

FUSION: Programa interactivo para la modelización de magmas graníticos por fusión parcial a partir del contenido en REE.

Luis A. ORTEGA CUESTA

Dpto Mineralogía-Petrología. Universidad del País Vasco. Apto 644, E-48080 Bilbao

RESUMEN

El Programa FUSION permite construir modelos sobre la génesis de magmas graníticos por fusión parcial de rocas de composición conocida (o supuesta). Este programa posibilita calcular diferentes composiciones modelo teniendo en cuenta la composición química de la roca que funde, el grado de fusión alcanzado (elegido) y la composición mineralógica del residuo. El programa permite conocer la distribución de las tierras raras (REE) en el líquido-modelo y en el residuo, así como la visión gráfica de los espectros de REE para el líquido-modelo y la muestra analizada como test de la validez del modelo.

Palabras clave: Fusión parcial. Tierras raras (REE). Mesonorma. BASIC.

ABSTRACT

The FUSION Program provides a mean to make several models about the origin of the granitic magmas by equilibrium batch partial melting of rocks with known compositions. This program permits to calculate different residuum compositions from rock composition and degree of melting chosen and to know the REE distribution in the liquid-model and residuum. This program permits graphic visualization of liquid-model and sample analyzed REE spectra as a test of validity of the model as well.

Key words: Batch partial melting. Rare earth elements (REE). Mesonorm. BASIC.

INTRODUCCIÓN

Los magmas graníticos pueden formarse durante los procesos de colisión continental por fusión parcial

de materiales crustales pre-existentes (con mayor o menor participación de componente mantélico) en las partes medias y bajas de la corteza continental engrosada tectónicamente (White y Chappell, 1977; Pitcher, 1982, etc.). En base a esta hipótesis para la formación de los magmas graníticos, diversos autores (e.g. Albuquerque, 1978; Gil Ibarra *et al.* 1984) han calculado modelos para el origen de granitos en áreas orogénicas. La génesis de los magmas graníticos en condiciones crustales se asume en dichos modelos que tiene lugar mediante un mecanismo del tipo "equilibrium batch partial melting" (Hanson, 1978). A fin de modelizar la génesis de un gran número de granitos del Noroeste del Macizo Ibérico para los cuales se dispone de abundantes análisis de roca total, tanto de elementos mayores como de elementos traza (incluyendo tierras raras - REE, Bellido *et al.*, 1987), se ha elaborado un programa denominado FUSION, que facilita la realización de este tipo de cálculos. Los resultados de la modelización efectuada utilizando dicho programa para algunos granitos del área mencionada han sido expuestos en otra parte (Ortega, 1987; Ortega y Gil Ibarra, *in litt.*).

El programa FUSION está escrito en BASIC Applesoft para un ordenador personal Apple//c que disponga de una impresora Imagewriter o similar. La modelización se efectúa teniendo en cuenta la distribución de las tierras raras. Para efectuar modelos sobre la génesis de granitos utilizando el programa FUSION es necesario saber la composición de la roca que funde (protholith) y la de la muestra (analizada) a modelizar (sample analyzed). El programa FUSION consta de dos partes de cálculo diferentes: (i) Cálculo

del residuo: porcentaje en peso de los óxidos y minerales que forman el residuo (mesonorm) y (ii) Cálculo de las concentraciones de REE en el líquido modelo y en el residuo.

El cálculo de la mesonorma se hace de forma interactiva y está preparado para no admitir errores de entrada, mientras que el cálculo de las concentraciones en REE se desarrolla de manera totalmente automática.

PRINCIPIOS DEL CÁLCULO

El comportamiento de los diferentes elementos durante el proceso de fusión parcial se ha determinado según diferentes ecuaciones según sean mayores o traza. Para los elementos mayores se ha utilizado una ecuación de balance de masas para determinar la tasa máxima de fusión y las proporciones de los elementos en el residuo. La restricción utilizada para calcular el grado máximo de fusión es el agotamiento de los álcalis en la roca fuente, es decir cuando en el residuo no queda nada de Na₂O y/o K₂O. La expresión adecuada para determinar esta tasa es: $F=C_0/C_1$; donde C₀ es la concentración en el material inicial y C₁ es la concentración en el fundido. Una vez elegida una tasa de fusión (F) la concentración en el residuo (C_r) de los elementos mayores (SiO₂, TiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃, FeO, MnO, MgO, CaO, Na₂O, K₂O, P₂O₅) se determina según la expresión:

$$C_r = \frac{C_0}{F} - C_1 \left[\frac{F}{1-F} \right] \quad (1)$$

recalculando el resultado al 100%. Conocido el porcentaje de los óxidos en residuo se divide cada uno por el peso molecular y se multiplica por el número de cationes que hay en cada molécula para determinar el % de equivalentes catiónicos. Esto nos permite calcular de forma interactiva la composición mineralógica del residuo de un modo más sencillo.

Minerales de la mesonorma

La composición de material restítico después de la segregación del líquido producido por la fusión parcial del material elegido se expresa como una norma equivalente (Burri, 1964). El programa FUSION permite crear hasta 13 minerales que pueden formar parte del residuo, estos son: Apatito, granate, esfena, biotita, anfíbol (hornblenda), cordierita, ortopiroxeno, clinopiroxeno, magnetita, feldespato-K, plagioclasa (albita+anortita), sillimanita, cuarzo, basado en los resultados experimentales obtenidos para materiales

graníticos (s.l.) y psammo-pelíticos por diferentes autores (Busch *et al.*, 1974; Hoffer y Grant, 1980; Clemmens y Vielzieuf, 1987).

Para varios minerales (granate, esfena, biotita, anfíbol (hornblenda), cordierita, ortopiroxeno, clinopiroxeno) se puede hacer variar la cantidad de catión que entra a formar parte de ese mineral; por defecto (pulsando "RETURN") será la cantidad restante del catión. Este mecanismo permite controlar tanto la cantidad de mineral que entra en el residuo como la fórmula de estos minerales.

Las características fundamentales para la formación de los minerales en el residuo son:

Apatito. Todo el P⁵⁺ entra a formar parte del apatito, si existe suficiente Ca²⁺.

Granate. Se calcula según la fórmula (Ca, Mg, Fe²⁺, Mn)₃ (Al, Fe³⁺)₂ Si₃ O₁₂, permitiendo calcular cualquier composición de granate. Las entradas para construir este mineral son Ca²⁺, Mg²⁺, Fe²⁺, Fe³⁺. El usuario deberá controlar que la composición del granate sea la de un granate natural.

Esfena. Si existe Ca²⁺ y Ti⁴⁺, que permite la existencia de este mineral la entrada será la del catión menos abundante.

Anfíbol (Hornblenda). Este programa está preparado para poder construir únicamente anfíboles cálcicos (Hornblendas) según la fórmula general:

A_x X₂ Y_{5-y} Al^{VI} [Al_{x+y} Si_{8-x-y}] O₂₂ (OH,F,Cl)₂ según Deer *et al.* (1966) y Leake (1978). La proporción de Al^{IV} puede variar entre 0 y 2.

A corresponde al Na siendo x ≤ 1.

X corresponde al Ca²⁺

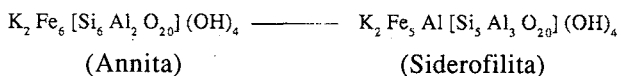
Y corresponde a Mg²⁺, Fe²⁺, Fe³⁺ siendo y ≤ 2 calculándose la cantidad de Al^{VI} de modo que y ≤ 2 - Fe³⁺

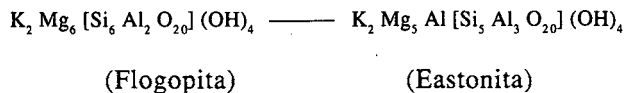
Según esta fórmula general se puede construir cualquier hornblenda (s.l.) entre los términos extremos: Tremolita Ca₂ Mg₅ Si₈ O₂₂, edenita Na Ca₂ Mg₄ Si₇ Al O₂₂, tschermakita Ca₂ Mg₃ Al₂ Si₇ Al O₂₂, pargasita Na Ca₂ Mg₄ Al Si₇ Al₂ O₂₂ y sus equivalentes términos férricos.

Las entradas para el cálculo de este mineral son para el Mg²⁺, Fe²⁺, Fe³⁺, Al^{VI} y Na⁺.

La proporción de Al^{VI} se calcula como Na⁺ + Al^{VI} + Fe³⁺.

Biotita. Se puede calcular cualquier biotita de la serie :





Según la fórmula: $K_2 (Mg, Fe^{2+}, Ti, Fe^{3+})_{6.5} Al_{0.1} [Si_{6.5} Al_{2.3} O_{20}] (OH)_4$

Las entradas para este mineral son: Mg, Fe²⁺, Ti, Fe³⁺ y proporción de Si en posición Z que debe estar entre 6 - 5 (Variable ZP).

La restricción para la cantidad de biotita está en que la cantidad de cationes en posición Y nunca puede ser mayor de 3 veces la cantidad de K.

El cálculo del Al en posición Y se hace en función a la relación Si-Al^{IV} de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$Al^{VI} (R1) = ZP * (Mg^{2+}, Fe^{2+}, Ti^{4+}, Fe^{3+}) / (6-ZP)$$

Cordierita. Se calcula según la fórmula $Al_3 (Mg^{2+}, Fe^{2+}) [Si_5 Al O_{18}] OH_4$. Están permitidas las composiciones extremas de esta serie.

Las entradas para este mineral son Mg²⁺ y Fe²⁺

Ortopiroxeno. Permite términos extremos de la serie Enstatita-Ortoferrosilita según la fórmula $(Mg^{2+}, Fe^{2+}) SiO_3$.

Las entradas son Mg²⁺ y Fe²⁺.

Clinopiroxeno. Permite términos extremos de la serie Diópsido - Hedembergita según la fórmula $Ca^{2+}(Mg^{2+}, Fe^{2+}) (Si_2O_6)$.

No permite la formación de este mineral si no queda Ca.

Las entradas son Mg²⁺ y Fe²⁺.

Magnetita. El excedente de Fe²⁺ y Fe³⁺ se asigna a este mineral automáticamente, siempre en partes iguales de ambos cationes hasta que se agota uno de ellos. El restante del otro catión no se asignará a ningún mineral, quedando libre en el residuo.

Feldespato K. El K restante pasa a formar parte del este mineral automáticamente.

Albita. El Na restante pasa a forma parte de este mineral automáticamente

Anortita. El Ca restante pasa a formar parte de este mineral automáticamente.

Sillimanita. El Al que queda todavía en el residuo se da como este mineral.

Cuarzo. El Si que queda se toma como cuarzo.

Cálculo de la distribución de las REE.

El cálculo de la distrución en el líquido de las REE se realiza según la expresión dada por Hanson (1978) para 'equilibrium batch partial melting':

$$\frac{C_1}{C_0} = \frac{1}{D_r (1-F) + F} \quad (2)$$

donde C₁ y C₀ son las concentraciones en el fundido y en el sólido inicial

D_r = Coeficiente de distribución global en el residuo

F = Tasa de fusión (masa del líquido/masa inicial).

$$D_r = \sum X_i Kd_{i/l}^{\alpha}$$

X_i = proporción en peso del mineral i en el residuo.

Kd_{i/l}^α = coeficiente de reparto para el elemento a entre el mineral i y el líquido.

Esta parte es totalmente automática, realizándose la lectura de los coeficientes de reparto (Kd) para cada elemento y mineral a partir de datos del programa (DATA, líneas 1983,1994), evitando la necesidad de introducir los coeficientes de reparto cada vez que se realice un cálculo. Sólo se utiliza un conjunto de coeficientes de reparto, es decir coeficientes de reparto fijos, justificándose por ser un proceso de fusión en equilibrio y debido al efecto 'buffering' de Vielzieuf y Holloway (1988) que implica que al aumentar la temperatura no varía la composición del fundido sino que el efecto obtenido es un aumento de la tasa de fusión.

EJECUCIÓN DEL PROGRAMA

El programa tiene un reducido número de entradas y salidas durante la ejecución del mismo, que pueden esquematizarse del siguiente modo:

Entradas del programa

Introducción de datos para la roca fuente (protholith) y para la roca analizada a modelizar (sample analyzed) mediante ficheros. La entrada se desglosa en cuatro ficheros, dos para el protolito, (i) para los datos de elementos mayores con el formato 'Nombre.Ox' y (ii) para las REE con formato 'Nombre.PPM'. Si los ficheros no existen el programa crea automáticamente

uno con el nombre indicado mas el sufijo 'Ox' o 'PPM' según el caso. Debiéndose introducir los óxidos en peso de los elementos mayores o bien las concentraciones en ppm de las REE (La, Ce, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Er, Yb, Lu; que son los analizados más frecuentemente).

Elección de la tasa de fusión (F). Nunca podrá ser mayor que lo permitido por la ecuación (2), y por defecto (pulsando 'RETURN') será la máxima tasa de fusión permitida según esta ecuación.

Cálculo de los minerales del residuo. Para los minerales con fórmula estequiométrica variable (p.e. Biotita, Hornblenda...) se debe introducir la proporción de cada catión que entra en la fórmula del mineral que se está calculando. En pantalla aparece la cantidad remanente de cada catión, no siendo posible introducir valores superiores al remanente para cada catión.

Salidas del programa

Valores de la distribución de REE tanto en el líquido formado por fusión, como en el residuo, así como en el protolito y la muestra que se está modelizando.

Salida gráfica a pantalla del espectro de REE normalizado frente al condrito (Evensen *et al.* 1978) que permite una rápida comparación del modelo-modelo realizado respecto a la muestra objeto de estudio.

Impresión de datos obtenidos para el modelo elaborado.

- Recuerdo de la ecuación utilizada
- Nombre de los ficheros de datos utilizados.
- Comentarios introducidos por el usuario.
- Tasa de fusión
- Composición en % en óxidos para la muestra analizada, el protolito y el residuo.
- Concentraciones en ppm en el fundido, residuo, protolito y muestra analizada.
- Composición de la mesonorma

LISTADO DEL PROGRAMA

Las personas que estén interesadas en obtener el listado del programa deberán solicitarlo por correo al autor y el programa les será enviado a vuelta de correo así como una pequeña guía de usuario donde se especifica de forma detallada el modo de manejo del programa.

CONCLUSIONES

El programa FUSION permite realizar de un modo rápido modelos para la génesis de líquidos de composición granítica por fusión parcial ("equilibrium batch partial melting") de materiales pre-existentes. Para la modelización se tiene en cuenta, además de los contenidos en elementos mayores, la distribución de tierras raras en el protolito, residuo y líquido modelo. Otras características destacables del programa son: (i) la creación automática de ficheros secuenciales para el protolito y la muestra analizada; (ii) la inclusión dentro del programa de los coeficientes de reparto para los minerales que pueden formarse en el residuo y (iii) la salida gráfica en pantalla del espectro de REE normalizado, lo que permite una rápida comparación del espectro modelo con el de la muestra analizada objeto de estudio. Algunas de las limitaciones del programa son: (i) el número limitado de fases que pueden constituir el residuo, (ii) el número limitado de REE que pueden ser calculadas y (iii) la utilización de coeficientes de reparto fijos. Por último cabe señalar que para el resto de elementos traza (p.e. LILE [large ion lithophile elements] Rb, Ba, Sr), este programa es fácilmente modificable para determinar su distribución y poder examinar la validez del modelo con el resto de elementos traza que el autor desee.

AGRADECIMIENTOS

Es deseo del autor expresar su agradecimiento al Dr J.I. Gil Ibarguchi, por su ayuda durante la realización del programa y sus críticas al manuscrito, así como a R. Vaquer por las críticas constructivas realizadas al manuscrito.

BIBLIOGRAFIA

- ALBUQUERQUE, C.A.R. de, 1978: Rare Earth elements in "Younger" granites Northern Portugal. *Lithos*, 11: 219-229.
- ARTH, J.G. y HANSON, G.N., 1975: Geochemistry and origin of early Precambrian crust of Northwestern Minnesota. *Geochim. Cosmochim. Acta*; 39: 325-362.
- BELLIDO MULAS, F., GONZÁLEZ LODEIRO, F., KLEIN, E., MARTÍNEZ CATALÁN, J. R. y PABLO MACIA, J. G. de, 1987: Las rocas graníticas hercínicas del Norte de Galicia y Occidente de Asturias: *Mem. 101, Inst. Geol. Min. España*, Madrid, 157 pp.
- BURRI, C., 1964: Petrochemical calculations based on equivalents (methods of Paul Niggli): *Sivan Press*, Jerusalem, 336 pp.
- BUSCH, W., SCHNEIDER, G. y MEHNERT, K. R., 1974: Initial melting at grain boundaries. Part II. Melting in rocks of granodioritic, quartzdioritic and tonalitic composition: *Neues Jahrb. Mineral. Mh.*, p. 345-370
- CLEMENS, J. D. y VIELZEUF, D., 1987: Constraints on melting and magma production in the crust: *Earth Planet. Sc. Letters*, 86: 287-306
- DEER, W.A. HOWIE, R.A. y ZUSSMAN, J., 1966: An introduction to the rock forming minerals, *Ed.: Logman*. London, 528p.

- EVENSEN, M.M., HAMILTON, P.L. y O' NIONS, R.K., 1978: Rare earth abundances in chondritic meteorites. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 42: 1199-1212
- FUJIMAKI, H., 1986: Fractional cristallization of the basaltic suite of Usu volcano Southwest Hokkido, Japan, an its relationship with asociates felsic suite. *Lithos*, 19: 120-140.
- GIL IBARGUCHI, J.I., BOWDEN, P. y WHITLEY, J.E., 1984: Rare earth element distribution in some Hercynian granitoids fromn Finisterre region NW Spain. *J. Geology*, 92: 397-416
- 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
- HOFFER, E. y GRANT, J. A., 1980: Experimental investigation of the formation of cordierite-orthopyroxene paragenesis in pelitic rocks: *Contrib. Mineral. Petrol.*, 73: 15-22
- LEAKE, B.E., 1978: Nomenclature of amphibole. *Miner. Magazine*, 42: 533-563.
- ORTEGA, L.A., 1987: *Tipología de tierras raras de granitos post-cinamáticos de Galicia (NW de España)*. Tesis de Licenciatura. *Universidad del País Vasco*. 144pp.
- ORTEGA, L.A. y GIL IBARGUCHI, J.I., en prensa: The genesis of Late-Hercynian granitoids from Galicia, Northwestern Spain). Inferences from REE studies. *J. Geology* .
- PITCHER, W.S., 1982: Granites types and tectonic environment. In: K.J. Hsu (Editor), *Mountain Boulding Processes*. Academic Press, Londres, pp.19-40.
- SIMMONS, E.C. y HEDGE, C.E., 1978: Minor-element and Sr-isotope geochemistry of Tertiary stocks, Colorado Mineral Belt. *Contr. Mineral. Petrol.*, 67: 379-396.
- WHITE, A. J. R. y CHAPPELL, B. W., 1977: Ultrametamorphism and granitoid genesis. In: D.H. Green (Editor), *Experimental Petrology Related to Extreme Metamorphism*. *Tectonophysics*, 43: 7-22
- VIELZEUF, D. y HOLLOWAY, J. R., 1988: Experimental determination of the fluid-absent melting relations in the pelitic system. Consequences for crustal differentiation: *Contrib. Miner. Petrol.*, v. 98, p. 257-276.

Recibido, marzo 1989