\alpha}^i}{c_{\beta}^i - c_{\alpha}^i}$$

$$c_{mix}^i = (1 - f) c_{\alpha}^i + f c_{\beta}^i$$

$$c_{\beta}^i = \frac{c_{mix}^i - c_{\alpha}^i(1 - f)}{f}$$

Donde:

f = porcentaje de mezcla entre las fases a y b

c_{mix}^i = concentración de componente i en la mezcla a-b

c_{α}^i = concentración de componente i en la fase a

c_{β}^i = concentración de componente i en la fase b

Ejemplo 3. Cálculo de la composición de una roca como una mezcla de componentes (minerales)

Un gabro contiene 15% de olivino Fo_{80} , 35% de piroxeno Wo_{49} y 50% de plagioclasa An_{50} (Ray et al, 2011). La composición mineral está dada en la Tabla 4. Calcule la composición de la roca entera.

Podemos escribir el sistema mineralógico de la roca como un arreglo matricial. La mezcla (gabro) estará dada por:

$$\begin{bmatrix} \text{óxido} \\ SiO_2 \\ Al_2O_3 \\ FeO \\ MgO \\ CaO \\ Na_2O \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ol & px & plg \\ 39.44 & 51.66 & 50.17 \\ 0.02 & 3.53 & 31.16 \\ 18.42 & 5.0 & 0.30 \\ 42.71 & 16.9 & 0.10 \\ 0.14 & 20.66 & 14.27 \\ 0.01 & 0.32 & 3.43 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \% \\ 0.15 \\ 0.35 \\ 0.50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} roca \\ 49.08 \\ 16.82 \\ 4.66 \\ 12.37 \\ 14.39 \\ 1.83 \end{bmatrix}$$

$$[6 \times 1] = [6 \times 3] * [3 \times 1] = [6 \times 1]$$

La composición química de la roca calculada y medida se observa en la Tabla 4. Se nota que la composición calculada es muy aproximada a la composición medida. La diferencia corresponde a los minerales accesorios que no se han tomado en cuenta para el cálculo y a la incertidumbre en la determinación de los óxidos de los elementos mayores.

TABLA 4

Composición química de las fases minerales de un gabro (Ray et al., 2011), así como la composición calculada y medida de la roca entera.

Mineral	Fo ₈₀	Wo ₄₉	An ₇₀	Gabro (calculado)		Gabro (medido)
% peso	15%	35%	50%	% peso		% peso
SiO ₂	39.44	51.66	50.17	49.08		48.01
Al ₂ O ₃	0.02	3.53	31.16	16.82		16.23
FeO	18.42	5.0	0.30	4.66		4.85
MgO	42.71	16.9	0.10	12.37		14.13
CaO	0.14	20.66	14.27	14.39		13.25
Na ₂ O	0.01	0.32	3.43	1.83		1.53
suma	100.7	98.1	99.4	99.2		98.0

Enriquecimiento y mezcla isotópica de sistemas magmáticos

Quizá la mejor evidencia del proceso de asimilación/contaminación que ocurre en los magmas, y que expresa la mezcla ideal de dos componentes, proviene del análisis de las relaciones isotópicas radiogénicas; es decir, de la presencia de isótopos que han derivado del decaimiento radioactivo de isótopos inestables. Un sistema bien conocido, de amplio uso en las Geociencias es el sistema Rb-Sr. El

^{87}Rb es un isótopo radioactivo que decae a ^{87}Sr con una vida media de $T_{1/2} = 48.8 \times 10^9$ años, poco más de 10 veces la edad de la Tierra.

Debido que el Rb es un elemento incompatible, éste es extraído del manto y reside en los líquidos corticales. La concentración promedio del Rb en la corteza superior es de 82 ppm (Rudnick y Gao, 2003), mucho mayor que la del manto primitivo, 0.64 ppm (Sun y McDonough, 1989). Por ello, la corteza continental estará enriquecida en ^{87}Sr en comparación con el manto. Además, entre más antigua sea la roca su relación isotópica $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ será mayor. Si los magmas derivados del manto asimilan o se contaminan con rocas corticales antiguas, entonces la relación $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ del magma resultante será mayor al del magma primitivo y tiende a valores de la corteza asimilada, dependiendo del grado de mezcla o proporción en que ambos miembros se mezclen.

El proceso de mezcla binario de dos miembros ideales genera una curva al graficar las relaciones isotópicas de $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ versus la concentración de Sr. Lo mismo sucede para otros elementos de interés geoquímico como el Nd. La relación Sm/Nd del manto primitivo es de 0.33, mientras que el valor Sm/Nd de la corteza superior es de 0.17 (Rudnick y Gao, 2003; Sun y McDonough, 1989), ya que el Nd es ligeramente más incompatible que el Sm; por ello, las rocas del manto tendrán valores radiogénicos $^{143}\text{Nd}/^{144}\text{Nd}$ mayores a los de la corteza. Este tipo de modelos son útiles para cuantificar el porcentaje de mezcla de dos miembros que suponemos intervinieron en el origen de las rocas de estudio. A diferencia de los procesos de contaminación y mezcla, los procesos cristalización fraccionada no cambian las relaciones isotópicas de los magmas.

Ejemplo 4. Cálculo de Mezcla binaria de dos componentes ideales (end members)

Se presume que un conjunto de rocas plutónicas de arco proviene de magmas derivados del manto que fue modificado a su paso a través de la corteza. A partir de los datos isotópicos y de concentración de Sr y Nd se estima el porcentaje en que ambos miembros debieron mezclarse para generar las firmas isotópicas de las rocas en estudio.

A partir de las ecuaciones de Faure (1986 y 1998):

$$Sr_M = Sr_A f_A + Sr_B (1 - f_A)$$

se calcula la variación del contenido de Sr en la mezcla manto-corteza conforme éstos se mezclan, desde 0 hasta el 100% (Figura 5a); con la ecuación

$$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_M = ^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_A f_A \frac{\text{Sr}_A}{\text{Sr}_B} + ^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_B (1 - f_A) \frac{\text{Sr}_B}{\text{Sr}_M}$$

se calcula la variación de las relaciones isotópicas $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ en la mezcla manto-corteza, desde 0 hasta el 100% (Figura 5b); y con la ecuación generalizada

$$R_M^X = \frac{R_A^X X_A f + R_B^X X_B (1 - f)}{X_A f + X_B (1 - f)}$$

se calcula la variación de las relaciones isotópicas de $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ y de $^{143}\text{Nd}/^{144}\text{Nd}$ en la mezcla manto-corteza, desde 0 hasta el 100% (Figura 5c).

Donde:

Sr_M = concentración del Sr en la mezcla

Sr_A = concentración del Sr en el componente A

Sr_B = concentración del Sr en el componente B

f_A = porcentaje de mezcla entre los componentes A-B

$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_M$ = relación isotópica de Sr en la mezcla

$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_A$ = relación isotópica de Sr en el componente A

$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}_B$ = relación isotópica de Sr en el componente B

R_M^X = relación isotópica del elemento X en la mezcla

R_A^X = relación isotópica del elemento X en el componente A

R_B^X = relación isotópica del elemento X en el componente B

X_M = concentración del elemento X en la mezcla

X_A = concentración del elemento X en el componente A

X_B = concentración del elemento X en el componente B

f = porcentaje de mezcla entre los componentes A-B

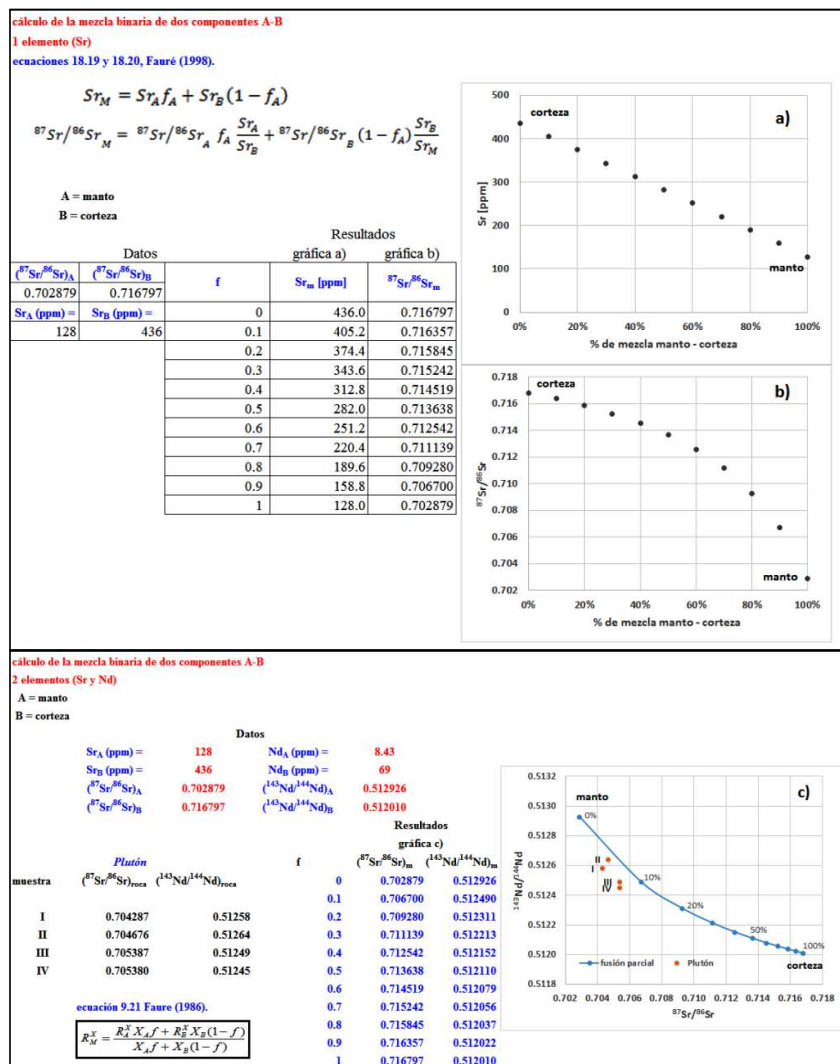


Figura 5. Ejemplo 4. Cálculo de mezcla binaria de dos componentes ideales (*end members*). a) Cálculo de la variación de la concentración de Sr conforme aumenta, desde 0 hasta 100%, el porcentaje de mezcla entre rocas del manto y la corteza. La concentración aumenta al aumentar la presencia cortical. b) Cálculo de la variación de la relación $^{87}Sr/^{86}Sr$ al aumentar el porcentaje de mezcla manto-corteza. El contenido de Sr radiogénico (^{87}Sr) aumenta conforme crece la presencia de la corteza en la mezcla. c) Cálculo de la curva de mezcla de los sistemas radiogénicos $^{143}Nd/^{144}Nd$ versus $^{87}Sr/^{86}Sr$ respecto a la proporción en que se mezclan el manto y la corteza del ejemplo. Se observa que las muestras del plutón yacen en el rango 0-10% que representan una mezcla corteza_{10%} – manto_{90%}. Valores del manto tomados de Nimz et al. (1993); valores de la corteza tomados de Ruiz et al. (1988 a y b); valores del Plutón tomados de Hernández-Bernal y Morán-Zenteno (1996). Para detalles de la programación ver la hoja de cálculo anexa.

Después de realizar los cálculos, se genera una curva hiperbólica, la cual representa la variación isotópica de ambos sistemas radiogénicos ($^{86}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ y $^{143}\text{Nd}/^{144}\text{Nd}$) respecto al porcentaje de mezcla. Se grafican los datos disponibles del plutón y se observa que las muestras I a IV yacen cerca de la curva entre el 0 y el 10% de mezcla. Por ello, se concluye que este conjunto tiene una firma isotópica principalmente mantélica con un máximo de 10% de asimilación cortical.

Conclusiones

Este trabajo retoma las ecuaciones ya establecidas hace décadas para mostrar que el primer acercamiento al modelado de procesos magmáticos puede ser relativamente sencillo al revisar brevemente cada concepto petrogenético y utilizar hojas de cálculo. Se muestra que las rocas, además de expresarse a través de una composición química y mineralógica, también pueden expresarse matemáticamente a través de arreglos vectoriales y matriciales.

Los ejemplos presentados aquí han sido tomados y modificados de la literatura por considerarlos representativos para explicar los procesos petrogenéticos de rocas ígneas. Se recomienda que los alumnos de nivel licenciatura y posgrado realicen lecturas de los trabajos clásicos de modelado (Shaw, 1970, Albarède, 1995 y Kumar y Singh, 2014) y realicen ejercicios como los presentados en este trabajo para familiarizarse con los conceptos de fusión parcial, diferenciación magmática, cristalización fraccionada, mezcla de magmas y coeficientes de distribución, los cuales son la base para reconstruir la historia magmática, a través de su composición química (elementos mayores y traza), de rocas y minerales.

Literatura citada

- Albarède F. (1995). *Introduction to Geochemical Modeling*. Cambridge University Press, 543 pp. 2009.
- Allègre, C.J. y Minster, J.F. (1978). Quantitative models of trace element behavior in magmatic processes. *Earth and Planetary Science Letters*, 38, 1-25.
- Benito-García R. y López Ruiz J. (1992). Mineralogical changes of the residual solid and trace-element fractionation during partial incongruent melting. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3705-3710.
- Benito-García R. y López Ruiz J. (1994). Modelización geoquímica de los procesos de fusión parcial. *Estudios Geol.*, 50, 291-308.

- Cebriá J. M. y López-Ruiz J. (1994). Modelización geoquímica de los procesos de diferenciación por cristalización. *Estudios Geol.*, 50, 309-322.
- De Paolo, D. (1981). Trace element and isotopic effects of combined wallrock assimilation and fractional crystallization. *Earth Planet. Sci. Letters*, 53, 189-202.
- Faure G. (1986). *Principles of Isotope Geology*. Wiley, 2nd. Ed., 589 pp.
- Faure G. (1998). *Principles and Applications of Geochemistry*. Prentice Hall, 2nd Ed., 600 pp.
- Geochemical Earth Reference Model (GERM): <http://earthref.org/GERM/>, consultado en agosto 2015.
- Gill R. (2010). *Igneous Rocks and Processes: A Practical Handbook*. Wiley-Blackwell, 428 pp.
- Hanson G. N. (1978). The application of trace elements to the petrogenesis of igneous rocks of granitic composition. *Earth Planet. Sci. Lett.* 38, 26-43.
- Hanson, G.H. (1980). Rare earth elements in petrogenetic studies of igneous systems. *Annual Reviews of Earth and Planetary Sciences*, 371-406.
- Hernández-Bernal M.S. y Morán-Zenteno D.J. (1996). Origin of the Río Verde Batholith, Southern Mexico, as inferred from its geochemical characteristics. *International Geology Review*, 38, 361-373.
- Hernández-Bernal M.S., Tolson G., y Solís-Pichardo G. (1997). Geoquímica de elementos traza y su relación con la petrogénesis de rocas ígneas: Modelos cuantitativos de procesos magmáticos, Parte I. *GEOS, Unión Geofísica Mexicana* 17 (1), 14-22.
- Hernández-Bernal M.S., Tolson G. y Solís-Pichardo G. (2000). Geoquímica de elementos traza y su relación con la petrogénesis de rocas ígneas: Modelado de sistemas isotópicos, Parte II. *GEOS, Unión Geofísica Mexicana* 20 (3), 107-118.
- Hernández-Bernal M.S., Corona-Chávez P., Solís-Pichardo G., Schaaf P., Solé-Viñas, J. y Molina, J. F. Miocene andesitic lavas of Sierra de Angangueo: a petrological, geochemical, and geochronological approach to arc magmatism in Central Mexico. (SOMETIDO a *International Geology Review*).
- Hertogen J. y Gijbels R. (1976). Calculation of trace element fractionation during partial melting. *Geochim. Cosmochim. Acta* 40 (3), 13-322.
- Irvine, T.N. y Baragar, W.R.A. (1971). A guide to the chemical classification of the common volcanic rocks: *Canadian Journal of Earth Sciences*, v. 8, p. 523-548.

- Klein C. y Philpotts A. (2013). *Earth Materials, Introduction to Mineralogy and Petrology*. Cambridge University Press, 537 pp.
- Kumar S. y R. N. Singh (Editors) (2014). *Modelling of Magmatic and Allied Processes*. Springer, Switzerland, 240pp.
- Lecomte, K. (2003). Verificación y validación de modelos geoquímicos realizados con un software específico. En L. A. Godoy (Editor), *Problemas del Conocimiento en Ingeniería y Geología I*, 65-76.
- Le Maitre, R. W., Bateman, P., Dudek, A., Keller, J., Lameyre, J., Le Bas, M. J., Sabine, P. A., Schmid, R., Sorensen, H., Streckeisen, A., Woolley, A. R., y Zanettin, B. (1989). *A Classification of Igneous Rocks and Glossary of Terms: Recommendations of the International Union of Geological Sciences Subcommittee on the Systematics of Igneous Rocks*. Oxford: Blackwell Scientific.
- Miesch A. T., y Reed, B. L. (1979). Compositional structures in two batholiths of circum-Pacific North America: U. S. Geol. Survey Prof. Paper 574-H.
- Nimz, G.J., Cameron, K.L. y Niemeyer, S., 1993, The La Olivina pyroxenite suite and the isotopic compositions of mantle basalts parental to mid-Cenozoic arc volcanism of northern Mexico: *Journal of Geophysical Research*, 98, 6489–6509.
- Ray D., Misra, S., Banerjee R. y Weis D. (2011). Geochemical investigation of gabbro from slow-spreading Northern Central Indian Ocean Ridge, Indian Ocean. *Geol. Mag.*, 148 (3), 404-422.
- Rudnick, R., y Gao, S. (2003). Composition of the Continental Crust. In: Rudnick, R.L. (Ed.), *The Crust: Treatise on Geochemistry*. Elsevier-Pergamon, Oxford, pp. 1–64.
- Ruiz, J., Patchett, P.J., y Arculus, R.J. (1988a), Nd-Sr isotope composition of lower crustal xenoliths—Evidence for the origin of mid-Tertiary felsic volcanics in Mexico: *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 99, 36–43.
- Ruiz, J., Patchett, P.J., y Ortega-Gutiérrez, F. (1988b). Proterozoic and Phanerozoic basement terranes of Mexico from Nd isotopic studies: *Geological Society of America Bulletin*, 100, 274–281.
- Schubert G., Turcotte, D. L., y Olson, P. (2001). *Mantle convection in Earth and planets*, Cambridge Univ. Press, 956 pp.
- Shaw, D. M. (1970). Trace element fractionation during anatexis. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 34, 237-243.
- Shaw, D. M. (1979). Trace element melting models. En L. H. Ahrens (ed.), *Origin and distribution of elements*, Pergamon Press, Oxford, 577-586.

- Sun, S. S. y McDonough, H. F. (1989). Chemical and isotopic systematics of oceanic basalts: implications for mantle composition and processes: Geological Society, London, Special Publications, 42, 313-345.
- Winter J. D. (2001). An introduction to igneous and metamorphic petrology. Prentice Hall, 697 pp.