

# **ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**

## **FACULTAD DE GEOLOGÍA Y PETRÓLEOS**

### **UTILIZACIÓN DE PROGRAMAS COMPUTACIONALES EN EL ENTENDIMIENTO DEL METAMORFISMO Y LAS ROCAS METAMÓRFICAS**

**TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR PRESENTADO COMO  
REQUISITO PARA LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE INGENIERO GEÓLOGO**

**SANTIAGO ISMAEL RAMOS GALARZA**

**santiago.ramos01@epn.edu.ec**

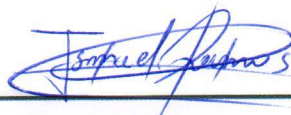
**DIRECTOR: PhD. DIEGO FERNANDO NARVÁEZ RIVADENEIRA**

**diego.narvaez@epn.edu.ec**

**Quito, septiembre 2022**

## CERTIFICACIONES

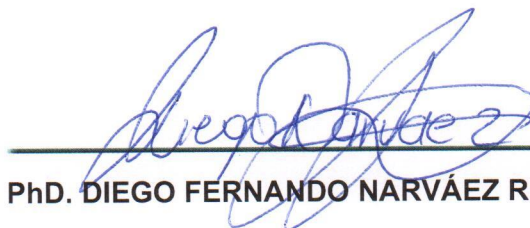
Yo, SANTIAGO ISMAEL RAMOS GALARZA declaro que el trabajo de integración curricular aquí descrito es de mi autoría; que no ha sido previamente presentado para ningún grado o calificación profesional; y, que he consultado las referencias bibliográficas que se incluyen en este documento.



---

**SANTIAGO ISMAEL RAMOS GALARZA**

Certifico que el presente trabajo de integración curricular fue desarrollado por SANTIAGO ISMAEL RAMOS GALARZA, bajo mi supervisión.



---

**PhD. DIEGO FERNANDO NARVÁEZ RIVADENEIRA**

## **DECLARACIÓN DE AUTORÍA**

A través de la presente declaración, afirmamos que el trabajo de integración curricular aquí descrito, así como el (los) producto(s) resultante(s) del mismo, son públicos y estarán a disposición de la comunidad a través del repositorio institucional de la Escuela Politécnica Nacional; sin embargo, la titularidad de los derechos patrimoniales nos corresponde a los autores que hemos contribuido en el desarrollo del presente trabajo; observando para el efecto las disposiciones establecidas por el órgano competente en propiedad intelectual, la normativa interna y demás normas.

SANTIAGO ISMAEL RAMOS GALARZA

PhD. DIEGO FERNANDO NARVAEZ RIVADENEIRA

## **DEDICATORIA**

Este trabajo está dedicado a todo aquel lector que se aventure a buscar información sobre pseudosecciones, espero que este pequeño espacio de conocimiento te ayude.

## **AGRADECIMIENTO**

Agradezco a toda mi familia en especial a mis padres Silvia y Ricardo por brindarme toda su sabiduría mediante el cariño, la paciencia y motivarme día a día a ser mejor y luchar por mis metas. A mi hermano Aaron por ser un apoyo emocional y convertirse en mi persona favorita. A mi primo Paúl por motivarme con la música y en mis proyectos personales. A Marianela por todo su apoyo y cariño.

A mi Karos por ser la persona vitamina durante toda mi travesía universitaria y especialmente por todo el amor que siempre me brindas.

A mi buen amigo Dani por ser la persona con quien más compartí durante toda la carrera y por todos los obstáculos que hemos superado juntos gracias a la ayuda del otro. Así mismo agradezco a Maricio por su amistad y por enseñarme que siempre hay una forma menos complicada para resolver los problemas.

A Jannis por ser una amiga excepcional, comprensible y apoyarme todo el tiempo. A Pou por todas las veces que hemos ido a campo juntos. A Fer por todas las discusiones geológicas que hemos tenido y también por enseñarme a mejorar constantemente.

A un gran ser humano y amigo, Xavier, que me ha enseñado a ver la vida de varias maneras mediante sus reflexiones filosóficas.

A Nao por todas las veces que hemos compartido dentro y fuera de la universidad desde que nos conocimos en el curso de nivelación.

A mis profesores, en especial a Janeth por motivarme a continuar con la carrera. A Diego por permitirme realizar este trabajo bajo su guía y conocimiento. A Fabian por su ayuda con Perple\_X. A Sandra por ser una gran profesora y apoyo dentro de la facultad.

A todos mis compañeros y amigos de la Poli, especialmente a Lucho, Edi, Octavo, Juanjo, Belén, H.A., Yadi, Pato, Danny y Daniel V., por haber compartido tantos momentos juntos.

A mis superiores durante mis pasantías: Yesenia, María José y Angélica por confiar en mis habilidades permitiéndome colaborar en distintos proyectos y enseñarme como es el campo laboral.

A todos aquellos que he olvidado mencionar, pero que siempre han aportado de manera positiva a mi vida, mil gracias.

# ÍNDICE DE CONTENIDO

CERTIFICACIONES .....	I
DECLARACIÓN DE AUTORÍA .....	II
DEDICATORIA .....	III
AGRADECIMIENTO .....	IV
ÍNDICE DE CONTENIDO .....	V
ÍNDICE DE FIGURAS .....	VII
ÍNDICE DE TABLAS .....	X
RESUMEN.....	XI
ABSTRACT .....	XII
1 INTRODUCCIÓN .....	1
1.1 Antecedentes.....	2
1.2 Justificativo.....	2
1.3 Objetivo general .....	2
1.4 Objetivos específicos.....	2
1.5 Alcance y organización de este trabajo.....	3
2 MARCO TEÓRICO .....	4
2.1 Metamorfismo.....	4
2.2 Sistema termodinámico, fases, equilibrio termodinámico y paragénesis mineral .....	4
2.3 Regla de fases de Gibbs .....	6
2.3.1 Tipos de equilibrio de fase .....	6
2.4 Diagramas de composición.....	7
2.5 Diagrama de fases.....	8
2.6 Diagrama petrogenético o red petrogenética .....	9
2.7 Diagrama de fases de equilibrio o pseudosección .....	10
2.8 Energía libre de Gibbs .....	11

2.9	Métodos de cálculo de pseudosecciones.....	12
3	METODOLOGÍA.....	13
3.1	Construcción de pseudosecciones.....	13
3.1.1	THERMOCALC.....	13
3.1.2	Perple_X.....	14
3.1.3	Theriak-Domino.....	15
3.1.4	GeoPS.....	17
3.2	Comparación entre los programas computacionales.....	18
4	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	19
4.1	Comparación de programas computacionales para la creación de pseudosecciones.....	19
4.1.1	Comparación en base a su uso en la academia.....	19
4.1.2	Tiempo de instalación e interfaz.....	20
4.1.3	Reproducibilidad de las pseudosecciones.....	20
4.2	Uso de pseudosecciones en la solución de problemas petrológicos.....	37
4.3	Comparación entre los datos obtenidos usando pseudosecciones y aquellos de geotermobarometría convencional.....	44
4.4	Ventajas y limitaciones de las estrategias de cálculo de pseudosecciones....	46
4.5	Uso de bases de datos termodinámicas en la construcción de pseudosecciones.....	47
5	CONCLUSIONES.....	49
6	RECOMENDACIONES.....	50
7	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	51
8	ANEXOS.....	55

## RESUMEN

El modelamiento termodinámico se ha convertido en una herramienta indispensable para el entendimiento del metamorfismo y las rocas metamórficas. En este trabajo se compara cuatro programas computacionales (THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS) ampliamente utilizados en la generación de pseudosecciones. Aquí se discuten las ventajas y desventajas de los 4 programas computacionales basados en: la frecuencia de uso, tiempos de cálculo, facilidad de instalación y para la presentación de resultados.

En este trabajo se evidencia que Perple\_X es una mejor opción que THERMOCALC debido a su cálculo automatizado de fases minerales y a la facilidad de visualizar los resultados. THERMOCALC, por el contrario, requiere que el usuario tenga un amplio conocimiento de las reacciones que ocurren en rocas metamórficas. Perple\_X, al igual que el nuevo programa GeoPS, permite utilizar diferentes bases de datos termodinámicas, modelos de actividad minerales, convirtiéndolo en la mejor opción para el cálculo de pseudosecciones de composiciones de rocas muy variadas.

El paquete de programas Theriak-Domino tiene un gran potencial debido a su código abierto. Sin embargo, este programa presenta problemas para el cálculo de pseudosecciones debido a su incompatibilidad con bases de datos termodinámicas más recientes.

Adicionalmente, en este trabajo se utilizó el programa Perple\_X junto con los datos geoquímicos de John et al. (2010) para calcular una pseudosección de una eclogita del complejo Raspas. Los datos obtenidos luego del análisis de la pseudosección coincide con aquellos obtenidos mediante geotermobarometría tradicional y corresponde a valores de metamorfismo de  $13.5 \pm 5.5$  kbar y  $550 \pm 50$  °C.

**PALABRAS CLAVE:** pseudosecciones, modelamiento termodinámico, cálculo automatizado, geotermobarometría.



## ABSTRACT

Thermodynamic modeling is an indispensable tool for understanding metamorphic rocks. In this work, I compare four software (THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino and GeoPS) that are widely used in the determination of equilibrium phases, principally in the generation of pseudosections. I discuss the pros and cons of four software based on: their usage frequency by the scientific community, the time duration for pseudosection calculation, and the ease of installation and for the presentation of results.

A review of scientific papers published in 2020 and 2021 shows that the scientific community prefers THERMOCALC and Perple\_X. In this work, I concluded that Perple\_X is a better option than THERMOCALC due to its automated calculation and results visualization. On the opposite, THERMOCALC requires the user to have an extensive knowledge of metamorphic petrology. Perple\_X, similarly to GeoPS (launched in 2021), allows the usage of different thermodynamic databases, mineral activity models which makes it a better option for pseudosections calculation.

The programs package Theriak-Domino have a bright future because of their open-source code. Nevertheless, at the time of writing this report Theriak-Domino shows errors during pseudosection calculation due to its incompatibility with more recent thermodynamic databases.

Furthermore, in this work, I used Perple\_X to calculate a pseudosection for an eclogite from the Raspas metamorphic complex using geochemical data from John et al. (2010). The pressure and temperature obtained for the metamorphism, after the pseudosection analysis, coincides with those obtained by traditional geothermobarometry and corresponds to  $13.5 \pm 5.5$  kbar and  $550 \pm 50$  °C.

**KEYWORDS:** pseudosections, thermodynamic modeling, automated calculation, geothermobarometry.

# CAPÍTULO I

## 1 INTRODUCCIÓN

### 1.1 Antecedentes

El modelamiento termodinámico, específicamente el uso de pseudosecciones, se ha incrementado considerablemente en los últimos 40 años como herramienta para la interpretación petrológica y la interpretación geofísica. Una pseudosección corresponde a un diagrama P-T, P-X o T-X calculado para una composición de roca total fija, en el que se muestran los diferentes campos de estabilidad o paragénesis mineral.

El cálculo de pseudosecciones fue realizado por primera vez por Hensen (1971), aunque el término “pseudosección” fue introducido más tarde durante el estudio de segregaciones metamórficas asociadas al crecimiento de porfiroblastos de granate y piroxeno realizado por Stüwe & Powell en 1989.

Varios códigos se han escrito desde entonces con el fin de modelar las propiedades termodinámicas de las rocas usando datos geoquímicos (e.g. MELTS, winTWQ, MAGEMin). El primer programa para el modelamiento termodinámico fue GIBBS de Spear & Menard (1989) que funcionaba como una calculadora de fases de equilibrio. Este principio de funcionamiento fue mejorado posteriormente con THERMOCALC. Con el avance del procesamiento computacional el método de minimización de la energía libre de Gibbs fue implementado inicialmente en Perple\_X, luego en Theriak-Domino y actualmente este método sigue en constante mejoramiento en GeoPS.

Debido a los diversos métodos de cálculo entre los programas computacionales disponibles, el usuario dependiendo de la experticia, precisión y el tiempo de procesamiento requerido, está en la capacidad de elegir cual es el mejor programa para solucionar problemas petrológicos específicos.

El avance del modelamiento termodinámico ha permitido responder a ciertas interrogantes como por ejemplo la paragénesis mineral a lo largo de la zona de subducción (e.g., Avellaneda-Jiménez et al., 2022; Piccoli et al., 2022; Zhang et al., 2017), condiciones de presión y temperatura durante metamorfismo orogénico (e.g Liu et al., 2021; Papeschi et al., 2020; Siron et al., 2020) o de contacto (e.g., Ceccato et al., 2020; Goncalves et al., 2021; Wisniowski et al., 2021).

## **1.2 Justificativo**

El presente documento corresponde a un resumen del trabajo realizado durante el último año de la carrera de Geología, en las materias de diseño del trabajo de integración curricular y trabajo de integración curricular, y representa un requisito previo para la obtención del título de Ingeniero Geólogo.

La importancia de este trabajo radica en la necesidad de determinar condiciones P-T de rocas metamórficas mediante el modelamiento termodinámico de fases de equilibrio usando programas computacionales y la representación de datos en forma de pseudosecciones. Puesto que los procesos que atraviesa una roca metamórfica son dependientes de la presión, temperatura y composición, los programas de modelamiento termodinámico realizan cálculos iterados fijando uno de los parámetros y variando los otros dos parámetros restantes. Gracias a este procedimiento los resultados observados pueden ser comparados con los modelados, permitiendo hacer interpretaciones de las condiciones de metamorfismo.

## **1.3 Objetivo general**

Comparar el desempeño de los programas computacionales: THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS durante el cálculo y construcción de diagramas de estabilidad mineral (pseudosecciones).

## **1.4 Objetivos específicos**

1. Reproducir diagramas de estabilidad mineral con cada uno de los cuatro programas computacionales.
2. Discutir la aplicabilidad de las pseudosecciones como indicadores de presión y temperatura de rocas metamórficas.
3. Generar diagramas de estabilidad mineral usando datos geoquímicos publicados.

## 1.5 Alcance y organización de este trabajo

Para este trabajo se ha seleccionado 4 programas computacionales ampliamente utilizados en el campo de la petrología metamórfica en la construcción de diagramas de estabilidad mineral, con el fin de comparar su rendimiento y determinar el programa computacional más conveniente para ser usado en estudios futuros.

Los programas seleccionados son: THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS. Una vez instalado cada uno de estos programas, se ha generado pseudosecciones a partir de datos publicados y se ha comparado con los presentados en artículos científicos. Esta parte del proyecto me permitió dominar las funcionalidades de los programas seleccionados y comprender todos los parámetros involucrados durante la construcción de pseudosecciones (ej. modelos minerales, composición de fluidos). Durante este proceso de aprendizaje sobre el uso de los programas computacionales seleccionados, se pudo encontrar ventajas e identificar desventajas de cada uno de ellos. La primera parte de mi proyecto se encuentra desarrollada en los capítulos 1-3. El capítulo 1 muestra los objetivos de mi trabajo y una explicación de la problemática que se ha querido resolver. El capítulo 2 define conceptos básicos de la termodinámica que son necesarios mencionar para la comprensión del modelamiento computacional de fases de equilibrio. El capítulo 3 muestra una descripción y un resumen del algoritmo de cálculo de cada programa.

En el capítulo 4 se presenta las pseudosecciones construidas con cada uno de los programas.

Una segunda parte de mi proyecto consistió en crear una pseudosección para una eclogita proveniente del complejo metamórfico Raspas, específicamente proveniente de la unidad La Chilca (Aspden et al., 1995). Para esto se ha utilizado los datos publicados de John et al. (2010) que presenta composición de roca total y de minerales. La pseudosección obtenida muestra que la paragénesis mineral de la eclogita analizada es granate + onfacita + rutilo + anfíbol ± cuarzo ± fengita ± carbonato e indica condiciones de temperatura de ~600 °C y presiones de ~1.5 GPa similares a las reportadas por Feininger (1980) y por John et al. (2010). Una discusión más completa es desarrollada al final del capítulo 4. El capítulo 5 presenta las principales conclusiones y recomendaciones de mi trabajo. Finalmente, en los anexos presento las abreviaturas minerales usadas en las pseudosecciones y una guía rápida de THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS.

# CAPÍTULO II

## 2 MARCO TEÓRICO

En esta sección presento los principales conceptos de termodinámica y metamorfismo necesarios para desarrollar los siguientes capítulos.

### 2.1 Metamorfismo

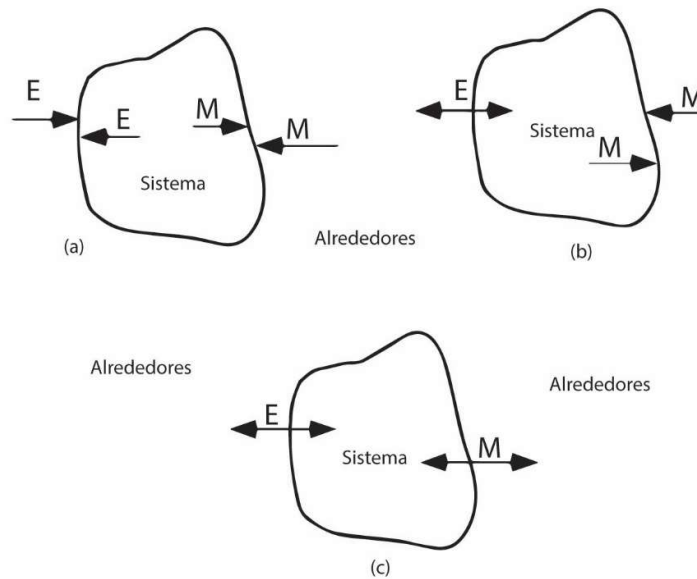
El metamorfismo es el proceso que permite cambiar las características texturales, geoquímicas y minerales de una roca en respuesta a cambios de temperatura, presión o composición (Allaby, 2013). Este proceso tiene lugar cuando una roca se expone a un entorno físico o químico que es significativamente diferente de aquel en el que se formó inicialmente. De esta manera, cualquier cambio en el entorno podría causar metamorfismo y a su vez la cristalización de nuevas fases minerales (Winter, 2014).

### 2.2 Sistema termodinámico, fases, equilibrio termodinámico y paragénesis mineral

Un **sistema termodinámico** se define como una cantidad de materia o una región en el espacio. La masa o región fuera del sistema se llama entorno y la superficie que separa el sistema y el entorno se llama límite (Okawa et al., 2021).

De acuerdo a McSween et al. (2003) hay tres tipos genéricos de sistemas (Fig. 1) los cuales se encuentran definidos por la condición de sus límites y son: aislados, cerrados y abiertos. Los sistemas aislados no pueden intercambiar ni materia ni energía con el universo más allá de sus límites. Los sistemas cerrados son aquellos en los que existe el intercambio de energía, pero no de materia y los sistemas abiertos son aquellos que pueden intercambiar energía y materia.

En este documento el término sistema se utiliza para definir una gama de composiciones químicas, por ejemplo, todas las composiciones posibles en  $K_2O$ - $FeO$ - $MgO$ - $Al_2O_3$ - $SiO_2$ - $H_2O$  se lo conoce como sistema KFMASH.



**Fig. 1.** Tipos de sistemas termodinámicos. (a) aislado, (b) cerrado y (c) abierto. Las flechas indican el intercambio de energía, así, si la flecha es doble existe intercambio de energía en ambas direcciones, pero si la flecha es simple no es posible el intercambio. E = energía, M = materia, modificado de Cemič (2005).

Una **fase** es una sustancia homogénea, de composición fija o variable, con propiedades químicas y físicas uniformes.

Se dice que un **sistema termodinámico está en equilibrio** cuando las fases del sistema coexisten manteniéndose constantes a través del tiempo (Klein, 2019) y los niveles de energía de las fases son mínimas. El equilibrio termodinámico se da en un sistema de composición fija que se encuentra bajo condiciones establecidas y una configuración (arreglo molecular, estructura) que posee un nivel mínimo de energía (Anderson y Crerar, 1993). Las configuraciones que tienen niveles de energía más altos tienden a reorganizarse espontáneamente para reducir su nivel de energía (perdiendo calor, homogeneizándose, recristalizándose, etc.) y llegar a un estado de equilibrio. En ocasiones la reorganización no es posible, ya sea por una restricción física o por una barrera de energía, lo que se conoce como estado de energía metaestable.

Cuando dos o más fases llegan al equilibrio bajo las mismas condiciones de presión y temperatura, el conjunto mineral presente en la roca se denomina **paragénesis**. La paragénesis en rocas metamórficas depende de cuatro factores:

- La composición química de la roca original (generalmente referida con la letra "X").

- La presión (P)
- La temperatura (T).
- La composición de cualquier fase fluida que estuvo presente al tiempo del metamorfismo.

Con el cambio de la P y T, los minerales reaccionan cambiando su composición hasta alcanzar nuevamente un equilibrio químico. Mientras mayor es el tiempo al que una roca se encuentra a una sola P y T, existe una mayor probabilidad que sus minerales se encuentren al equilibrio. Dado que el metamorfismo generalmente involucra largos períodos de tiempo geológico, la mayoría de las rocas metamórficas representan un conjunto de minerales en equilibrio o paragénesis mineral (Nelson, 2011).

## 2.3 Regla de fases de Gibbs

La regla de fases de Gibbs permite determinar el número de grados de libertad o la variancia de un sistema químico. Si consideramos que el sistema se encuentra en equilibrio tenemos que:

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

Donde,

$\phi$ : es el número de **fases** en el sistema.

C: es el número de **componentes**, es decir la cantidad mínima de constituyentes químicas para especificar cada fase en el sistema.

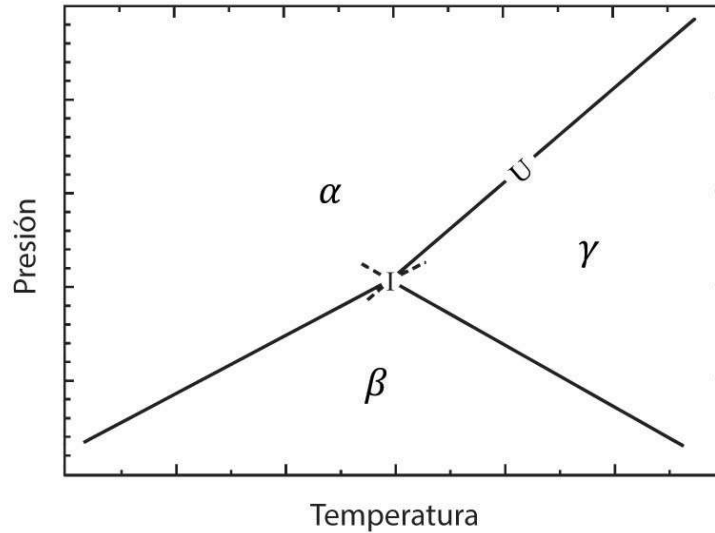
F: es el número de **grados de libertad** y se refiere a la cantidad de parámetros intensivos (T, P, X, etc.) que pueden ser variados independientemente sin que cambie el número de fases del sistema.

### 2.3.1 Tipos de equilibrio de fase

Equilibrio invariante (F=0): en el que estado del sistema está definido por una P y T que no pueden ser cambiados (representado por el punto invariante "I" en la Fig. 2).

Equilibrio univariante (F=1): en el que P o T pueden ser cambiados independientemente, pero para mantener el estado del sistema tiene que existir un cambio correspondiente de la otra variable (representado por la curva univariante "U" en la Fig. 2).

Equilibrio divariante ( $F=2$ ) en el cual presión y temperatura son libres de cambiar independientemente sin cambiar el estado del sistema (representado por los campos que se encuentran limitados por curvas univariantes en la Fig. 2).

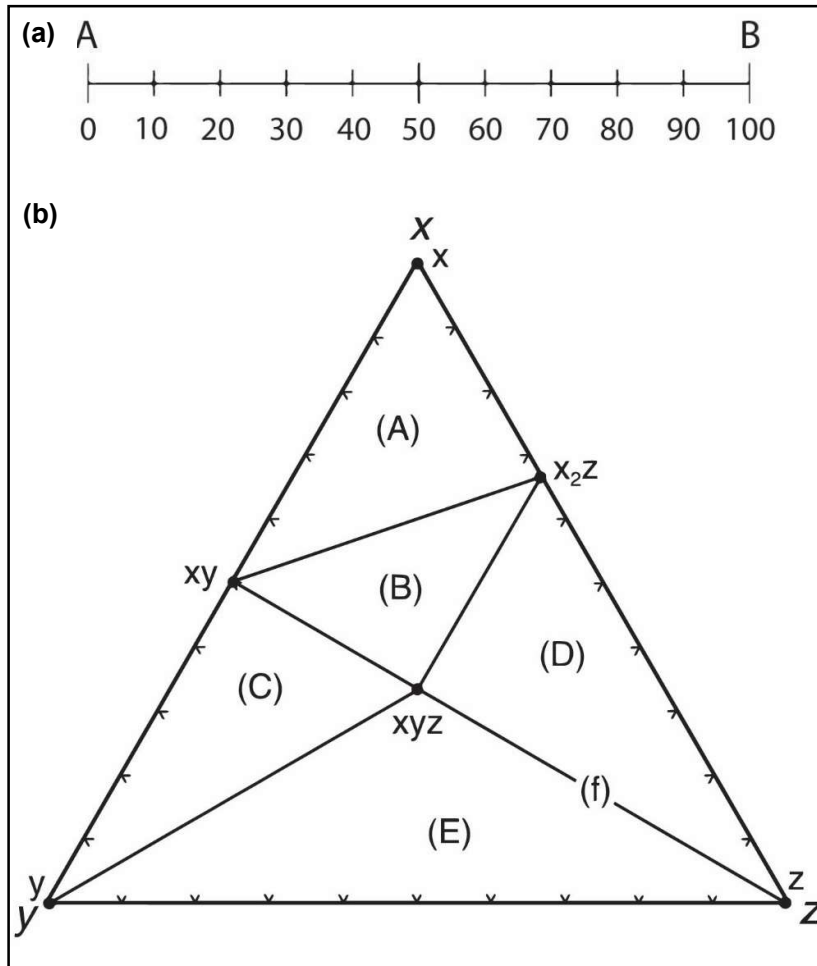


**Fig. 2.** Diagrama P-T de 3 fases  $\alpha, \beta, \gamma$  (campos bivariantes), las líneas segmentadas representan las reacciones metaestables. U = curva univariante e I = punto invariante.

## 2.4 Diagramas de composición

Los diagramas de composición son una representación gráfica de la variación composicional de un sistema termodinámico. Cuando el sistema está compuesto de dos componentes se conoce como sistema binario y la variación se representa utilizando una línea. Cuando el sistema está formado por tres componentes, se conoce como sistema ternario, y su variación se representa en un triángulo (Fig. 3).

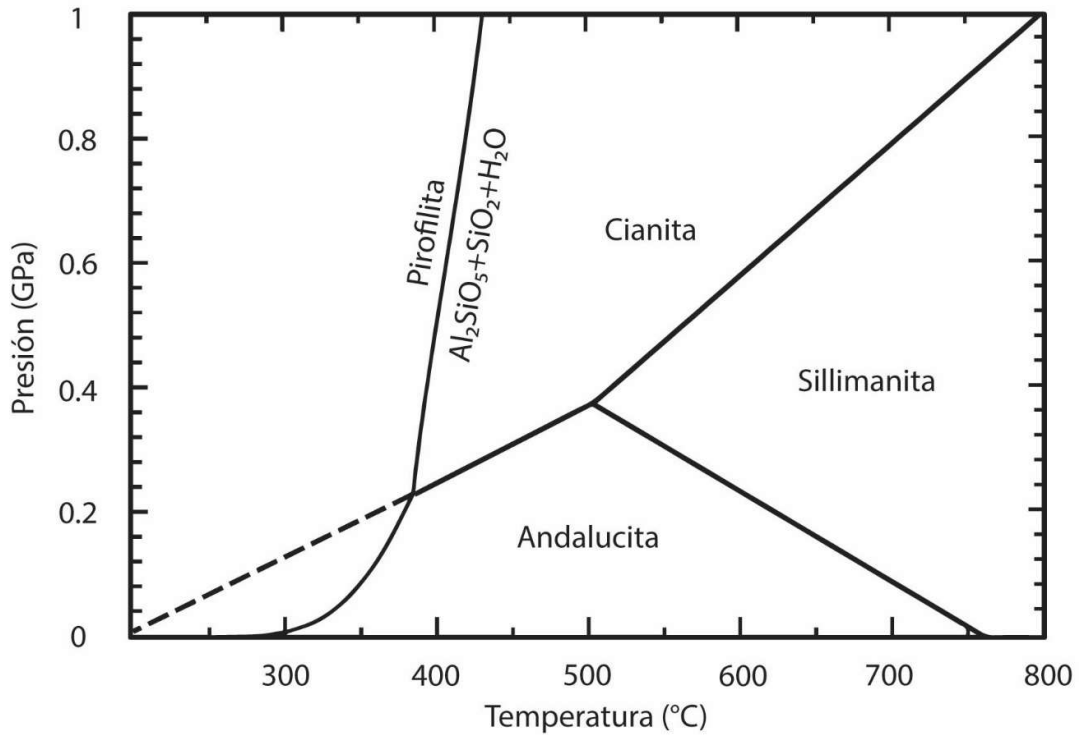




**Fig. 3.** (a) Diagrama de composición binario A-B. (b) Diagrama de composición ternario x-y-z con (A), (B), (C), (D) y (E) como campos bivariantes, (f) curva univariante y finalmente x, y, z, xy, x<sub>2</sub>z, xyz son puntos invariantes.

## 2.5 Diagrama de fases

Los diagramas de fase son representaciones gráficas que muestran las zonas de estabilidad de minerales al equilibrio y la relación entre ellas. Estas relaciones se rigen por las leyes de la termodinámica. Los diagramas de fase muestran cómo cambian las fases o los conjuntos de fases en función de la temperatura, la presión, la composición de las fases o combinaciones de estas variables (Perkins & Brady, 2016). Los diagramas de fases se representan generalmente en un diagrama P vs. T (Fig. 4).

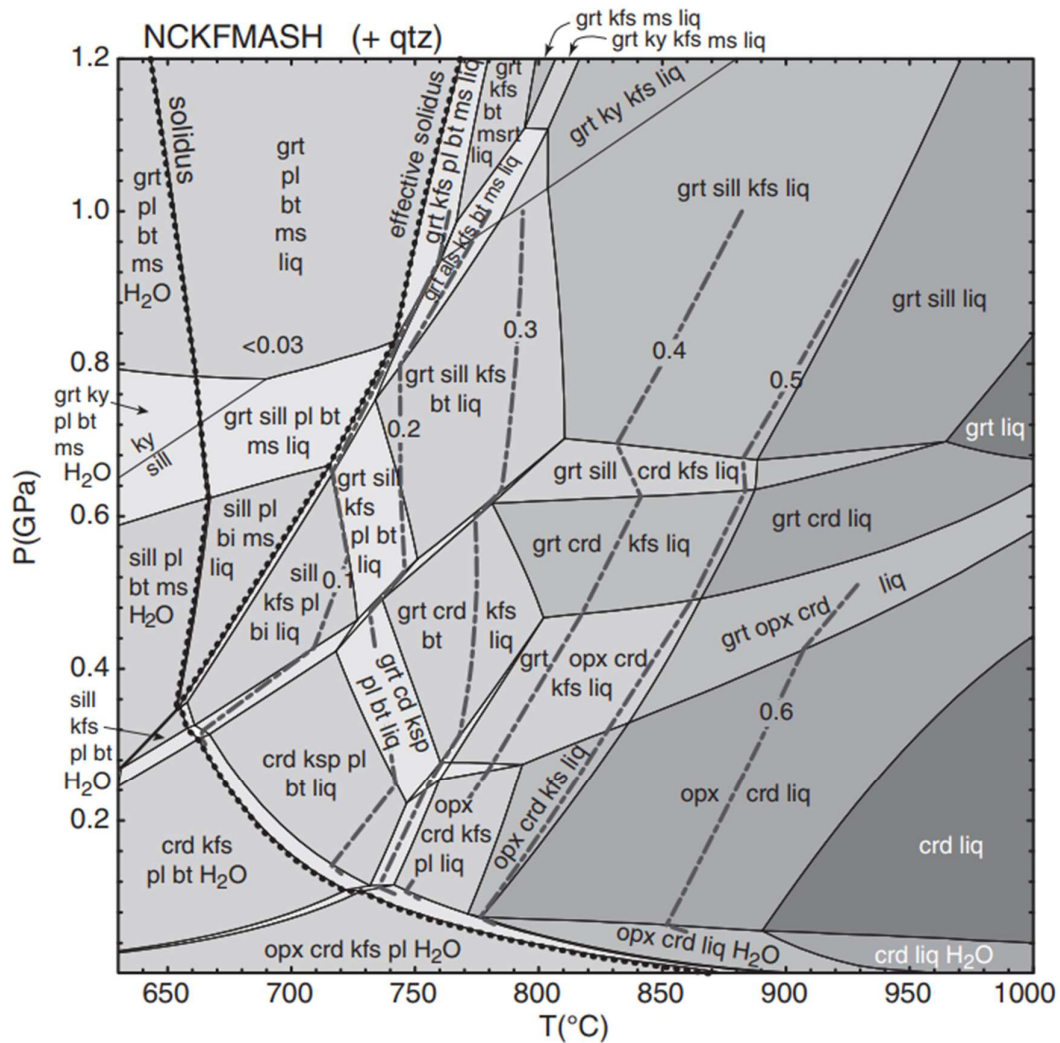


**Fig. 4.** Diagrama de fase P-T para el sistema  $Al_2SiO_5$  mostrando los campos de estabilidad de la andalcita, cianita y sillimanita. El diagrama muestra el campo de estabilidad de la pirofilita que presenta una composición similar al resto de minerales, excepto por la presencia de agua en su estructura. Modificado de Winter (2014).

## 2.6 Diagrama petrogenético o red petrogenética

Un diagrama petrogenético muestra las reacciones químicas entre minerales o conjunto de minerales que pueden existir en un sistema químico sin especificar la composición de una roca (Hirsch et al., 2016). Un diagrama petrogenético muestra líneas de reacción en un sistema de coordenadas cartesianas de P-T y puede ser utilizado para obtener los rangos de estabilidad de dichos minerales.





**Fig. 6.** Pseudosección de metapelita de Powell et al. (1998) con datos composicionales en mol.% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> = 30.66, FeO = 23.74, MgO = 12.47, CaO = 0.97, Na<sub>2</sub>O = 1.94, K<sub>2</sub>O = 9.83, and H<sub>2</sub>O = 20.39 y SiO<sub>2</sub> en exceso, tomado de Winter (2014).

## 2.8 Energía libre de Gibbs

La energía libre de Gibbs es una medida de la energía química. Esta energía, para una fase, está dada por la siguiente ecuación:

$$G = H - TS$$

Donde:

G, es la energía libre de Gibbs

H, es la entalpia.

T, es la temperatura.

S, es la entropía.

Para cualquier reacción química que ocurre a P y T constantes, la variación de la energía libre de Gibbs entre los productos y los reactantes es la responsable de la ocurrencia de la reacción. Si los productos tienen una energía libre de Gibbs que es menor a la de los reactantes ( $\Delta G$  tiene signo negativo, siendo  $\Delta G = G_{\text{Productos}} - G_{\text{Reactantes}}$ ), la reacción es espontánea, es decir la reacción procede a dichas condiciones de P y T. Si los productos y reactantes tienen igual G se dice que ellos están en equilibrio y la  $\Delta G = 0$ . La G de una fase estable o en equilibrio siempre es mínima.

## 2.9 Métodos de cálculo de pseudosecciones

Un problema fundamental de la termodinámica es determinar el estado de equilibrio final (i.e., mineralogía de una roca metamórfica). Para esto, se pueden seguir dos enfoques: uno basado en la minimización de la energía de Gibbs de cada una de las fases consideradas y que permite predecir la mineralogía de las rocas en función de la presión, la temperatura y la composición (Connolly, 2017); otro, basado en la solución de un conjunto de ecuaciones no lineales. Para el segundo enfoque se considera que: las composiciones de las fases minerales involucradas en una reacción y las relaciones de actividad-composición de las mismas están representadas por una ecuación no lineal dependiente de la temperatura y presión. La solución de esta ecuación no lineal, digamos a una temperatura particular, se complica por el hecho de que puede haber ninguna, una, o dos presiones calculadas. Así, este enfoque necesita de un algoritmo que resuelva el conjunto de ecuaciones no lineales, para la presión en función de la temperatura y viceversa. Dicho algoritmo propone una ventana P-T en la que se espera se encuentren todas las temperaturas y presiones calculadas con el único supuesto de que existe a lo mucho un punto máximo o un mínimo en la función no lineal dentro de la ventana (Powell & Holland, 1985).

# CAPÍTULO III

## 3 METODOLOGÍA

### 3.1 Construcción de pseudosecciones

El modelamiento computarizado de fases de equilibrio requiere de programas que puedan leer datos termodinámicos de fases minerales o miembros finales (e.g., entalpía, entropía, volumen) a condiciones ambientales (1 bar y 298 K) estructuradas en forma de base de datos. La composición de la roca en porcentaje en peso (o en moles) de cada elemento es el único dato de entrada obligatorio para el cálculo. Otros parámetros como la composición de los fluidos o fugacidades de especies volátiles son opcionales, aunque siempre es recomendado su uso para obtener una representación más cercana a la realidad.

Una vez definidos todos los parámetros composicionales y seleccionada la base de datos termodinámica adecuada para el tipo de roca, el programa realiza los cálculos de la energía libre de Gibbs (e.g., minimización de G, solución de ecuaciones de estado para que  $\Delta G=0$ ) que finalmente se grafican en un diagrama P-T.

La construcción de pseudosecciones en este trabajo se llevó a cabo utilizando los programas: THERMOCALC (Powell et al., 1998), Perple\_X (Connolly, 2009), Theriak-Domino (Capitani & Petrakakis, 2010) y GeoPS (Xiang & Connolly, 2021). Aquí se utilizaron los manuales de usuario sugeridos por cada autor para la instalación de los programas computacionales.

A continuación, se presenta una descripción de cada uno de los programas.

#### 3.1.1 THERMOCALC

THERMOCALC es un programa escrito en el lenguaje de programación Pascal por Roger Powell para su tesis doctoral en los años 70's y mejorado por Tim Holland en 1988. THERMOCALC es un software de cálculo termodinámico para abordar problemas de equilibrio mineral. Este programa tiene dos componentes principales: la interface y la base de datos termodinámicos.

THERMOCALC resuelve ecuaciones de estado de todas soluciones sólidas consideradas por el usuario (busca que  $\Delta G=0$ ) y calcula diagramas de fase para una composición de roca total (Powell et al., 1998). Debido a que los modelos de solución (tanto los de soluciones sólidas como los de fluidos) han ido evolucionando e incrementando su

complejidad durante los últimos 20 años, THERMOCALC utiliza las ecuaciones HPx-eos, las cuales son relaciones entre modelos termodinámicos para minerales y fluidos geológicos, que son consistentes con las bases de datos de Holland y Powell permitiendo así resultados exactos.

La versión de THERMOCALC utilizada para los cálculos realizados en este trabajo es la versión tc350.

### **3.1.2 Perple\_X**

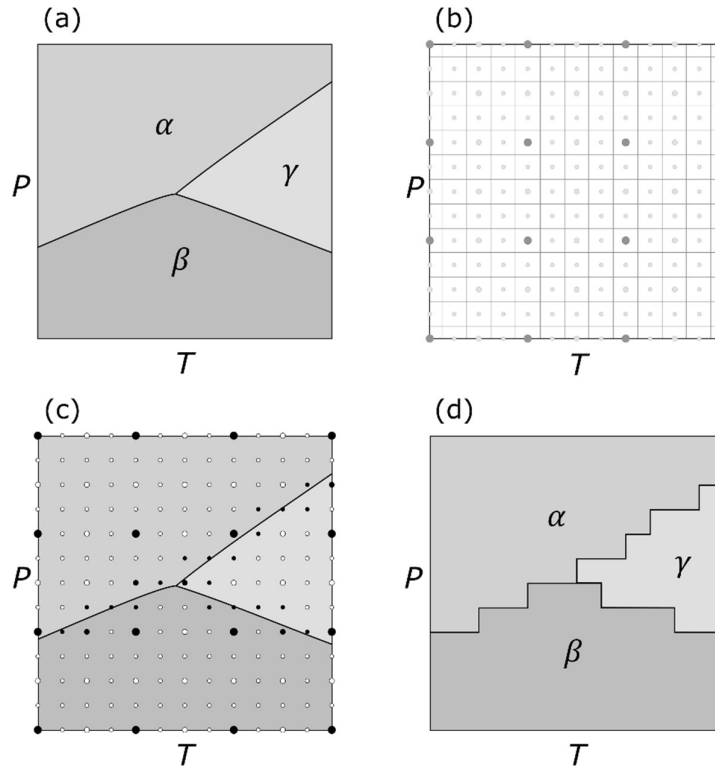
Perple\_X es una serie de módulos escritos en FORTRAN por James Connolly entre 1990 y 2005. Perple\_X realiza la minimización de energía libre de Gibbs para crear diagramas de fase y pseudosecciones. Perple\_X tiene la capacidad de utilizar una amplia gama de bases de datos termodinámicas, modelos de actividad y ecuaciones de estado de los fluidos (Connolly, 2005).

El algoritmo de cálculo de Perple\_X se basa en representar las variaciones de composición de las soluciones sólidas como series de composiciones discretas, lo que se le conoce como pseudocompuestos (Connolly & Kerrick, 1987). Esto brinda una solución exacta a un problema aproximado.

Perple\_X utiliza 2 estrategias para el cálculo de pseudosecciones, la primera estrategia son las mallas multinivel para el mapeo de diagramas de fase. Esta estrategia consiste en calcular la energía libre de Gibbs a P y T aleatorias espaciadas en una primera malla. En un segundo momento se calcula la G a distancias de P-T más cercanas acortando la malla. Este proceso se lo realiza hasta 4 veces hasta obtener las relaciones de equilibrio de cada fase con un espaciamiento corto en el campo P-T (Fig. 7). La segunda estrategia utiliza los pseudocompuestos para calcular G de una superficie n-dimensional en un espacio multidimensional ( $G, X_1, X_2, \dots, X_n$ ).

Este método de cálculo es complementado con la elección de modelos de solución que son relaciones de actividad-composición (a-X) para grupos minerales (e.g., Green et al., 2007; Green 2016; White et al., 2014).

La lista de productos que se pueden obtener con Perple\_X han ido evolucionando con el tiempo, pero la interacción con el código se han mantenido desde su inicio a través de líneas de comandos en el terminal de la computadora. Actualmente Perple\_X cuenta con 36 versiones siendo la versión 6.9.1 la más reciente y la utilizada en este trabajo.



**Fig. 7.** Diagrama P-T esquemático del algoritmo de Perple\_X, simplificado de Connolly (2005). (a) Límites de campos definidos por relaciones entre reacciones. (b) Cuadrícula de cuatro niveles con nodos representado por círculos. (c) Disminución de la distancia de los nódulos de la cuadrícula, los nodos de esta cuadrícula en los que se calcularían las relaciones de equilibrio se indican mediante círculos rellenos. (d) El mapa final luego de la disminución del distanciamiento de los nodos de la cuadrícula.

### 3.1.3 Theriak-Domino

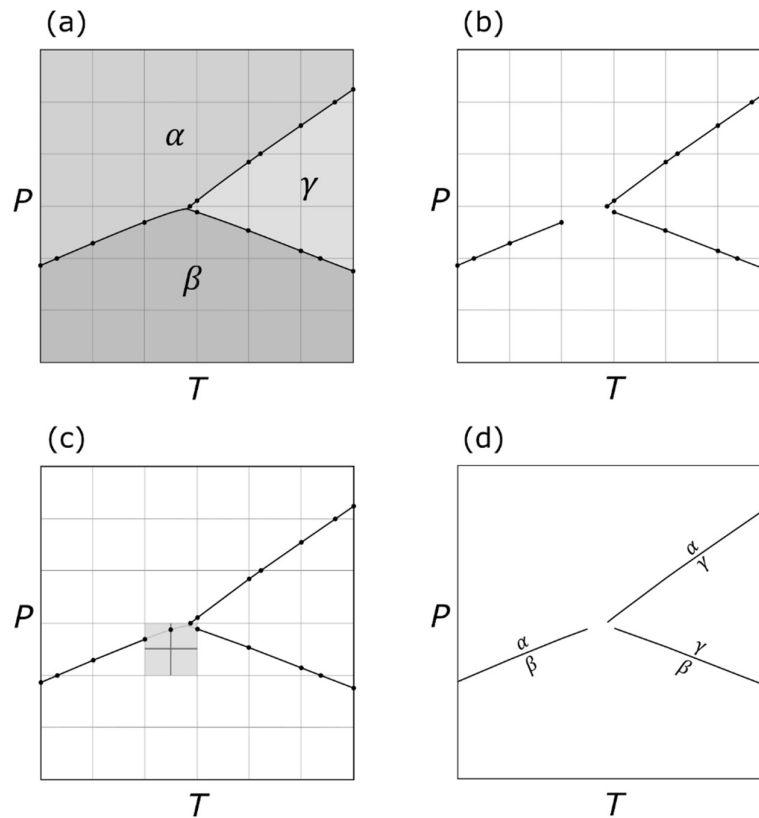
Theriak-Domino es un conjunto de 10 programas (e.g., Theriak, Domino, Guzzler, Explot), escritos en FORTRAN por Christian de Capitani en 2010, usados para minimizar la energía libre de Gibbs y calcular diagramas de fase, isopletras, propiedades de una sola fase, etc. Actualmente el paquete de Theriak-Domino cuenta con 4 versiones, siendo la versión 11.03.2020 la más reciente y la utilizada en este trabajo.

El programa principal es Theriak el cual calcula conjuntos de minerales al equilibrio para una composición dada de roca total a cualquier  $P$  y  $T$ . La estrategia de cálculo de Domino (Fig. 8) para pseudosecciones consta de dos partes. La primera divide un espacio  $x$ - $y$  en rectángulos que formen una malla regular, los cálculos de la minimización de la energía libre de Gibbs son ejecutados en cada intersección de los rectángulos. Un cambio en el conjunto mineral entre dos puntos indica que al menos un punto de reacción se



produce en el medio, lo que lleva a Domino a ejecutar la segunda parte de la estrategia que es el refinamiento del diagrama. Para esto se dividen los rectángulos en partes más pequeñas lo que produce una malla de análisis menos espaciada.

Aunque en esencia del método de cálculo de Theriak-Domino sea similar a Perple\_X, la diferencia recae en la estrategia ocupada por Theriak-Domino. Theriak-Domino utiliza los miembros finales de los minerales junto con los modelos de actividad-composición para representar un espacio de composición continuo.



**Fig. 8.** Esquema del algoritmo de Domino simplificado de Capitani & Petrakakis (2010). (a) Diagrama con la definición de cuadrícula inicial, con los puntos de reacción encontrados a lo largo de la cuadrícula inicial. (b) Puntos de conexión que comparten un rectángulo vecino. (c) Identificación de rectángulos que necesitan refinamiento y definición de una nueva cuadrícula con rectángulos más pequeños. (d) Líneas de reacción finales calculadas con 2 niveles de rectángulos.

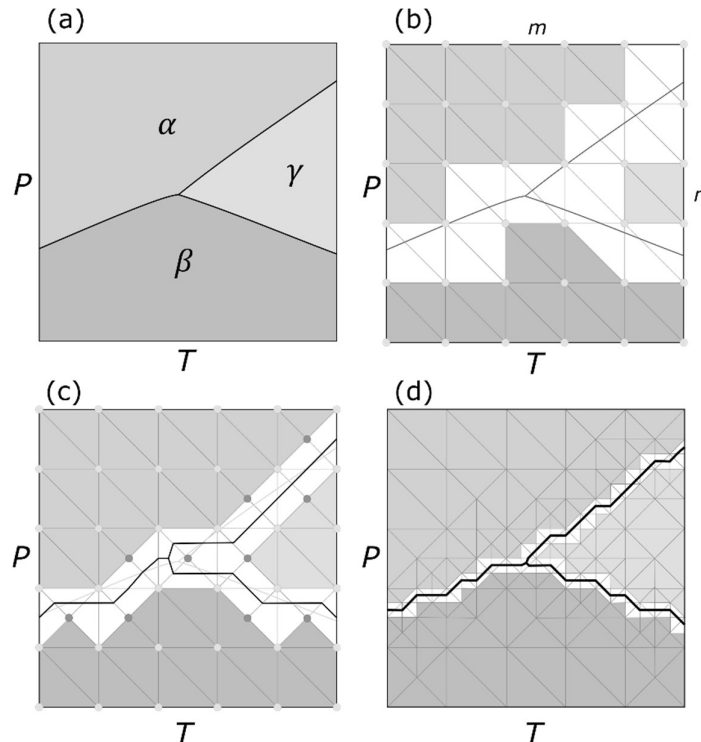
El proceso de refinamiento se repite (típicamente cinco veces) hasta que, dentro de la resolución espacial deseada, las protuberancias poligonales (errores visuales) se suavizan y se eliminan los extremos abiertos (curvas univariantes que no convergen en puntos invariantes) (de Capitani & Petrakakis, 2010).

### 3.1.4 GeoPS

GeoPS es una herramienta computarizada interactiva y visual que presenta una interfaz gráfica. El código de GeoPS fue escrito en MS Visual Basic.Net y diseñado por Hua Xiang y James Connolly (2021) para el cálculo de relaciones de fase estables en todo el manto y la corteza de los planetas terrestres a través de una interfaz gráfica.

Este programa proporciona una amplia gama de cálculos de equilibrio de fase basados en un algoritmo de minimización de la energía de Gibbs, similar a las de Perple\_X y Theriak-Domino. GeoPS a diferencia de los dos programas mencionados anteriormente, tiene una estrategia de refinamiento adaptativo mediante mallas triangulares para el mapeo de las secciones de los diagramas de fase.

La metodología de GeoPS es dividir un área bidimensional (P-T) en una red triangular regular  $m \times n$  (Fig. 9b). El conjunto de equilibrio de cada nodo de la red está determinado por el minimizador de energía de Gibbs. Si el mismo conjunto de minerales es estable en tres nodos de un triángulo, se supone que el conjunto de minerales es estable en el triángulo (Fig. 9).



**Fig. 9.** Esquema del algoritmo GeoPS por Xiang & Connolly (2021). (a) Ejemplo de un diagrama de fase. (b) Determinación de conjuntos estables en cada nodo de la cuadrícula inicial e identificación de los triángulos necesitan refinamiento, (c) refinación de los triángulos marcados. Estos pasos se repiten iterativamente hasta que se alcanza la resolución efectiva y finalmente (d) muestra el resultado después de repetir los pasos anteriores.

GeoPS discretiza los compuestos y usa las mismas bases termodinámicas, modelos minerales y ecuaciones de estado que Perple\_X. A pesar de que GeoPS es el programa de cálculo de fases minerales más reciente, ya cuenta con 14 versiones siendo las 3.2 la última y la utilizada en este trabajo.

### **3.2 Comparación entre los programas computacionales**

Para determinar la importancia de cada programa, se realizó una recopilación bibliográfica de artículos científicos publicados en 2020 y 2021 que contengan pseudosecciones. De un total de 66 publicaciones seleccionadas se determinó el programa computacional más utilizado para la construcción de pseudosecciones. Adicionalmente, para la selección del programa con mejor potencial para la construcción de pseudosecciones se realizó una comparación entre ellos considerando factores como: la facilidad en la instalación; puesta en marcha de los programas; y la disponibilidad de manuales de usuario. Finalmente, se utilizaron los cuatro programas (THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS) para reproducir las pseudosecciones tomadas de publicaciones científicas de Schorn (2018) y Villares (2021) que cuentan con composiciones de roca total y minerales.

# CAPÍTULO IV

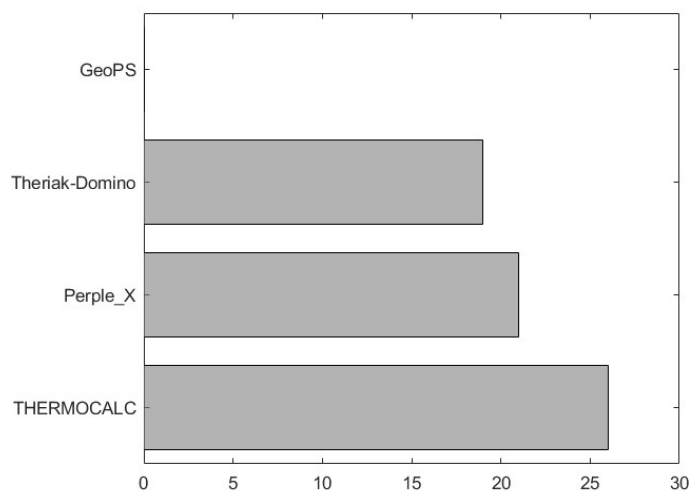
## 4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 4.1 Comparación de programas computacionales para la creación de pseudosecciones

#### 4.1.1 Comparación en base a su uso en la academia

Para este análisis, se ha considerado los artículos científicos publicados durante 2020 y 2021 en la revista *Journal of Metamorphic Petrology*. Esta recopilación bibliográfica pudo evidenciar que un 15% de todas las publicaciones durante este periodo de tiempo en esta revista utilizan al menos dos programas computacionales para generar pseudosecciones y obtener las propiedades fisicoquímicas de las mismas. Los programas computacionales en orden de mayor a menor número de citas son THERMOCALC (26), Perple\_X (21), Theriak-Domino (19) y GeoPS (0), (Fig. 10).

El programa computacional más utilizado es THERMOCALC. De acuerdo a la recopilación bibliográfica, el uso de Perple\_X y Theriak-Domino es ligeramente menor al de THERMOCALC. El uso de GeoPS para la construcción de pseudosecciones no pudo ser analizado debido a su reciente lanzamiento en el año 2021.



**Fig. 10.** Número de citas de los programas THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino y GeoPS durante 2020 y 2021 en la revista *Journal of Metamorphic Petrology*. Durante este periodo de tiempo no existen citas para GeoPS debido a que su lanzamiento fue en el año 2021.

#### **4.1.2 Tiempo de instalación e interfaz**

La descripción de esta sección se basa en la facilidad de instalación e interfaz de los programas computacionales usando una computadora personal con una unidad central de procesamiento (CPU) Intel Core i5-9300H y el sistema operativo Windows 11. La instalación de los 4 programas computacionales lleva desde unos pocos minutos a unas pocas horas. Los programas GeoPS, Perple\_X y THERMOCALC son los más fáciles de instalar gracias a los manuales de usuarios disponibles. En el caso de Theriak-Domino la instalación toma más tiempo debido al requerimiento de un programa computacional adicional (compilador *gfortran*) para que se puedan ejecutar los módulos de cálculo.

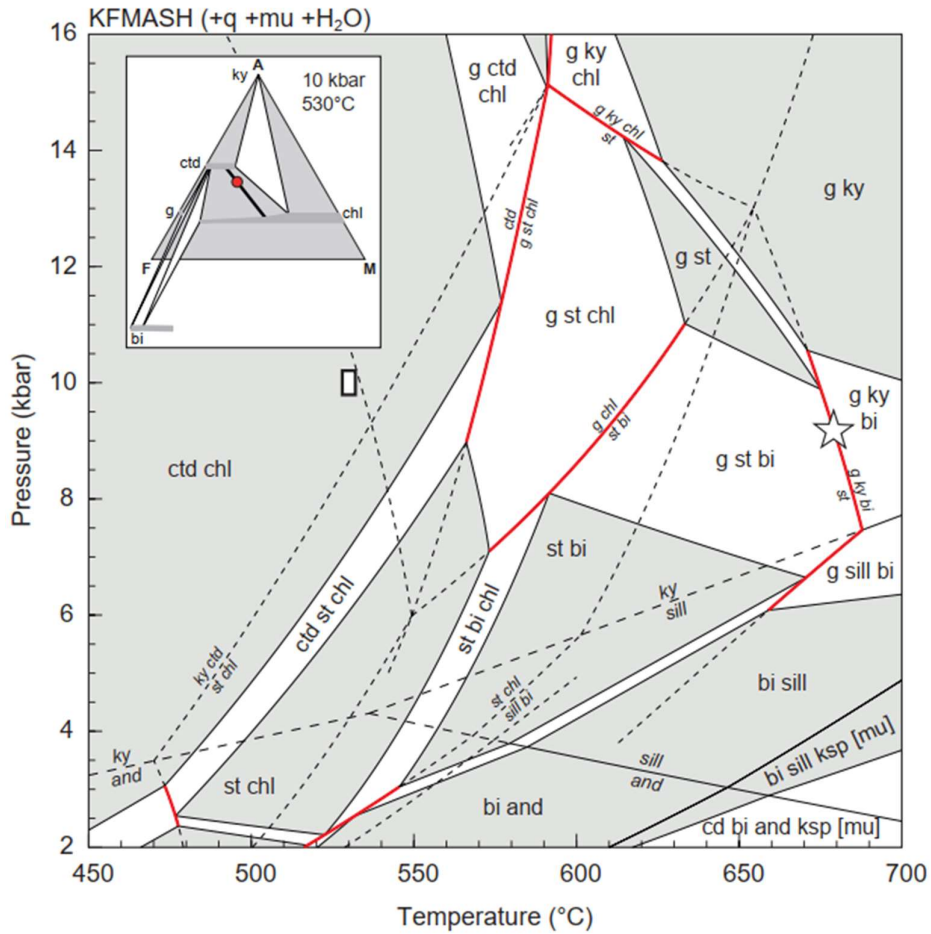
Todos los programas, excepto GeoPS, carecen de una interfaz gráfica y la interacción con los programas se lo hace a través de línea de comandos en el terminal, lo que hace más complicado su manejo para personas con poca experiencia en computación. GeoPS al contar con una interfaz gráfica, su uso se vuelve intuitivo y fácil. Los programas Perple\_X y GeoPS permiten la selección de diferentes bases de datos termodinámicas y modelos minerales, mientras que Theriak-Domino solo permite la selección de bases de datos termodinámicas, pero no de modelos minerales. THERMOCALC utiliza una única base de datos termodinámica que incluye los modelos de actividad mineral, por lo que no permite utilizar bases de datos diferentes a las creadas por Holland y Powell.

#### **4.1.3 Reproducibilidad de las pseudosecciones**

A continuación, se presenta una comparación de los resultados de dos pseudosecciones, una metapelita y un metabasalto, utilizando cada uno de los programas computacionales. Las pseudosecciones seleccionadas para ser reproducidas en este trabajo son: (1) la pseudosección de la metapelita A33 obtenida del manual de Schorn (2021, Fig. 11) con los datos composicionales del artículo científico de Schorn (2018, Tabla 1) y (2) la pseudosección del metabasalto P-52 obtenida de Villares (2021, Fig. 12).

**Tabla 1.** Composicion de roca total y composiciones de minerales para la muestra A33 (Schorn, 2018). La composicion mineralógica se ajusta a los modelos minerales propuestos por White et al. (2014).

Litología	Micaesquisto de estaurolita y cianita						
	Roca total	Granate		Estaurolita	Muscovita	Biotita	Plagioclasa
	(mol %)	Núcleo (mol %)	Borde (mol %)	Matriz (mol %)			
<b>SiO<sub>2</sub></b>	67.23	38.09	37.91	27.75	46.93	37.32	62.42
<b>TiO<sub>2</sub></b>	0.88	0.06	-	0.62	0.47	1.52	-
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	15.08	20.91	21.24	53.19	36.4	19.12	24.09
<b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	-	-	-	-	-	-	-
<b>FeO</b>	7.47	29.19	31.14	12.91	0.79	16.77	-
<b>MnO</b>	0.14	0.62	0.76	0.2	-	-	-
<b>MgO</b>	3.69	7.19	5.28	1.76	0.61	11.1	-
<b>ZnO</b>	-	-	-	0.84	-	-	-
<b>CaO</b>	0.89	3.79	3.3	-	-	-	5.49
<b>Na<sub>2</sub>O</b>	1.53	-	-	-	2.47	0.31	8.21
<b>K<sub>2</sub>O</b>	2.71	-	-	-	7.78	8.87	0.1
<b>O</b>	0.37	-	-	-	-	-	-
<b>F</b>	-	-	-	-	-	0.91	-
<b>Cl</b>	-	-	-	-	-	-	-
<b>Total</b>	99.99	99.85	99.63	97.27	95.45	95.92	100.31
<b>Xalm</b>		0.6	0.68				
<b>Xprp</b>		0.28	0.21				
<b>Xgrs</b>		0.11	0.09				
<b>Xsps</b>		0.01	0.02				
<b>Xan</b>							0.27



**Fig. 11.** Pseudosección de la metapelita A33 tomada de Schorn (2018). Esta pseudosección fue construida en THERMOCALC con la base de datos termodinámica "ds6.2" (Holland & Powell, 2011) en el sistema simplificado  $K_2O-FeO-MgO-Al_2O_3-SiO_2-H_2O$  (KFMASH). Las líneas segmentadas representan las reacciones del sistema KFMASH que no afectan a la muestra. Las líneas rojas son reacciones reconocidas en muestras de la misma formación que la muestra A33. La estrella representa el pico P-T del metamorfismo. En la esquina superior izquierda se muestra el diagrama AFM calculado a 10 kbar y 525 °C. Tomado de Schorn (2021).

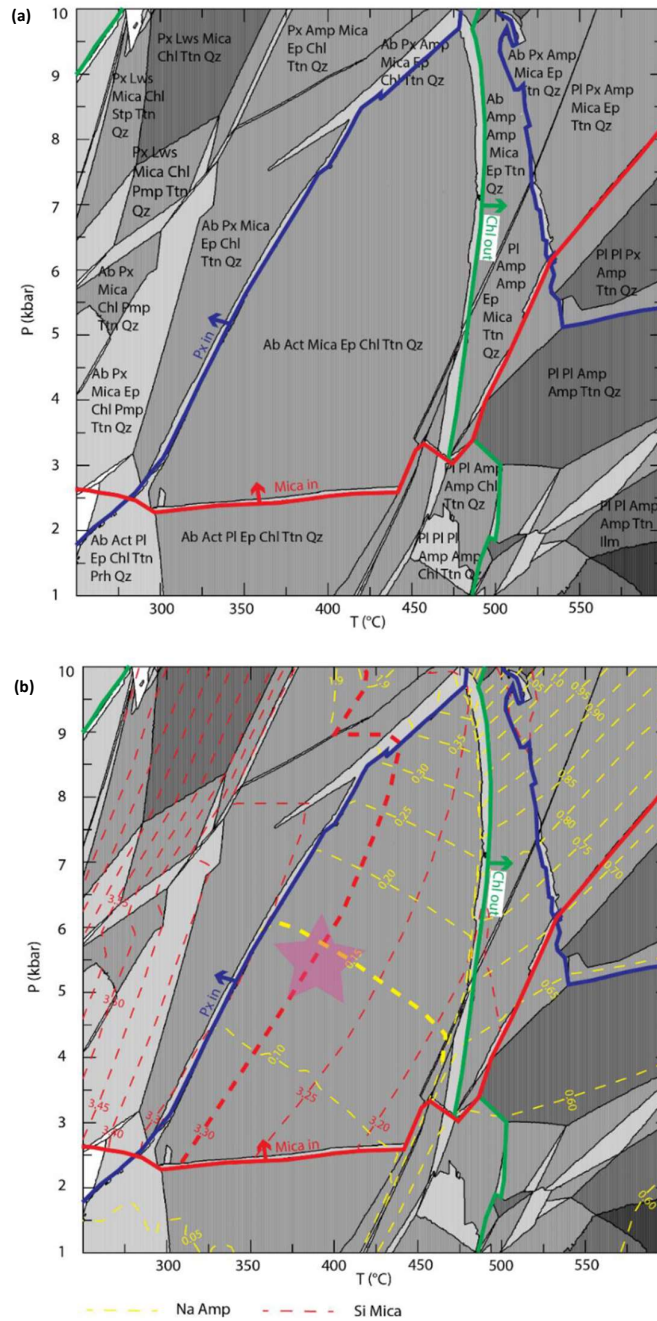
**Tabla 2.** Composición de roca total y composiciones minerales para la muestra P-52 de Villares (2021).

Litología	Metabasalto en facies de esquistos verdes								
	Roca total (wt. %)	Anfibol (wt. %)	Muscovita (wt. %)						
SiO <sub>2</sub>	49	51.43	52.38	53.72	48.06	48.46	47.27	48.85	48.12
TiO <sub>2</sub>	1.08	0.04	0.06	0.06	0.33	0.25	0.14	0.25	0.33
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.7	4.71	4.3	3.01	30.44	29.85	31.53	29.53	30.71
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-	0.05	0.19	0.2	0.25	0.26	0	0.17	0.13
FeO	7.84	12.37	10.69	10.12	1.89	1.91	1.93	1.98	1.87
MnO	0.14	0.23	0.26	0.26	0.01	0.02	0.01	0.01	0.02
MgO	8.34	15.15	15.76	16.66	2.4	2.55	2.17	2.72	2.35
CaO	10.5	12.21	12.62	12.82	0	0.03	0.01	0.01	0.01
BaO	-	-	-	-	0.17	0.17	0.14	0.06	0.2
Na <sub>2</sub> O	2.72	0.45	0.56	0.39	0.5	0.31	0.44	0.32	0.51
K <sub>2</sub> O	0.53	0.14	0.14	0.09	10.46	10.41	10.79	10.39	10.25
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.09	-	-	-	-	-	-	-	-
Cl	-	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0
LOI	2.61	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Total</b>	98.55	96.78	96.97	97.33	94.52	94.22	94.43	94.29	94.5
<b>Subgrupo</b>		Cálcico	Cálcico	Cálcico					
<b>Especies</b>		Mfhb	Act	Act					



**Tabla 3.** Continuación de la composición mineral de la muestra del metabastalto P-52 de Villares, (2021). La composición mineral del anfíbol, mica, plagioclasa, epidota, clorita y titanita se ajustan a los modelos propuestos por Diener et al. (2007), White et al. (2014), Fuhrman & Lindsley (1988), Holland & Powell (2011), White et al. (2014) y White et al. (2000), respectivamente.

	Plagioclasa		Epidota			Clorita		Titanita
	(wt %)		(wt %)			(wt %)		(wt %)
<b>SiO<sub>2</sub></b>	56.28	67.89	38.09	38.21	38.27	26.47	27.82	30.64
<b>TiO<sub>2</sub></b>	0.01	0	0.06	0.07	0.11	0.03	0.02	37.53
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	24.84	19.49	27.55	28.21	28.38	20.95	21.47	1.81
<b>Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	-	-	0.11	0	0.26	0.1	0	0.08
<b>FeO</b>	0.73	0.06	6.27	5.81	5.35	19.94	19.77	0.52
<b>MnO</b>	0.01	0	0.08	0.09	0.13	0.29	0.27	0.01
<b>MgO</b>	0.23	0	0.08	0.05	0.07	19.16	17.96	0.39
<b>CaO</b>	10.8	0.27	24.05	24.23	24.12	0.03	0.05	28.17
<b>BaO</b>	-	-	-	-	-	-	-	0.42
<b>Na<sub>2</sub>O</b>	6.85	11.91	0	0	0	0	0.02	0.01
<b>K<sub>2</sub>O</b>	0.1	0.06	0.03	0.01	0.01	0.04	0.04	0.06
<b>Cl</b>	-	-	0.02	0	0	-	-	-
<b>Total</b>	99.85	99.68	96.34	96.68	96.7	87.01	87.42	99.64
<b>Or%</b>	0.49	0.31						
<b>Ab%</b>	53.19	98.46						
<b>An%</b>	46.32	1.23						
<b>Xczo</b>			0.57	0.61	0.63			
<b>Xep</b>			0.43	0.39	0.36			
<b>Xpmt</b>			0.01	0.01	0.01			

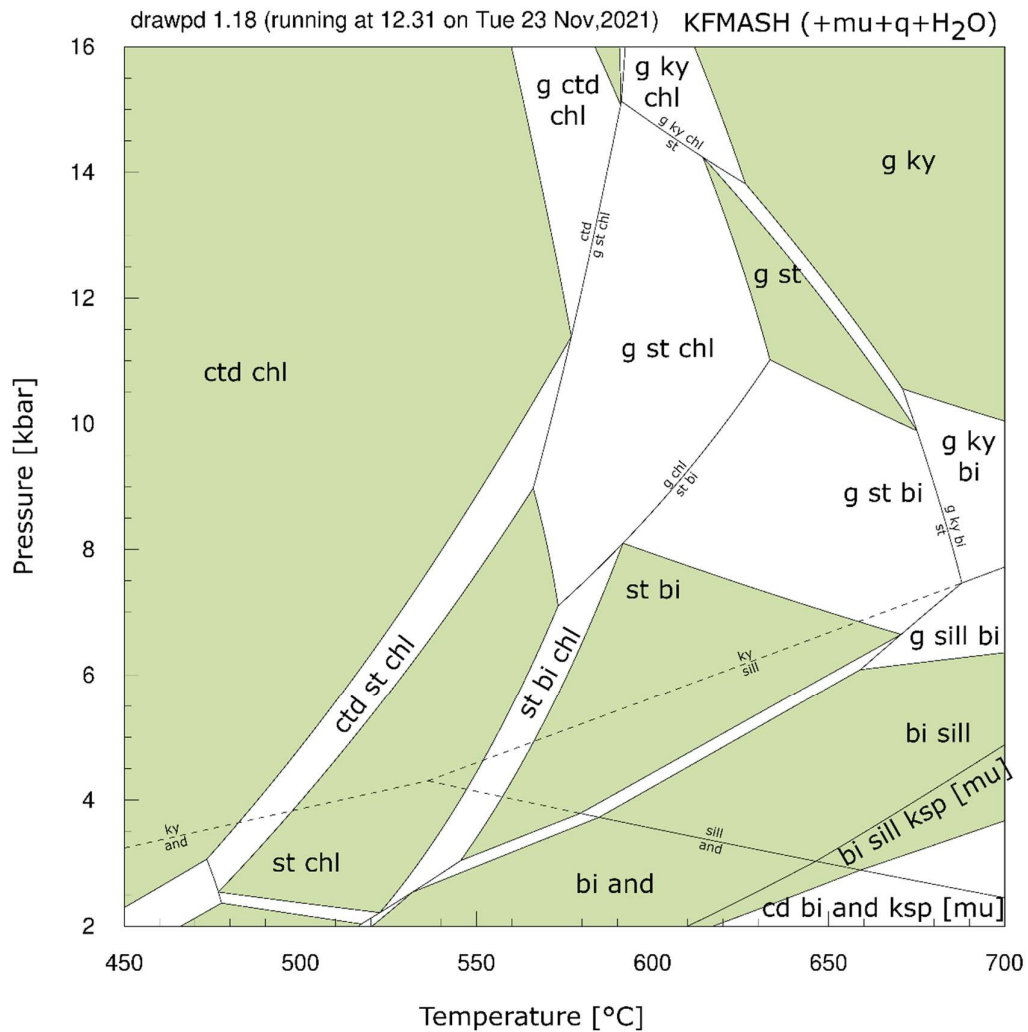


**Fig. 12.** (a) Pseudosección de la metabasita P-52 de Villares (2021) calculada en el sistema  $K_2O-Na_2O-CaO-FeO-MgO-Al_2O_3-SiO_2-TiO_2-H_2O-O_2$  (NCKFMASHTO) utilizando Perple\_X. Esta pseudosección fue calculada con la base de datos termodinámica “ds6.2”. Los modelos minerales utilizados son los de Diener et al. (2007), White et al. (2014), Fuhrman & Lindsley (1988), Holland & Powell (2011), White et al. (2014) y White et al. (2000) para el anfíbol, mica, plagioclasa, epidota, clorita y titanita, respectivamente. Abreviatura de los minerales tomadas de Whitney & Evans (2010). (b) Isopectas para el contenido de Si en la mica (líneas segmentadas rojas) y para el contenido de Na en el anfíbol (líneas segmentadas amarillas). Los contenidos de los elementos se encuentran en a.p.f.u. Tomado de Villares (2021).

Para elegir el mejor programa en base a su desempeño en la construcción de pseudosecciones se ha prestado atención a: el tiempo de ejecución, el ajuste con la composición mineral y la facilidad para la extracción de información desde la tabla de resultados.

- **Metapelita**

Utilizando la composición de la muestra pelítica A33 (Tabla 2) fue factible calcular una pseudosección con los 4 programas computacionales considerando que el agua, el sílice y la muscovita son componentes en exceso en el sistema.



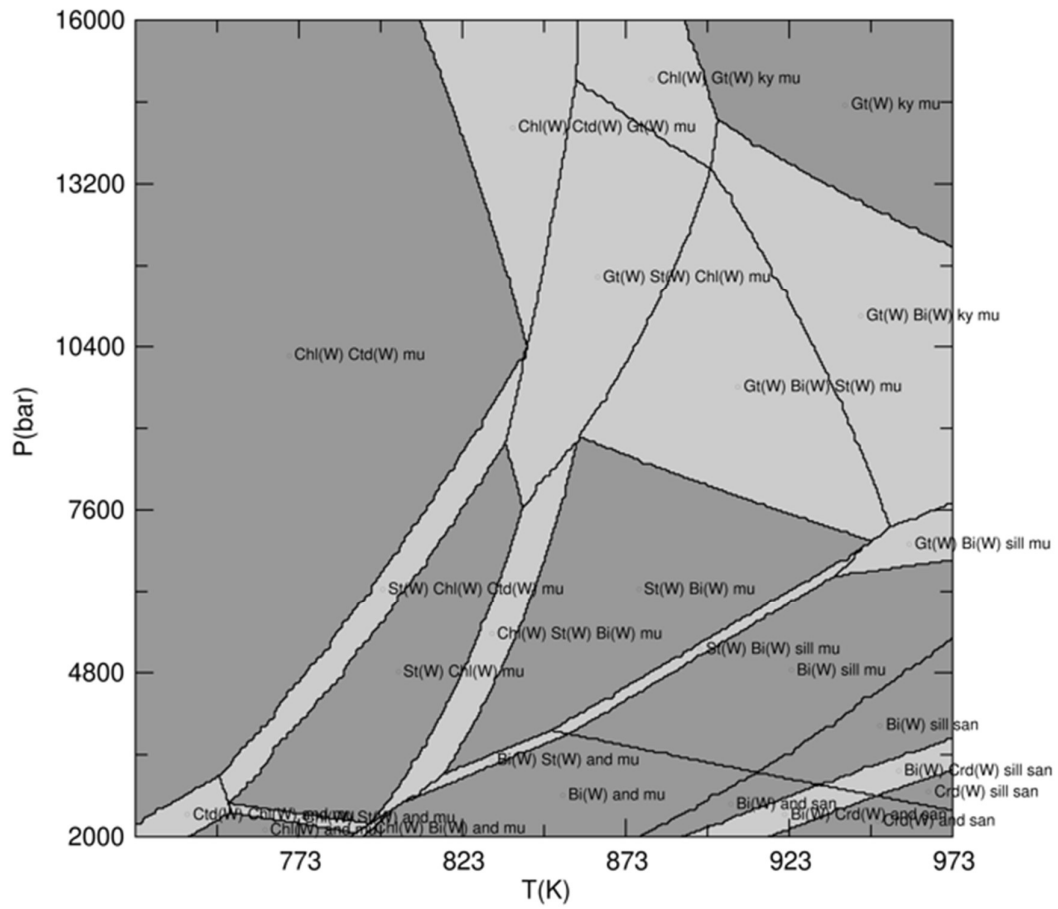
**Fig. 13.** Pseudosección recalculada en THERMOCALC de la muestra A33. Se consideró al sílice, muscovita y agua en exceso. Las líneas segmentadas representan las reacciones metaestables de los aluminosilicatos. Abreviatura de los minerales tomada de Holland & Powell (2011).

La pseudosección recalculada utilizando THERMOCALC (Fig. 13) es similar a la original (Fig. 11). El tiempo de cálculo de una pseudosección en THERMOCALC depende de la familiaridad del usuario con el programa. La construcción de la Fig. 13 tomó alrededor de 7 días. La complejidad del uso de este programa se debe a que el usuario calcula las curvas de reacción una por una, resultando en un proceso bastante extenso y propenso a errores para personas con poca experiencia en petrología metamórfica. Otro punto a tomar en cuenta es que el usuario debe distinguir entre reacciones estables y metaestables ya que el programa no está en la capacidad de hacer este análisis.

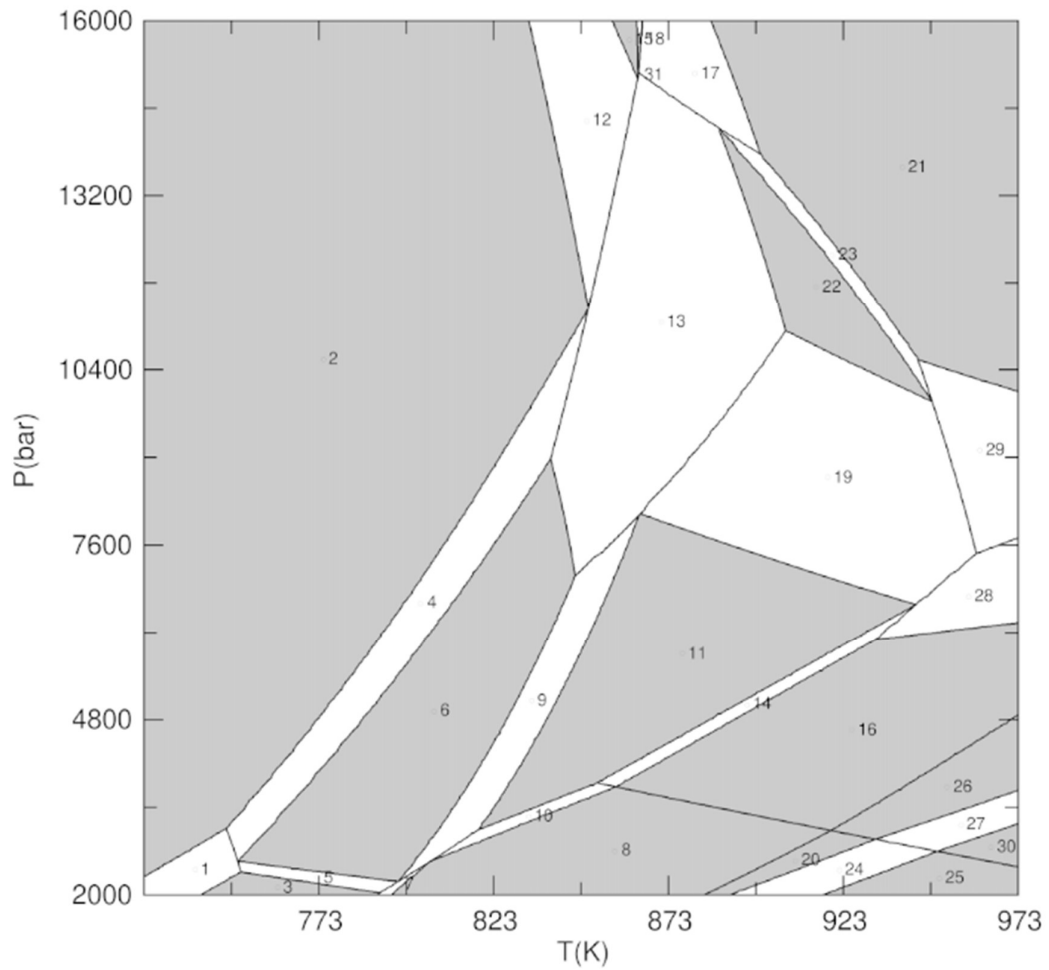
Una desventaja de THERMOCALC es que los nombres de los campos de estabilidad no se etiquetan automáticamente haciendo necesario el uso de un software de edición de gráficos para añadir estas etiquetas.

El resultado del cálculo de la pseudosección utilizando Perple\_X se muestra en la Fig. 14 y 15. Para este cálculo se consideró que los modelos minerales utilizados sean los adecuados para la composición de minerales reportados para esta roca (Tabla 1) y sean compatibles con la base de datos termodinámica "ds6.2". En Perple\_X, a diferencia de THERMOCALC, no es necesario especificar el exceso de muscovita y cuarzo porque Perple\_X ya interpreta el exceso de los minerales con los datos composicionales de roca total.

El cálculo de la pseudosección utilizando las opciones por defecto (Fig. 14) no coincide con la pseudosección original (Fig. 11). Por ejemplo, la Fig. 14 no presenta todos los campos de estabilidad que muestra la Fig. 11, sobre todo en la parte superior derecha de la figura. Para obtener un mejor resultado se modificó la resolución del mallado al doble de la resolución de la Fig. 14 y la resolución inicial de los compuestos ( $initial\_resolution = 1/4$ ), logrando así replicar exitosamente la pseudosección de la muestra A33 (Fig. 15 y Tabla 4).



**Fig. 14.** Pseudosección recalculada en Perple\_X de la muestra A33. Considerando agua en exceso y la resolución inicial de la composición de los modelos de solución por defecto. Abreviatura de los minerales tomada del archivo de modelos de solución "solution-model" de Perple\_X.



**Fig. 15.** Pseudosección recalculada en Perple\_X de la muestra A33. Considerando agua en exceso, la resolución inicial de la composición de los modelos de solución fue modificada a 1/4 con el mallado para la fase exploratoria de 40x40 y para la fase de refinamiento de 120x120. Los números identifican los campos de estabilidad.

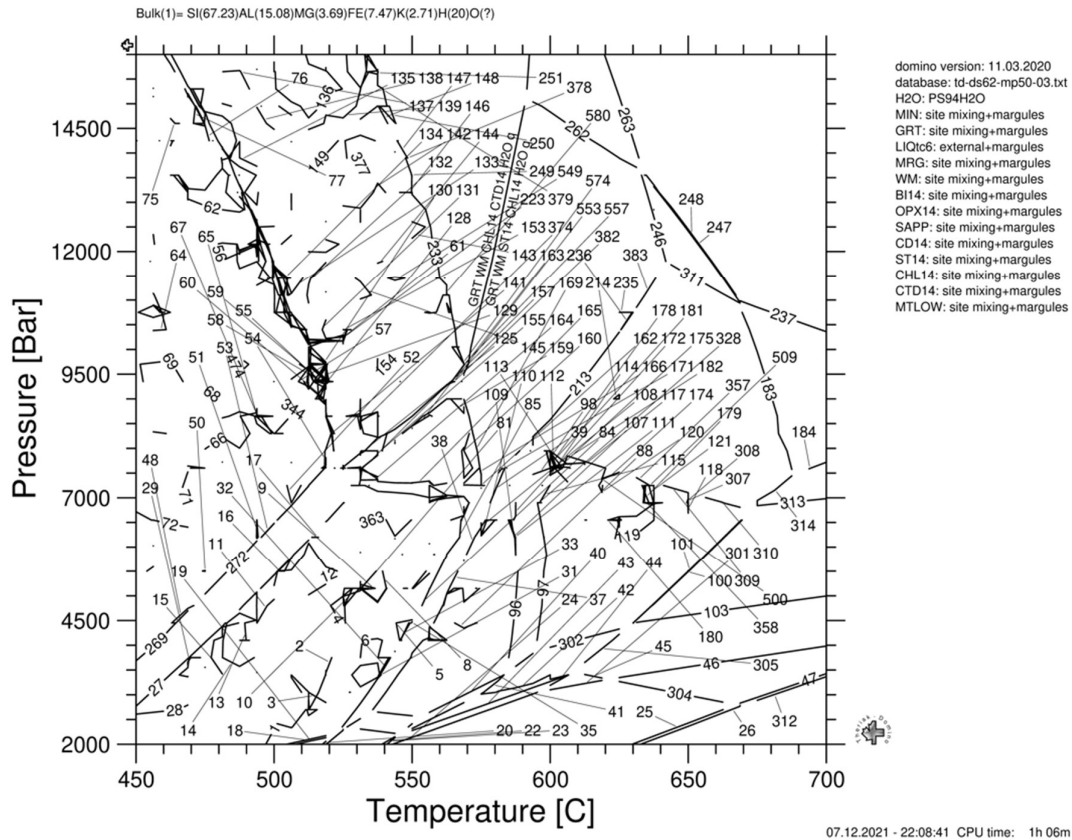
**Tabla 4.** Paragénesis mineral y abreviatura de los minerales para la Fig. 15. Abreviatura de minerales según Whitney & Evans (2010)

<b>1</b>	Chl Ms Cld And Qz	<b>18</b>	Grt Ms Cld Ky Qz
<b>2</b>	Cld Chl Ms Qz	<b>19</b>	St Ms Grt Bt Qz
<b>3</b>	Chl Ms And Qz	<b>20</b>	Bt And Sa Qz
<b>4</b>	Cld Chl Ms St Qz	<b>21</b>	Grt Ms Ky Qz
<b>5</b>	Chl Ms St And Qz	<b>22</b>	St Grt Ms Qz
<b>6</b>	Chl Ms St Qz	<b>23</b>	Ms Grt St Ky Qz
<b>7</b>	Bt Ms Chl And Qz	<b>24</b>	Bt Crd And Sa Qz
<b>8</b>	Bt Ms And Qz	<b>25</b>	Crd And Sa Qz
<b>9</b>	Ms Chl St Bt Qz	<b>26</b>	Bt Sil Sa Qz
<b>10</b>	Bt Ms St And Qz	<b>27</b>	Bt Crd Sil Sa Qz
<b>11</b>	Ms Bt St Qz	<b>28</b>	Ms Grt Bt Sil Qz
<b>12</b>	Chl Grt Ms Cld Qz	<b>29</b>	Ms Grt Bt Ky Qz
<b>13</b>	St Ms Chl Grt Qz	<b>30</b>	Crd Sil Sa Qz
<b>14</b>	Ms St Bt Sil Qz	<b>31</b>	Grt Ms Cld St Qz
<b>15</b>	Grt Ms Cld Qz	<b>32</b>	Ms Bt And Sa Qz
<b>16</b>	Bt Ms Sil Qz	<b>33</b>	Bt Ms Sil Sa Qz
<b>17</b>	Grt Ms Chl Ky Qz	<b>34</b>	Crd Sil Sa Qz

Perple\_X presenta varias ventajas con respecto a THERMOCALC. El tiempo de cálculo no depende del usuario sino de la velocidad de procesamiento de la computadora utilizada. En Perple\_X, el usuario no calcula de una en una las reacciones como en THERMOCALC por lo que este programa es recomendado para personas con conocimientos básicos de petrología metamórfica. Adicionalmente, el análisis de reacciones estables y metaestables es automatizado y proporciona buenos resultados.

El tiempo de cálculo de una pseudosección en Perple\_X varía significativamente dependiendo del nivel de mallado, el número de veces que se refinan los datos y de la complejidad de los modelos minerales propuestos. Para la pseudosección en baja resolución el tiempo de cálculo fue de 1.6 minutos, mientras que para la de alta resolución fue de 28.5 minutos.

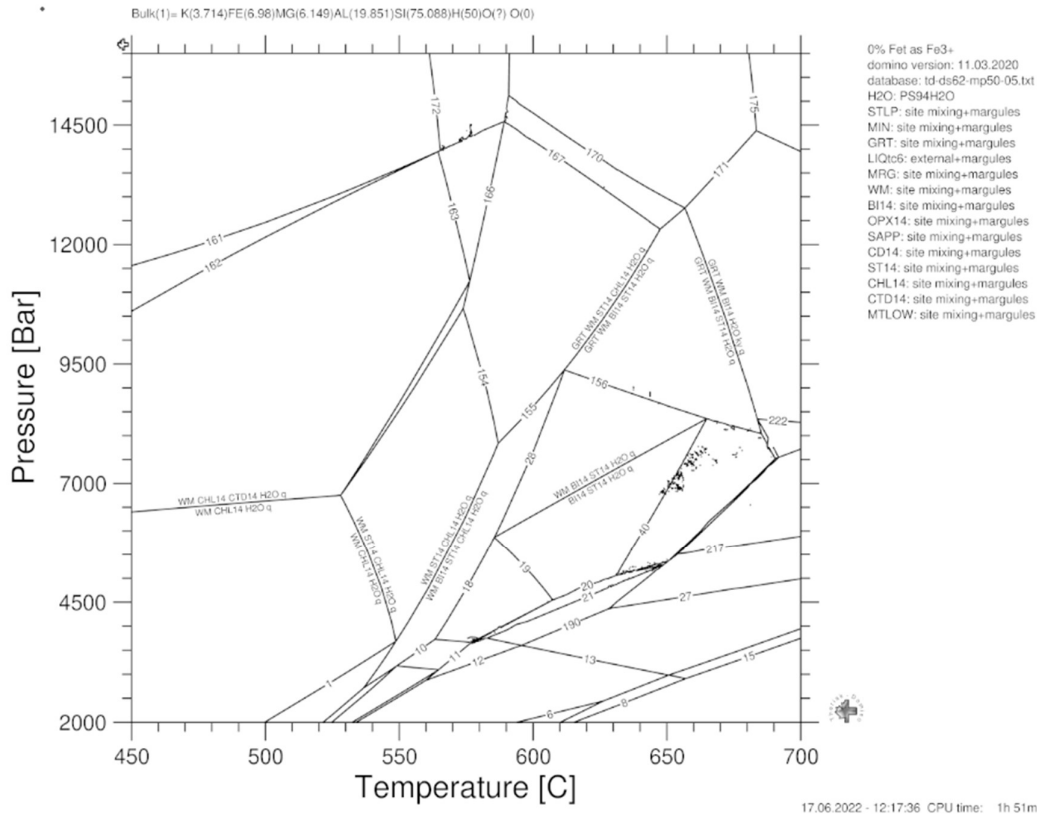
Theriak-Domino no calculó adecuadamente la pseudosección deseada (Fig. 11) debido a errores de cálculo constantes mientras se utilizaba la versión 3 de la base de datos termodinámica “ds6.2” (Fig. 16) y los parámetros por defecto.



**Fig. 16.** Resultado fallido del cálculo de la pseudosección de la muestra A33 utilizando Theriak-Domino y parametrización por defecto. Para el cálculo no se especificó la especiación del hierro y se utilizó la tercera versión, adaptada para Theriak-Domino, de la base de datos termodinámica “ds6.2”.

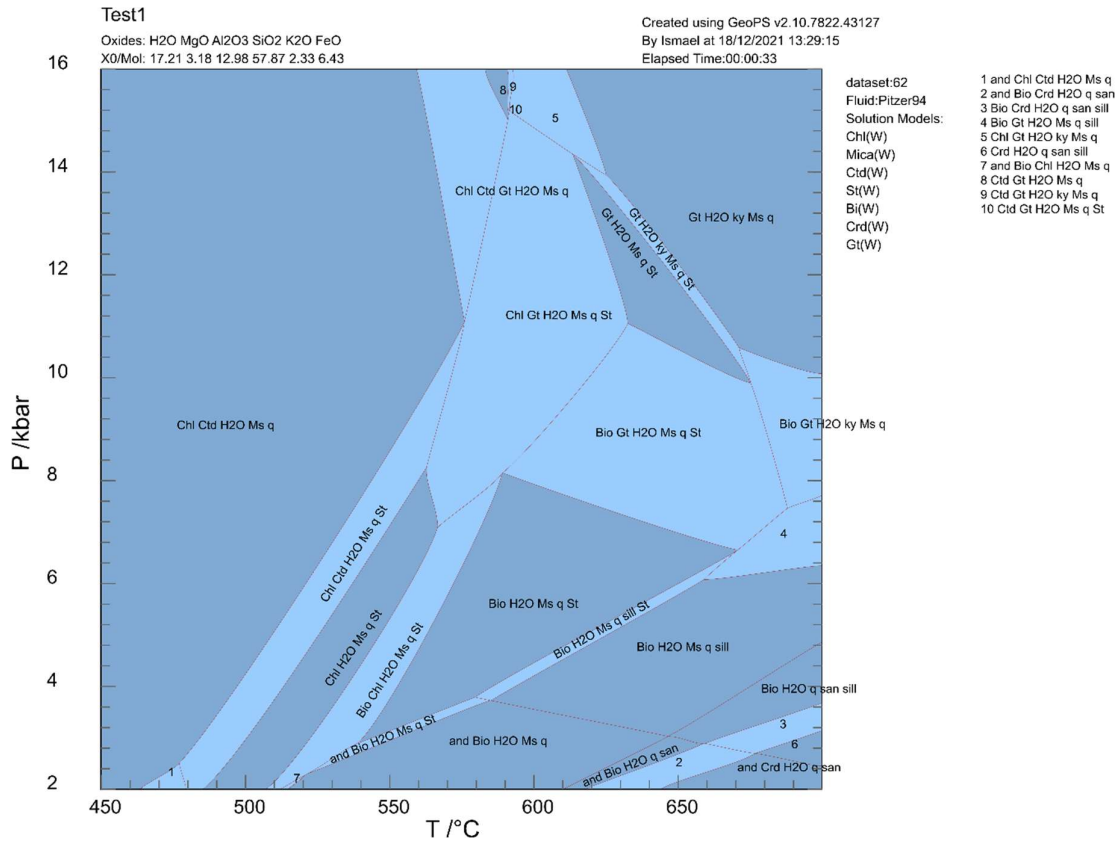
Al ajustar los datos composicionales (especificando 0% de  $\text{Fe}^{3+}$  en la muestra) y utilizando la versión 5 de la base de datos termodinámica “ds6.2”, se obtuvo mejores resultados en el cálculo. Con estos nuevos parámetros se siguen produciendo errores como la aparición de curvas de reacción muy cortas y aisladas en medio de campos de estabilidad más amplios. El tiempo de cálculo de la pseudosección presentada en la Fig. 17 fue de 1.85 horas.





**Fig. 17.** Pseudosección recalculada en Theriak-Domino de la muestra A33, especificando que todo el contenido de hierro es Fe<sup>2+</sup> y haciendo uso de la quinta versión, adaptada para Theriak-Domino, de la base de datos termodinámica “ds6.2”.

Finalmente, GeoPS generó una pseudosección (Fig. 18) bastante parecida a la original (Fig. 11) y tardó solamente 33 segundos. Algunas de las ventajas más grandes de GeoPS son que su interfaz gráfica vuelve más intuitivo el cálculo y que la pseudosección resultante contiene toda la información necesaria eliminando el requerimiento de los otros programas de modificar las pseudosecciones finales con editores de gráficos externos.



**Fig. 18.** Pseudosección de la muestra A33 recalculada en GeoPS. Los modelos minerales utilizados son los mismos que aquellos utilizados en Perple\_X.

La muestra A33 corresponde a un micaesquisto de estaurolita-cianita-granate (Schorn, 2018) con una proporción mineral volumétrica de: granate (~10 %), biotita (~15%), estaurolita (~5 %), muscovita (~40%), plagioclasa (~10%) y cuarzo (~15%). Este conjunto mineral coexiste en las pseudosecciones calculadas por THERMOCALC, Perple\_X y GeoPS y está delimitada por una curva univariante entre la temperatura de 674 y 686 °C con presiones de 7.5 y 9.8 kbar.

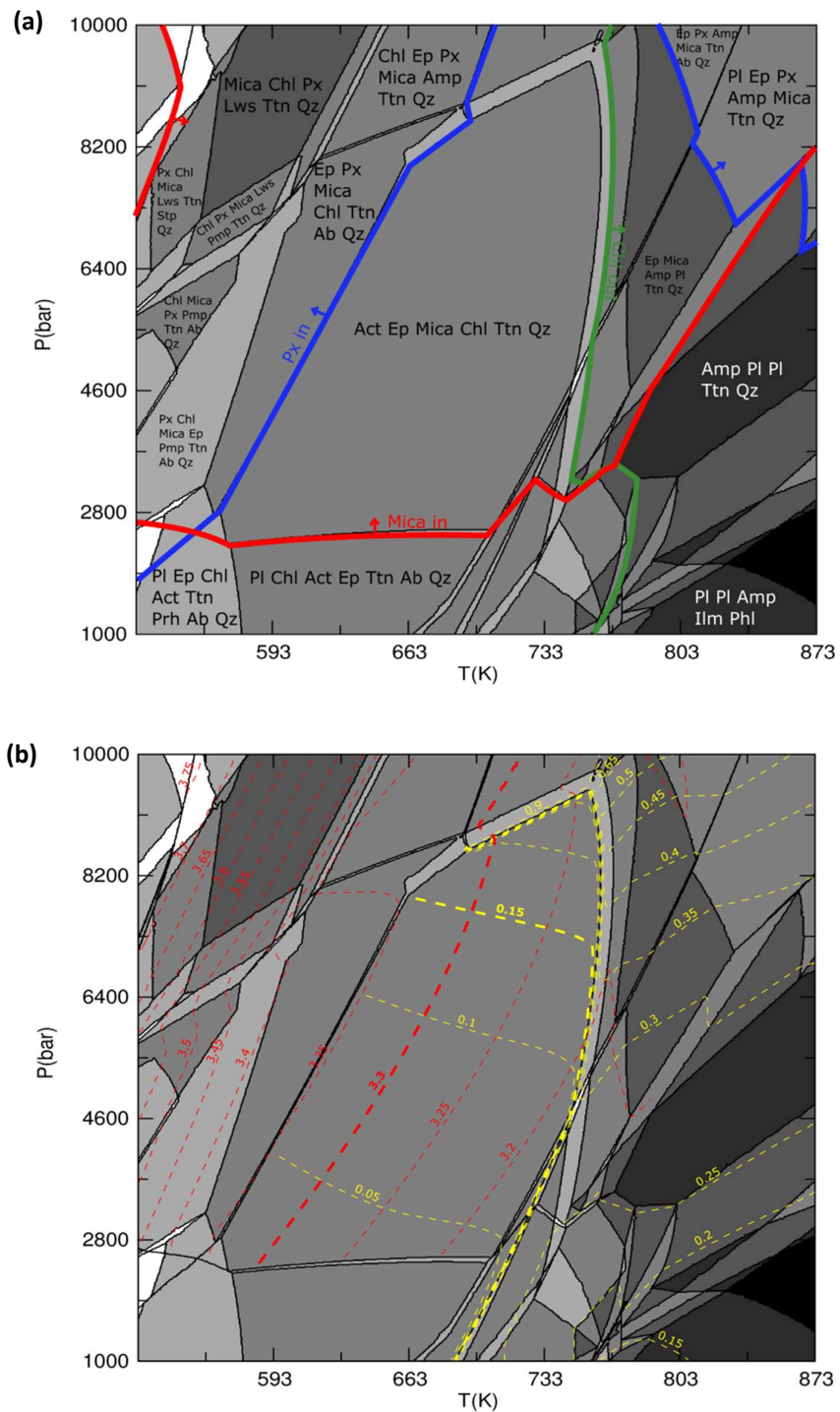
- **Metabasita**

La construcción de una pseudosección para metabasita se realizó utilizando la muestra P-52 de Villares (2021). Esta pseudosección se realizó utilizando los programas Perple\_X y GeoPS. THERMOCALC y Theriak-Domino no se utilizaron debido a que estos programas no están optimizados y presentan problemas al trabajar con composiciones de rocas máficas. La pseudosección original (Fig. 12) se realizó considerando las ecuaciones de estado de Pitzer & Sterner (1998); un contenido de Fe<sup>3+</sup> del 5% del hierro total; una ventana de P-T de 1 a 10 kbar y 250 a 600 °C; y un sistema saturado en agua.

La pseudosección construida con Perple\_X (Fig. 19) presentó inconsistencias a temperaturas mayores a 723 K (450 °C) cuando es comparada con la pseudosección original. Las diferencias observadas se deben posiblemente a que en este trabajo se utilizó una versión más reciente de Perple\_X (ver. 9.6.1) mientras que Villares utilizó la versión 6.9.0. Los problemas generados en la pseudosección construida para este trabajo se muestran como pequeños polígonos en el diagrama P-T (Fig. 19) que representan campos de estabilidad mineral de un rango de P y T muy limitado. A pesar de esta inconsistencia, las reacciones principales observadas en la pseudosección original son también reproducidas en la pseudosección de la Fig. 19.

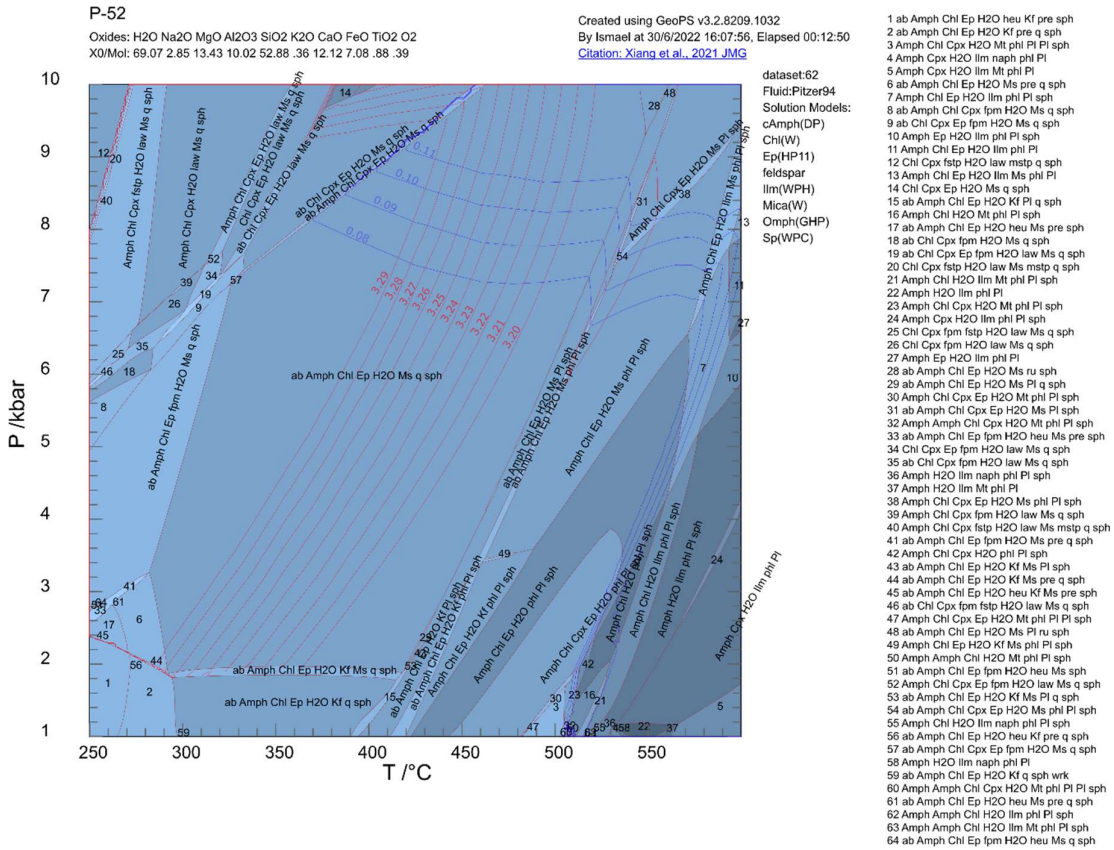
El conjunto mineral estable reportado por Villares (2021) es actinolita, albita, epidota, clorita, titanita y muscovita. Este conjunto mineral existe en el campo de estabilidad entre temperaturas de 295 y 460 °C y presiones de 1.4 y 9.1 kbar (Fig. 19a).

Debido a el amplio campo de estabilidad mineral fue necesario el uso del módulo WERAMI de Perple\_X para calcular de isóneas de composición y determinar con mayor precisión las condiciones de P-T. Villares (2021) realizó una aproximación geotermobarométrica como lo propone Molina et al. (2015) con los contenidos de Si en la mica (3.20-3.29 a.p.f.u) y Na en el anfíbol (0.08-0.11 a.p.f.u) y obtiene unas condiciones P-T de ~6.4 kbar y ~350 °C, respectivamente (Fig. 19b).



**Fig. 19.** (a) Pseudosección de la muestra P-52 recalculada en Perple\_X y modificada en Inkscape (editor de gráficos vectoriales). Abreviatura de los minerales tomada de Whitney & Evans (2010). (b) Isolíneas de composición calculadas en el módulo WERAMI de Perple\_X superpuestas en la pseudosección de la muestra P-52. Las líneas segmentadas en rojo representan el contenido de Si en la mica, mientras que las líneas segmentadas en amarillo representa el contenido de Na en el anfíbol. Los contenidos de los elementos se encuentran en a.p.f.u.

La misma pseudosección de la Fig. 12 fue reproducida utilizando el programa GeoPS. La limitación de GeoPS para la construcción de pseudosecciones de metabasitas fue evidente (Fig. 20) y no se pudo replicar en su totalidad la pseudosección propuesta por Villares (2021). La principal limitación es que GeoPS no permite hacer ajustes de resolución inicial de los pseudocompuestos y los campos de estabilidad son muy diferentes a los calculados en Perple\_X (Fig. 19). Perple\_X, en comparación con GeoPS, produce mejores resultados debido a que utiliza mayor número de pseudocompuestos. La pseudosección reproducida con GeoPS (Fig. 20) presenta campos de estabilidad no observados en la pseudosección original.



**Fig. 20.** Isolneas de composicion calculadas en GeoPS y superpuestas en la pseudosección de la muestra P-52. Las líneas en rojo representan el contenido de Si en la mica, mientras que las líneas en azul representa el contenido de Na en el anfíbol. Los contenidos de los elementos se encuentran en a.p.f.u.

Utilizando la composición de los minerales, GeoPS y Perple\_X determinan condiciones de P-T de  $8 \pm 1$  kbar y  $400 \pm 25$  °C (Fig. 20). Este resultado difiere del reportado por Villares (2021) de  $3.7 \pm 1.1$  kbar a  $314 \pm 26$  °C, quien utilizó el programa THERMOCALC (opción de avPT) con la base de datos termodinámica “ds55” para determinar estos valores de P-T.

## **4.2 Uso de pseudosecciones en la solución de problemas petrológicos**

En esta sección se describe los parámetros utilizados para cálculo de una pseudosección con el fin de determinar las condiciones de metamorfismo de una eclogita proveniente del complejo Raspas, Provincia del Oro, Ecuador. La composición de roca total y minerales fueron tomados de John et al. (2010). La muestra considerada es la SEC 43-1, la composición de roca total y de sus minerales se muestra en la Tabla 5.

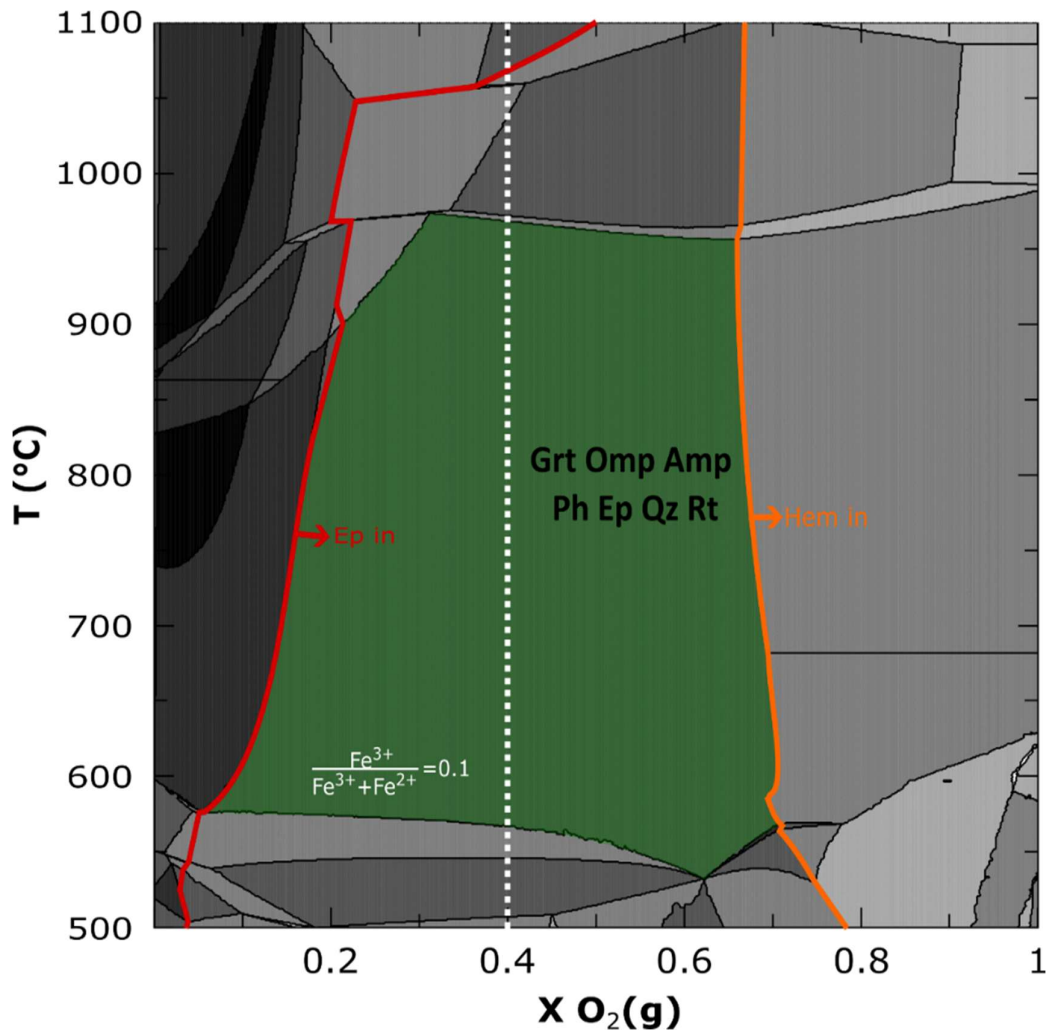
El cálculo de la pseudosección se realizó utilizando el programa Perple\_X y GeoPS, debido a que ambos fueron los programas que mejores resultados produjeron en la construcción de pseudosecciones para metabasitas (ver sección 4.1.3). Los modelos minerales utilizados para el cálculo de la pseudosección fueron para: el granate, onfacita, anfíbol, fengita y epidota aquellos de Holland & Powell (1998), Green et al. (2007), Diener & Powell (2010), Holland & Powell (1998) y Holland & Powell (2011), respectivamente.

**Tabla 5.** Composición de roca total y composiciones minerales representativas para la muestra SEC 43-1 (John et al., 2010). La composición mineralógica se ajusta a los modelos minerales mencionados anteriormente.

Litología	Eclogita				
	Roca total (wt. %)	Onfacita (wt. %)	Granate (wt. %)	Fengita (wt. %)	Anfibol (wt. %)
SiO <sub>2</sub>	47.92	55.16	38.87	49.3	43.38
TiO <sub>2</sub>	1.79	0.17	0.02	0.656	0.55
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.67	9.99	21.65	28.5	15.34
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-	-	-	0	0.04
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.04	4.89	24.09	1.91	12.47
MnO	0.19	0.03	0.4	0.02	0
MgO	6.46	8.77	5.03	2.89	10.54
CaO	11.1	14.62	10.63	0	8.59
Na <sub>2</sub> O	3.09	6.07	0	1.1	4.2
K <sub>2</sub> O	0.53	0	0	10.3	0.75
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.13	-	-	-	-
LOI	0.57	-	-	-	-
<b>Total</b>	99.49	99.7	100.69	94.676	95.86
<b>Xalm</b>			0.51		
<b>Xgrs</b>			0.29		
<b>Xprp</b>			0.19		
<b>Xsps</b>			0.01		
<b>Q</b>		0.57			
<b>Jd</b>		0.39			
<b>Ae</b>		0.04			

La especiación de Fe (i.e.,  $Fe^{3+}/Fe_{total}$ ) es importante en el cálculo de una pseudosección debido a que esta afecta el conjunto de minerales al equilibrio. La cantidad de  $Fe^{3+}$  con respecto al  $Fe_{total}$  se ingresa en una notación específica para Perple\_X. Lo que comúnmente en otros programas computacionales esta razón se expresa como  $Fe^{3+}/Fe_{total}$ , en Perple\_X, la cantidad de  $Fe^{3+}$  se expresa en cantidades de moles de O<sub>2</sub> en el sistema. La cantidad de O<sub>2</sub> que se ingresa corresponde a la cantidad de moles de O<sub>2</sub> necesarios para transformar el FeO en Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> considerando la ecuación  $4FeO + O_2 \rightarrow 2Fe_2O_3$ . El FeO que se ingresa corresponde al  $Fe_{total}$ , calculado como:  $FeO_{total} = FeO + Fe_2O_3$  (donde Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es expresado como FeO).

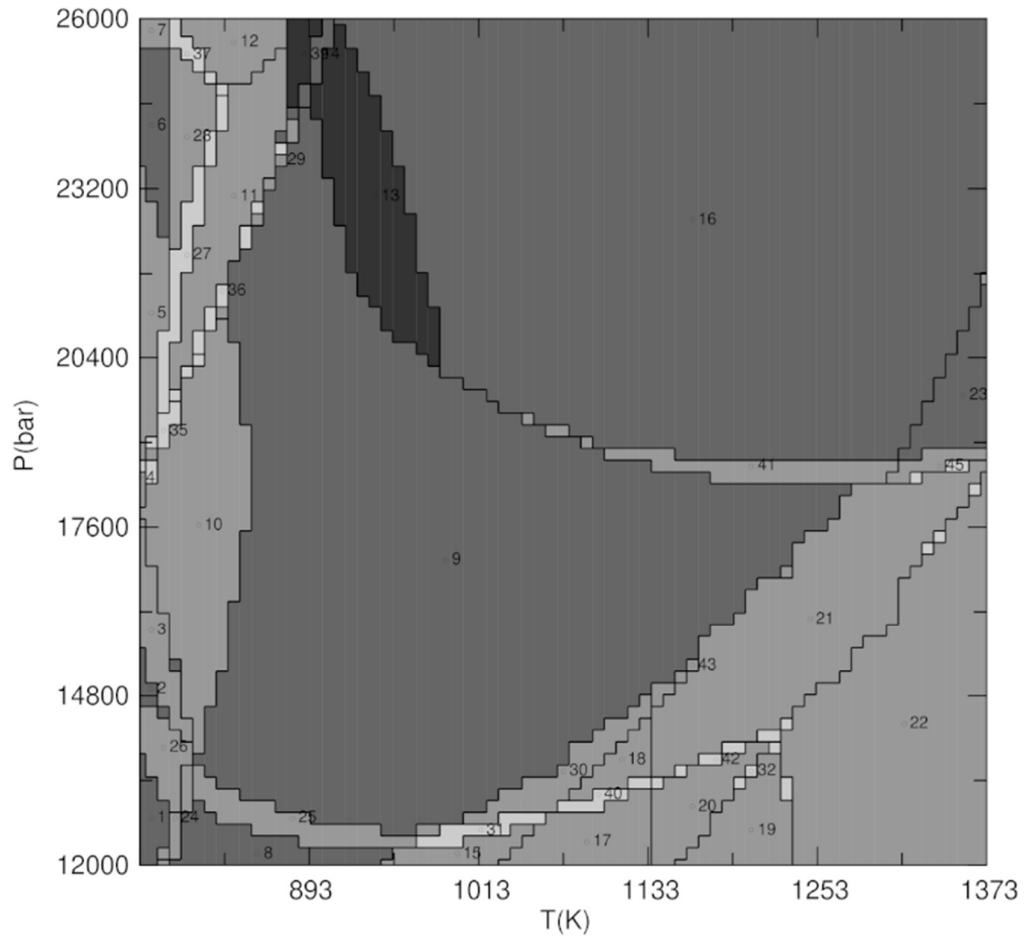
Para determinar la cantidad de  $O_2$  a ser utilizada en la construcción de la pseudosección P-T se construye una pseudosección P-X (Fig. 21) en Perple\_X. En la Fig. 21 se determinó los valores de  $O_2$  para los cuales se obtiene la paragénesis mineral observada en la muestra SEC 43-1. La Fig. 22 muestra que el campo de estabilidad de la paragénesis mineral anfíbol + granate + onfacita + fengita + cuarzo + rutilo se cumple entre 0.1 y 0.7 g de  $O_2$ . Para la construcción de la pseudosección (Fig. 24) se eligió valor medio de este rango (es decir 0.4 g de  $O_2$ ) que es equivalente a 10% del  $Fe^{3+}$  con respecto al hierro total.



**Fig. 21.** Pseudosección P-X para la muestra SEC 43-1. Este gráfico muestra los minerales estables calculados para la muestra SEC 43-1 a una presión fija de 17 kbar cuando se varía el contenido de  $O_2$  (i.e., variación de  $Fe^{3+}$ ). El campo en verde indica la paragénesis mineral reportada para la roca SEC 43-1. La línea roja representa el ingreso de epidota al sistema cuando el contenido de  $O_2 > 0.2$  g y la línea naranja representa el ingreso de hematita al sistema cuando el contenido de  $O_2 > 0.7$  g. La línea punteada en blanco representa el promedio de  $O_2$  en el campo de estabilidad deseado.



Una vez calculada la especiación del hierro se calculó la pseudosección considerando que el sistema está saturado en agua y utilizando el modelo de actividad del agua de Pitzer & Sterner (1998). Debido a que no se ha calculado anteriormente una pseudosección con estos datos se realizaron varios ensayos preliminares para así establecer una ventana P-T adecuada en la cual se desarrolle la paragénesis reportada para la roca SEC 43-1. La Fig. 22 muestra una pseudosección calculada con una resolución baja con la ventana P-T idónea.

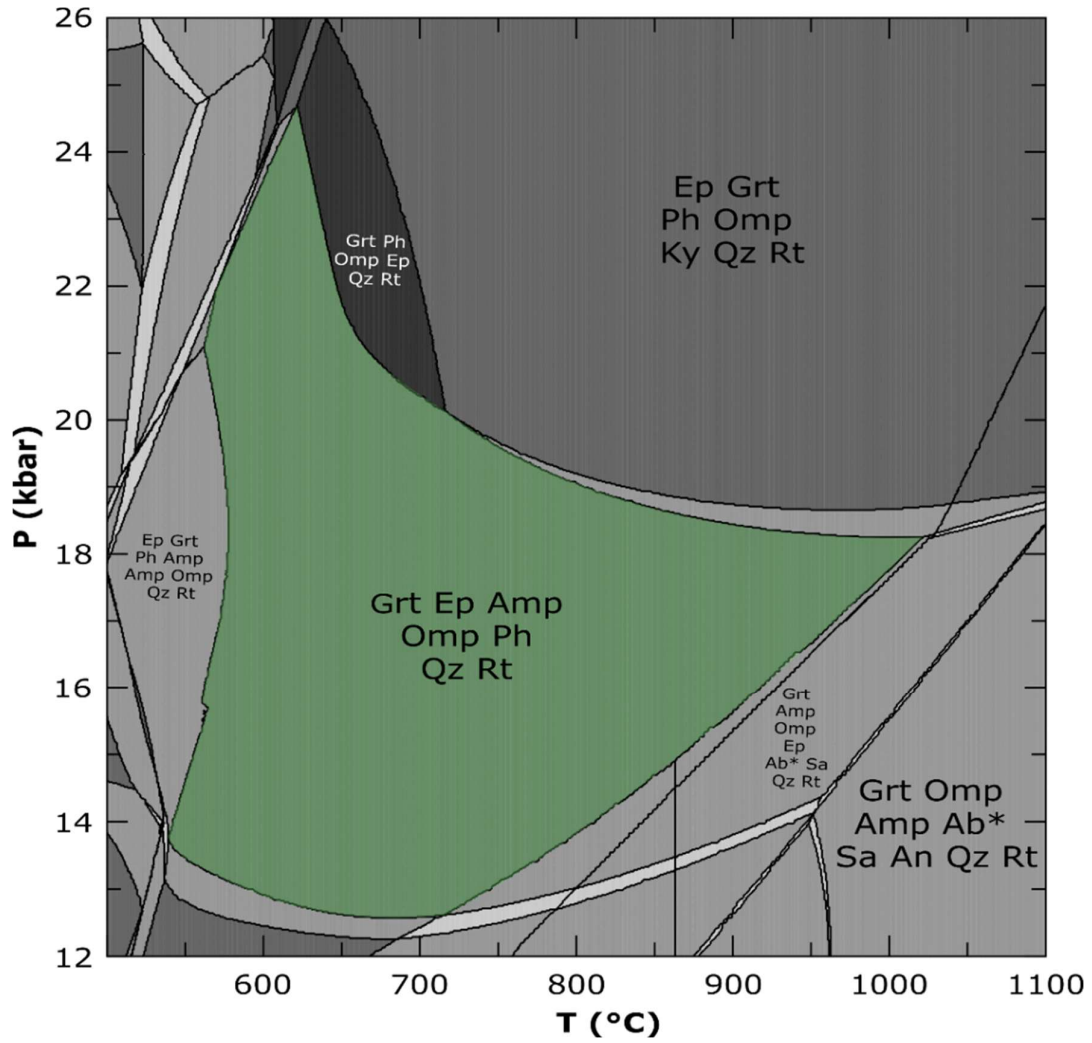


**Fig. 22.** Pseudosección preliminar de la muestra SEC 43-1 de John et al. (2010) en una ventana P-T de 12 a 26 kbar y 500 a 1100 °C.

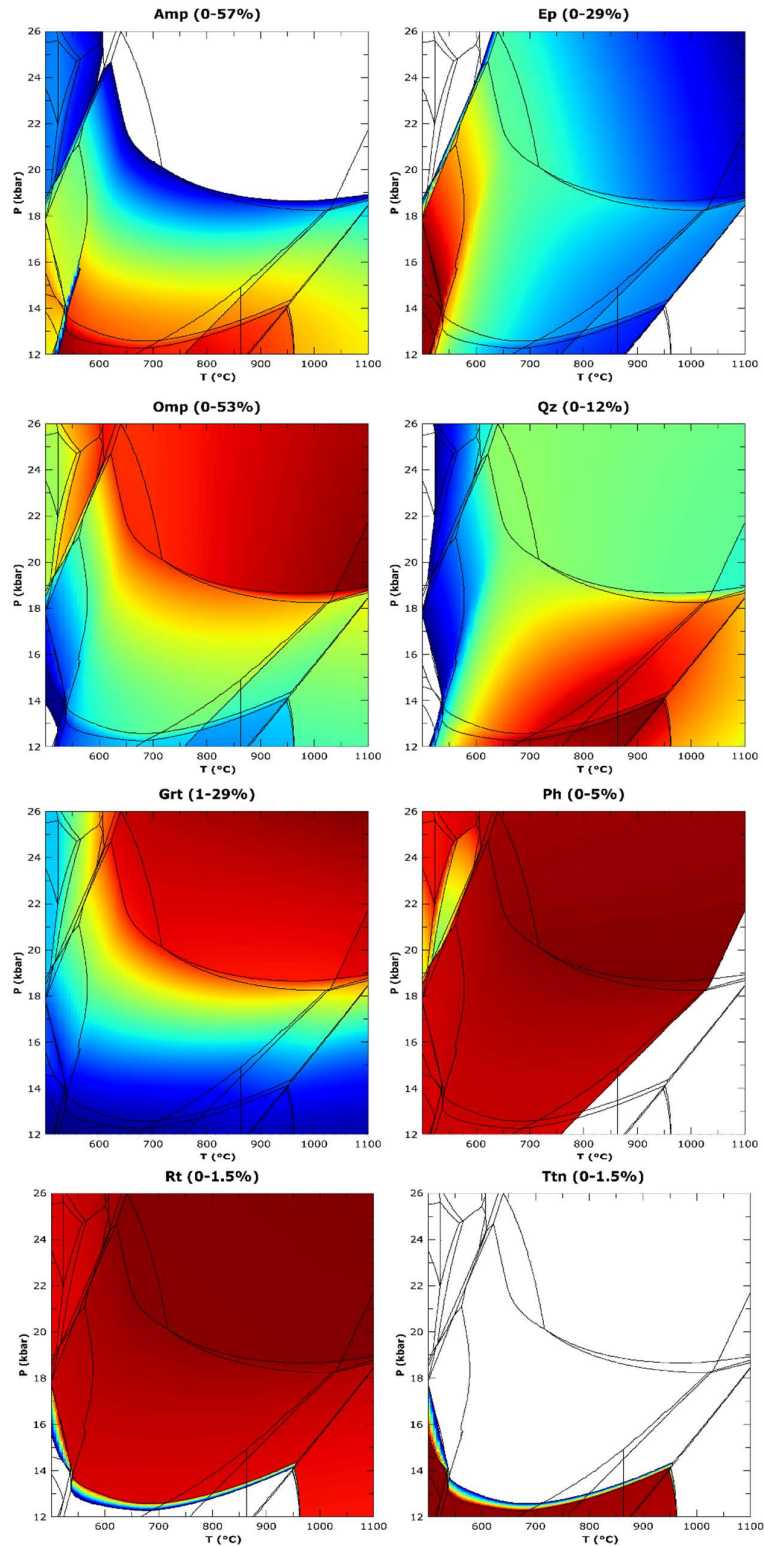
**Tabla 6.** Paragénesis mineral observada en la Fig. 23. Abreviatura de los minerales tomada de Whitney & Evans (2010)

<b>1</b>	Ph Ep Grt Amp Ttn	<b>26</b>	Ep Ph Grt Amp Omp Ttn
<b>2</b>	Ep Grt Amp Ph Omp Ttn	<b>27</b>	Ph Grt Amp Omp Lws Stp Qz Rt
<b>3</b>	Grt Ep Omp Amp Ph Ttn Rt	<b>28</b>	Amp Grt Omp Ph Lws Qz Rt
<b>4</b>	Ep Ph Amp Grt Omp Lws Rt	<b>29</b>	Ph Omp Amp Ep Grt Lws Qz Rt
<b>5</b>	Omp Grt Amp Ph Lws Stp Rt	<b>30</b>	Grt Ph Ep Amp Omp Ab Qz Rt
<b>6</b>	Amp Omp Ph Grt Lws Rt	<b>31</b>	Ep Ph Omp Grt Amp Ttn Ab Qz Rt
<b>7</b>	Omp Ph Amp Grt Lws Tlc Rt	<b>32</b>	Ep Grt Omp Amp Ttn Ab* Sa An Qz
<b>8</b>	Grt Ep Ph Amp Omp Ttn Qz	<b>33</b>	Ep Grt Omp Amp Ab* Sa An Qz Rt
<b>9</b>	Grt Omp Amp Ph Ep Qz Rt	<b>34</b>	Ph Amp Grt Ep Omp Lws Stp Rt
<b>10</b>	Amp Ph Grt Ep Omp Qz Rt	<b>35</b>	Ep Grt Amp Ph Omp Lws Qz Rt
<b>11</b>	Omp Grt Ph Amp Lws Stp Qz Rt	<b>36</b>	Grt Ep Ph Omp Amp Lws Stp Qz Rt
<b>12</b>	Omp Grt Ph Amp Lws Tlc Qz Rt	<b>37</b>	Amp Grt Omp Ph Lws Tlc Qz Rt
<b>13</b>	Ph Grt Ep Omp Qz Rt	<b>38</b>	Ph Omp Grt Lws Stp Qz Rt
<b>14</b>	Omp Ep Grt Ph Lws Qz Rt	<b>39</b>	Grt Omp Ph Lws Qz Rt
<b>15</b>	Omp Ph Amp Grt Ep Ttn Ab Qz	<b>40</b>	Ep Omp Grt Amp Ttn Ab Sa Qz Rt
<b>16</b>	Omp Grt Ph Ep Ky Qz Rt	<b>41</b>	Ep Omp Grt Ph Amp Ky Qz Rt
<b>17</b>	Ep Omp Amp Grt Ttn Ab Sa Qz	<b>42</b>	Ep Grt Amp Omp Ttn Ab* Sa Qz Rt
<b>18</b>	Amp Grt Omp Ep Ab Sa Qz Rt	<b>43</b>	Ph Grt Amp Omp Ep Ab* Qz Rt
<b>19</b>	Amp Omp Grt Ttn Ab* Sa An Qz	<b>44</b>	Omp Amp Grt Ttn Ab* Sa An Qz Rt
<b>20</b>	Omp Grt Ep Amp Ttn Ab* Sa Qz	<b>45</b>	Ep Omp Grt Amp Ky Sa Qz Rt
<b>21</b>	Grt Omp Ep Amp Ab* Sa Qz Rt	<b>46</b>	Ep Grt Amp Omp Ky Ab* Sa Qz Rt
<b>22</b>	Grt Amp Omp Ab* Sa An Qz Rt	<b>47</b>	Omp Ep Grt Ph Ky Sa Qz Rt
<b>23</b>	Ep Omp Grt Ky Sa Qz Rt	<b>48</b>	Amp Ep Ph Grt Ttn Qz
<b>24</b>	Ph Amp Ep Omp Grt Ttn Qz	<b>49</b>	Ep Grt Ph Amp Omp Rt
<b>25</b>	Amp Grt Omp Ep Ph Ttn Qz Rt	<b>50</b>	Ph Grt Amp Omp Ep Stp Qz Rt

Una vez definido los rangos de P-T en los cuales se desarrolla la paragénesis mineral deseada (campo 9 en la Fig. 22) se construye una pseudosección con mejor resolución (Fig. 23). Para obtener la pseudosección de la Fig. 23, se aumentó la resolución del mallado.



**Fig. 23.** Pseudosección de la muestra SEC 43-1 de John et al. (2010) en alta resolución, calculada en *Perple\_X*, el sistema  $K_2O-Na_2O-CaO-FeO-MgO-MnO-Al_2O_3-SiO_2-TiO_2-H_2O-O_2$  (NCKFMMnASHTO) y considerando el agua en exceso. El campo bivalente en verde indica la paragénesis mineral reportada. Abreviatura de los minerales tomada de Whitney & Evans (2010).



**Fig. 24.** Volúmenes de los minerales de anfíbol, epidota, onfacita, cuarzo, granate, fengita, rutilo y titanita calculados mediante Perple\_X y graficados utilizando WERAMI. Cada mineral presenta su propia escala de volumen. El volumen aumenta hacia colores cálidos (i.e., rojizos) y disminuye hacia colores fríos (i.e., azules).

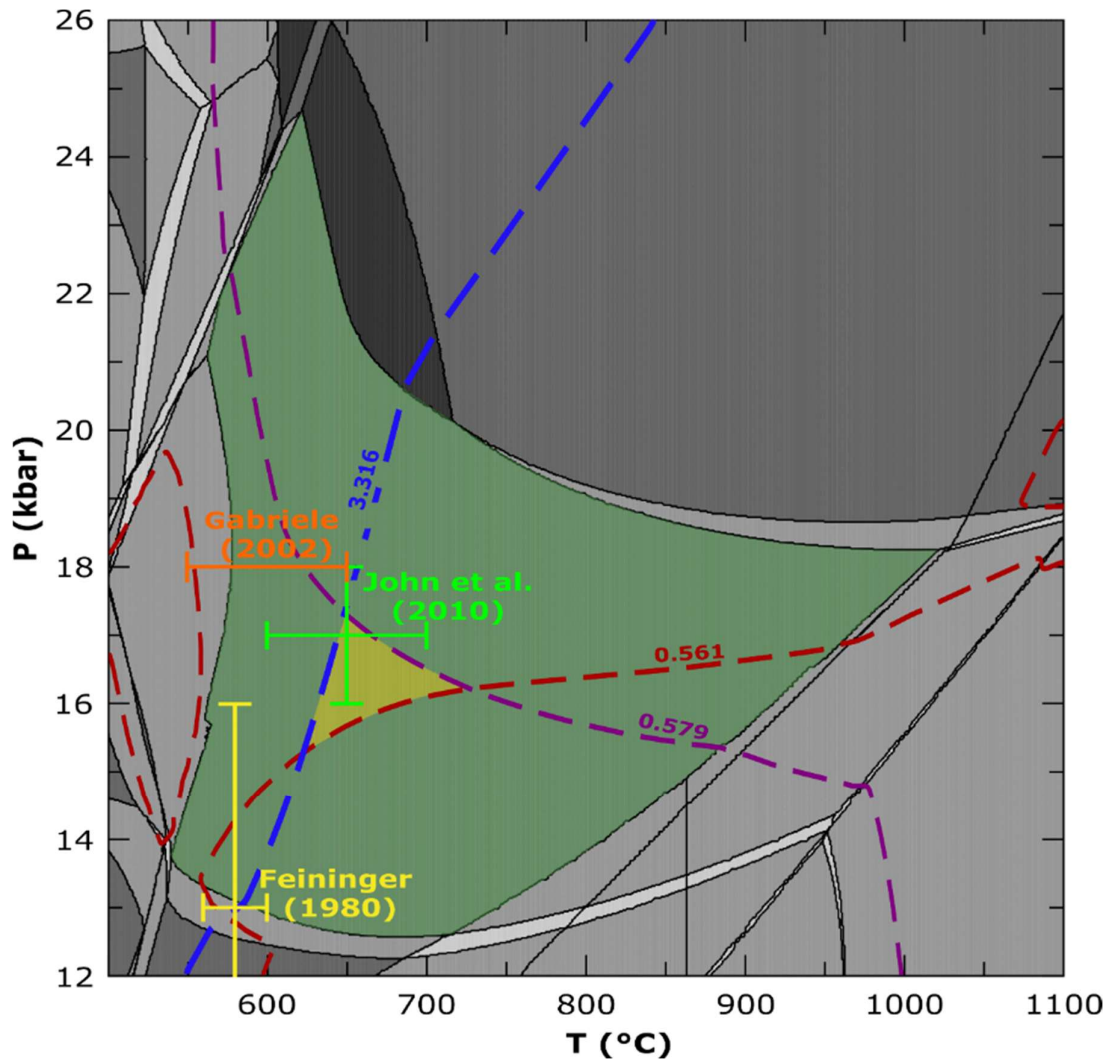
El conjunto mineral al equilibrio reportado por John et al. (2010) es granate + onfacita + rutilo + anfíbol (barroisítico o catafórico) ± cuarzo ± fengita ± carbonato. Dicho conjunto, a excepción del carbonato, se desarrolla a  $550 \pm 50$  °C y  $13.5 \pm 5.5$  kbar como lo muestran las Fig. 23 y 24.

### **4.3 Comparación entre los datos obtenidos usando pseudosecciones y aquellos de geotermobarometría convencional**

Debido al amplio rango de estabilidad mineral obtenido en la Fig. 23 se calculó un campo P-T basado en la composición de 3 minerales (fengita, granate y onfacita) de los cuales se tenían datos de composición química (Fig. 25).

El rango de temperatura determinados utilizando la composición del granate, piroxeno y fengita en la pseudosección calculada es de  $670 \pm 50$  °C con presiones de  $16.5 \pm 1$  kbar (Fig. 25). Este cálculo de P-T se correlaciona bien con el propuesto por John et al. (2010), subestimando la presión en 0.5 kbar y sobreestimando la temperatura en 20 °C. El rango P-T calculado en este trabajo no se correlaciona con las condiciones P-T propuestas por Feininger (1980) y Gabriele (2002), pero se debe considerar que estas condiciones si caen (casi en su totalidad) en el campo bivariante que representa la estabilidad mineral descrita por John et al. (2010).

Según Powell & Holland (2008) cuando comparamos la geotermobarometría convencional y una pseudosección, un requerimiento mínimo debe ser el uso los mismos datos termodinámicos y modelos de actividad-composición de los minerales involucrados. Aunque este requerimiento sea importante, la mayor parte del tiempo no es posible el uso de las mismas bases de datos termodinámicas o modelos minerales debido a dos razones principales: la primera es la falta de información geotermobarométrica publicada y la segunda es el uso de programas de modelamiento termodinámico que presenten limitaciones y variaciones en el método de cálculo original.



**Fig. 25.** Isolíneas de composición calculadas en el módulo WERAMI de Perple\_X superpuestas en la pseudosección de la muestra SEC 43-1. Las líneas segmentadas representan: en azul el contenido de Si en la fengita, en morado el contenido de Mg en granate y en rojo el contenido de Ca en la onfacita. Las líneas en amarillo indican los cálculos de Feininger (1980) a temperaturas de  $580 \pm 20$  °C para presiones mínimas de  $13 \pm 3$  kbar, las líneas en naranja muestran los cálculos de Gabriele (2002) que reporta temperaturas de  $600 \pm 50$  °C a 18 kbar y las líneas verdes representan rangos de temperatura de 600 a 700 °C a presiones de 16-18 kbar calculados por John et al. (2010). La paragénesis mineral de la eclogita está representada por el campo en verde mientras que el campo amarillo indica el rango P-T propuesto. Los contenidos de los elementos se encuentran en a.p.f.u.

#### 4.4 Ventajas y limitaciones de las estrategias de cálculo de pseudosecciones

Todos los programas computacionales analizados, excepto THERMOCALC, buscan el conjunto de minerales al equilibrio que presenta menor energía libre de Gibbs a ciertas condiciones de P-T lo cual permite automatizar y facilitar el tiempo de cálculo. Aunque en principio estos programas minimizan la G, cada programa tiene estrategias diferentes para lograrlo influenciando de esta manera en el tiempo de cálculo para construir una pseudosección.

Para Perple\_X, la optimización de la minimización de G está dada por la elección de la base de datos termodinámica que más se ajuste al tipo de roca (i.e. “ds6.2” para rocas metamórficas y “ds6.3.3” para rocas ígneas), los modelos minerales (i.e. los modelos a-X de Green et al. (2016) para metabasitas y los de White et al. (2014) para metapelitas) y sobre todo la resolución inicial de los pseudocompuestos junto con un nivel adecuado de mallado. Cabe recalcar que en este programa los parámetros de optimización son fáciles de modificar y a su vez existe una gama amplia de bases de datos termodinámicas y modelos de actividad mineral. Como se ha mencionado, Perple\_X simplifica la minimización de G utilizando pseudocompuestos. Esta estrategia es efectiva, ya que al discretizar las funciones X-G se realiza los cálculos más rápidamente.

La exactitud en la determinación de las líneas que separan los campos de estabilidad mineral es establecida por el usuario aumentando el número de pseudocompuestos. El número de pseudocompuestos aumenta automáticamente cuando se aumenta el número de componentes en el sistema. Así, si durante el cálculo se seleccionan modelos minerales complejos (e.g., modelos de Diener & Powell (2010) para el anfíbol que consideran 8 componentes) el cálculo se realizará con un mayor número de pseudocompuestos que influenciará en el tiempo de cálculo de las pseudosecciones. De acuerdo a la experiencia obtenida durante la utilización de Perple\_X para la realización de este trabajo, una vez que se logra cumplir las condiciones óptimas para el cálculo de pseudosecciones, los tiempos de procesamiento de Perple\_X varían entre 30 a 300 minutos, dependiendo de la complejidad del sistema (número de componentes) y de la existencia o no de fases saturadas.

GeoPS también utiliza la estrategia de pseudocompuestos para facilitar la minimización de G. Sin embargo, a diferencia de Perple\_X, GeoPS utiliza una malla adaptativa triangular (Fig. 9c, d) que mejora el tiempo de procesamiento. Esta estrategia ofrece resultados rápidos, pero menos confiables que aquellos de Perple\_X, porque en

Perple\_X el usuario determina el nivel de mallado. En base a la experiencia en la realización de este trabajo, se recomienda el uso de GeoPS solamente para la realización de un primer boceto de pseudosección (i.e., determinar rápidamente los campos de P-T en donde se encuentra la paragénesis mineral deseada), mientras que la pseudosección final debería ser generada con Perple\_X con un mallado mayor al establecido por defecto.

En el caso de Theriak-Domino, la minimización de G se basa en utilizar n-funciones X-G de varios minerales expresados en función de sus miembros finales. Theriak-Domino determina la G para todas las combinaciones posibles de los miembros finales hasta alcanzar el valor mínimo de G. Este proceso conlleva un alto consumo de procesamiento lo que supone un resultado en mayor tiempo que al utilizar GeoPS o Perple\_X. Otra limitación de Theriak-Domino es que no puede determinar puntos invariantes o, dicho de otra manera, las curvas univariantes no llegan a intersectarse (Fig. 8d). Este problema también es la raíz de los extensos tiempos de cálculo de Theriak-Domino porque al no poder encontrar el punto invariante (por limitaciones propias del método) los niveles de refinamiento aumentan en estas zonas hasta llegar al nivel de resolución máximo.

THERMOCALC, por el contrario, soluciona ecuaciones termodinámicas para determinar las condiciones de P-T en la que se cumpla que  $\Delta G=0$ . El uso de esta estrategia convierte a THERMOCALC en una calculadora de fases de equilibrio. La popularidad de THERMOCALC, de acuerdo a Connolly (2017), se da porque al ser una calculadora de fases, puede tratar sistemas químicamente complejos, pero a su vez este programa requiere una alta experiencia petrológica para la elección de dicho conjunto de fases. La localización de las reacciones y los puntos invariantes en un diagrama P-T son examinadas en ventanas P-T propuestas por el usuario utilizando el análisis de Schreinemakers. Para este proceso se necesita de una alta experiencia del usuario convirtiendo su uso en un proceso laborioso y mucho más complejo, especialmente cuando se trabaja con un mayor número de componentes en el sistema.

#### **4.5 Uso de bases de datos termodinámicas en la construcción de pseudosecciones**

Los resultados obtenidos por Theriak-Domino podrían ser potencialmente comparados con los de THERMOCALC debido a que ambos buscan determinar las líneas de reacción por diferentes métodos. Sin embargo, existe una gran diferencia entre estos programas más allá del método de cálculo y su disyuntiva tiene relación con las bases de



datos termodinámicos que estos programas utilizan. Según Lanari & Duesterhoeft (2019) Theriak-Domino utiliza por defecto la base termodinámica JUN92 construida a partir de los datos termodinámicos de Berman et al. (1986). Esta base de datos termodinámica permite el cálculo de fases con los componentes Si, Al, Mg, Ca, Na, K, Ti, Fe, Fe<sup>3+</sup>, H<sub>2</sub>O y CO<sub>2</sub> con lo que se pueden obtener un total de 67 miembros finales. Esta base termodinámica debe ser utilizada para cálculos a presiones menores a 20 GPa y temperaturas menores de 1200°C.

Por el contrario, la última versión de THERMOCALC utiliza la base de datos termodinámica de Holland y Powell (2011), actualizada en 2012, conocida como “ds6.2”. Esta versión permite el cálculo de pseudosecciones utilizando los componentes Si, Al, Mg, Ca, Na, K, Ti, Fe, Fe<sup>3+</sup>, Mn, Cr, Zr, Ni, Cu, Cu<sub>3</sub>, Cl, S, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>. Debido a que la base de datos termodinámica “ds6.2” considera un gran número de componentes se puede obtener un total de 254 miembros finales, de los cuales 210 son minerales, 18 de silicatos líquidos y 26 de especies acuosas. Según Holland & Powell (2011), THERMOCALC ofrece buenos resultados a presiones y temperaturas menores de 30 GPa y 2000 °C

A pesar de que existen traducciones de la base “ds6.2” para Theriak-Domino, estos datos termodinámicos no son consistentes al ejecutarlos con Domino y como consecuencia no se pudo replicar la pseudosección de la muestra A33 (Fig. 13) en el presente trabajo. También cabe recalcar que no existe ningún tipo de traducción de la base de JUN92 para THERMOCALC, por lo que no se puede realizar ningún tipo de comparación con esta base de datos termodinámica.

Con estas consideraciones de las bases de datos termodinámicas discutidas previamente, vale mencionar que una de las grandes ventajas de Perple\_X es que este programa viene por defecto con bases de datos de diferentes autores (e.g., Berman et al., 1986; Holland & Powell, 1998, 2011; Stixrude & Lithgow-Bertelloni, 2011). Para utilizar diferentes bases de datos en Perple\_X es necesario combinarlas con modelos de actividad-composición compatibles con la base de datos seleccionada, esto dota a Perple\_X de una gran versatilidad en los cálculos de fases de equilibrio y la extracción de propiedades de las mismas.

Potencialmente GeoPS podría utilizar todas las bases de datos termodinámicas de Perple\_X, pero actualmente solo dispone de las diferentes versiones de las bases de datos de Holland & Powell (2011), junto con modelos minerales compatibles con las mismas.

# CAPÍTULO V

## 5 CONCLUSIONES

El uso de programas computacionales ayuda al entendimiento del metamorfismo y de las rocas metamórficas, mediante la creación de redes petrogenéticas y pseudosecciones que muestran los campos de estabilidad mineral y cambios en la paragénesis que sufren las rocas con el aumento de la P y T.

Los cuatro programas computacionales discutidos en este trabajo (THERMOCALC, Perple\_X, Theriak-Domino, GeoPS) han mostrado un avance en su desarrollo desde su creación. Cada uno de los programas computacionales utiliza una estrategia diferente de cálculo de fases minerales al equilibrio. Perple\_X y GeoPS utilizan un método de minimización de la energía libre de Gibbs muy similar y permite al usuario seleccionar diferentes bases de datos termodinámica y ecuaciones de actividad mineral. Perple\_X, a diferencia de GeoPS, presenta mejores resultados gracias las opciones de refinamiento que el usuario puede controlar. Por el contrario, GeoPS es el único programa que muestra una interfaz gráfica intuitiva y fácil de utilizar. El tiempo de cálculo de pseudosecciones en GeoPS debido a su algoritmo de cálculo es el menor de los cuatro programas computacionales analizados.

THERMOCALC es un programa computacional que utiliza una estrategia de cálculo de fases al equilibrio muy consistente pero que requiere de una gran experticia por parte del usuario. El usuario debe tener un cierto grado de conocimiento de los minerales estables a diferentes condiciones de P-T con el fin de determinar una a una las reacciones que afecta a una roca. THERMOCALC utiliza una única base de datos y no existe la posibilidad de utilizar bases de datos termodinámicas diferentes a las creadas por Holland y Powell.

Theriak-Domino es el único programa de código abierto pero su rendimiento en la generación de pseudosecciones no fue el mejor. Theriak-Domino está optimizado para el cálculo mediante la base de datos termodinámica JUN92 de Berman et al. (1986), también permite el uso de versiones adaptadas de las bases de datos de Holland & Powell (2011) las cuales fueron creadas específicamente para THERMOCALC. Estas adaptaciones, como lo visto en este trabajo, están limitadas a metapelitas y aun así no producen resultados aceptables como los vistos en Perple\_X o GeoPS. El método de cálculo de Theriak-Domino se basa en calcular la G de n composiciones de minerales hasta encontrar

la G mínima. Esta técnica de cálculo requiere una alta capacidad del procesador e implica mayor tiempo de cálculo de pseudosecciones.

En términos generales el modelamiento termodinámico de fases de equilibrio mediante programas computacionales requiere una estrategia efectiva al momento de generar pseudosecciones. Ejemplos de estas estrategias son el uso de programas que trabajen con algoritmos de minimización de G y el ajuste correcto de niveles de resolución en el mallado que sean suficientes para indicar correctamente los campos de paragénesis mineral sin exceder en la capacidad procesamiento de la computadora utilizada.

Las pseudosecciones pueden ser utilizadas como indicadores de las condiciones de P-T, si se compara la composición natural de los minerales con la composición de los minerales calculados matemáticamente. Las variaciones observadas entre los datos obtenidos de una pseudosección y los datos de geotermobarometría convencional son difíciles de explicar y pueden deberse a las diferentes bases termodinámicas utilizadas en cada método y los errores asociados a cada uno de los programas computacionales.

## **6 RECOMENDACIONES**

El uso de Linux para el cálculo de pseudosecciones es recomendable para la optimización del tiempo de procesamiento, ya que es más eficiente en el uso del CPU en comparación con Windows.

Verificar las actualizaciones de GeoPS debido a su alto potencial en su reciente estrategia de cálculo de pseudosecciones.

En estudios posteriores para la generación de pseudosecciones se recomienda incluir el volumen de los minerales en el análisis petrológico para así poder comparar con los volúmenes calculados en los programas, reduciendo así los errores generados al comparar los datos composicionales con isóneas de composición.

Finalmente, también se sugiere usar la base de datos "ds5.5" (versión más actualizada de los datos termodinámicos de Holland & Powell de 1998) para generar pseudosecciones con sistemas químicos simples (e.g., KFMASH, FMASH).

## 7 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Allaby, M. (2013). *A dictionary of geology and earth sciences*. Oxford University Press.
- Anderson, G. M., & Crerar, D. A. (1993). *Thermodynamics in Geochemistry: The Equilibrium Model*. Oxford University Press. <https://doi.org/10.1093/oso/9780195064643.001.0001>
- Aspden, J. A., Bonilla, W., Duque, P., & British Geological Survey. (1995). *The El Oro metamorphic complex, Ecuador: Geology and economic mineral deposits*. British Geological Survey.
- Avellaneda-Jiménez, D. S., Cardona, A., Valencia, V., León, S., & Blanco-Quintero, I. F. (2022). Metamorphic gradient modification in the Early Cretaceous Northern Andes subduction zone: A record from thermally overprinted high-pressure rocks. *Geoscience Frontiers*, 13(2), 101090. <https://doi.org/10.1016/j.gsf.2020.09.019>
- Baldwin, J., Perkin, D., & Mogk, D. (2016, noviembre 10). *THERMOCALC*. Teaching Phase Equilibria. [https://serc.carleton.edu/research\\_education/equilibria/thermocalc.html](https://serc.carleton.edu/research_education/equilibria/thermocalc.html)
- Berman, R. G., Engi, M., Greenwood, H. J., & Brown, T. H. (1986). Derivation of Internally-Consistent Thermodynamic Data by the Technique of Mathematical Programming: A Review with Application the System MgO-SiO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O. *Journal of Petrology*, 27(6), 1331-1364. <https://doi.org/10.1093/petrology/27.6.1331>
- Capitani, C. de, & Brown, T. H. (1987). The computation of chemical equilibrium in complex systems containing non-ideal solutions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51(10), 2639-2652. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(87\)90145-1](https://doi.org/10.1016/0016-7037(87)90145-1)
- Capitani, C. de, & Petrakakis, K. (2010). The computation of equilibrium assemblage diagrams with Theriak/Domino software. *American Mineralogist*, 95(7), 1006-1016. <https://doi.org/10.2138/am.2010.3354>
- Ceccato, A., Goncalves, P., & Pennacchioni, G. (2020). Temperature, fluid content and rheology of localized ductile shear zones in subsolidus cooling plutons. *Journal of Metamorphic Geology*, 38(8), 881-903. <https://doi.org/10.1111/jmg.12553>
- Cemič, L. (2005). *Thermodynamics in mineral sciences: An introduction*.
- 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(1), 524-541. <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2005.04.033>
- Connolly, J. a. D. (2009). The geodynamic equation of state: What and how. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 10(10). <https://doi.org/10.1029/2009GC002540>
- Connolly, J. A. D. (2017). A primer in Gibbs energy minimization for geophysicists. *Petrology*, 25(5), 526-534. <https://doi.org/10.1134/S0869591117050034>
- Connolly, J. A. D., & Kerrick, D. M. (1987). An algorithm and computer program for calculating composition phase diagrams. *Calphad*, 11(1), 1-55. [https://doi.org/10.1016/0364-5916\(87\)90018-6](https://doi.org/10.1016/0364-5916(87)90018-6)
- Diener, J. F. A., & Powell, R. (2010). Influence of ferric iron on the stability of mineral assemblages. *Journal of Metamorphic Geology*, 28(6), 599-613. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.2010.00880.x>
- Duesterhoeft, E. (2016). A volume equation of state that extends thermodynamic datasets, using the Bridgman Power Series, to very high pressures (20 GPa). *American Journal of Science*, 316(6), 578-589. <https://doi.org/10.2475/06.2016.03>
- Feininger, T. (1980). Eclogite and Related High-Pressure Regional Metamorphic Rocks from the Andes of Ecuador. *Journal of Petrology*, 21(1), 107-140. <https://doi.org/10.1093/petrology/21.1.107>

- Gabriele, P. (2002). *HP Terranes Exhumation in an Active Margin Setting: Geology, Petrology and Geochemistry of the Raspas Complex in SW Ecuador*. Université de Lausanne - Faculté des sciences.
- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A., & Wright, M. H. (1981). Aspects of mathematical modelling related to optimization. *Applied Mathematical Modelling*, 5(2), 71-83. [https://doi.org/10.1016/0307-904X\(81\)90002-0](https://doi.org/10.1016/0307-904X(81)90002-0)
- Goncalves, P., Raimondo, T., Paquette, J.-L., & Santos de Souza de Oliveira, J. (2021). Garnet as a monitor for melt–rock interaction: Textural, mineralogical, and compositional evidence of partial melting and melt-driven metasomatism. *Journal of Metamorphic Geology*, 39(5), 617-648. <https://doi.org/10.1111/jmg.12592>
- Green, E. C. R., White, R. W., Diener, J. F. A., Powell, R., Holland, T. J. B., & Palin, R. M. (2016). Activity–composition relations for the calculation of partial melting equilibria in metabasic rocks. *Journal of Metamorphic Geology*, 34(9), 845-869. <https://doi.org/10.1111/jmg.12211>
- Green, E., Holland, T., & Powell, R. (2007). An order-disorder model for omphacitic pyroxenes in the system jadeite-diopsidededenbergite- acmite, with applications to eclogitic rocks. *American Mineralogist*, 92(7), 1181-1189. <https://doi.org/10.2138/am.2007.2401>
- Hensen, B. J. (1971). Theoretical phase relations involving cordierite and garnet in the system MgO-FeO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 33(3), 191-214. <https://doi.org/10.1007/BF00374063>
- Hirsch, D., Baldwin, J., & Perkins, D. (2016, noviembre 10). *What are Pseudosections?* Teaching Phase Equilibria. [https://serc.carleton.edu/research\\_education/equilibria/pseudosections.html](https://serc.carleton.edu/research_education/equilibria/pseudosections.html)
- Holland, T. J. B., Green, E. C. R., & Powell, R. (2018). Melting of Peridotites through to Granites: A Simple Thermodynamic Model in the System KNCFMASHTOCr. *Journal of Petrology*, 59(5), 881-900. <https://doi.org/10.1093/petrology/egy048>
- Holland, T. J. B., & Powell, R. (1998). An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. *Journal of Metamorphic Geology*, 16(3), 309-343. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.1998.00140.x>
- Holland, T. J. B., & Powell, R. (2011). An improved and extended internally consistent thermodynamic dataset for phases of petrological interest, involving a new equation of state for solids. *Journal of Metamorphic Geology*, 29(3), 333-383. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.2010.00923.x>
- John, T., Scherer, E. E., Schenk, V., Herms, P., Halama, R., & Garbe-Schönberg, D. (2010). Subducted seamounts in an eclogite-facies ophiolite sequence: The Andean Raspas Complex, SW Ecuador. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 159(2), 265-284.
- Klein, C. (2019, julio 11). *Mineral associations and phase equilibrium* [Britannica]. <https://www.britannica.com/science/mineral-chemical-compound/Mineral-associations-and-phase-equilibrium>
- Lanari, P., & Duesterhoeft, E. (2019). Modeling Metamorphic Rocks Using Equilibrium Thermodynamics and Internally Consistent Databases: Past Achievements, Problems and Perspectives. *Journal of Petrology*, 60(1), 19-56. <https://doi.org/10.1093/petrology/egy105>
- Lee, J. H. S., & Ramamurthi, K. (2022). *Fundamentals of Thermodynamics*. Taylor & Francis Limited.
- Liu, J.-H., Zhang, Q. W. L., Wang, J., Zhang, H. C. G., & Wu, C.-M. (2021). Metamorphic evolution and SIMS U–Pb geochronology of orthopyroxene-bearing high-P semipelitic granulite in the Fuping area, middle Trans-North China Orogen. *Journal of Metamorphic Geology*, 39(3), 297-320. <https://doi.org/10.1111/jmg.12580>
- McSween, H. Y., Richardson, S. M., & Uhle, M. E. (2003). *Geochemistry: Pathways and Processes* (2.<sup>a</sup> ed.). Columbia University Press. <https://www.jstor.org/stable/10.7312/mcsw12440>

- Molina, J. F., Moreno, J. A., Castro, A., Rodríguez, C., & Fershtater, G. B. (2015). Calcic amphibole thermobarometry in metamorphic and igneous rocks: New calibrations based on plagioclase/amphibole Al-Si partitioning and amphibole/liquid Mg partitioning. *Lithos*, 232, 286-305. <https://doi.org/10.1016/j.lithos.2015.06.027>
- Nelson, S. (2011, marzo 21). *Metamorphic Mineral Assemblages*. Tulane University. <https://www2.tulane.edu/~sanelson/eens212/metaminerals.htm>
- Okawa, T., Asano, H., Ito, K., Mori, S., Umekawa, H., Matsumoto, R., Pyeon, C. H., & Ito, D. (2021). 3—Fundamentals for power engineering. En Y. Koizumi, T. Okawa, & S. Mori (Eds.), *Fundamentals of Thermal and Nuclear Power Generation* (pp. 77-226). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820733-8.00003-0>
- Papeschi, S., Musumeci, G., Massonne, H.-J., Mazzarini, F., Ryan, E. J., & Viola, G. (2020). High-P (P = 1.5–1.8 GPa) blueschist from Elba: Implications for underthrusting and exhumation of continental units in the Northern Apennines. *Journal of Metamorphic Geology*, 38(5), 495-525. <https://doi.org/10.1111/jmg.12530>
- Perkins, D., & Brady, J. (2016, noviembre 10). *Phase Diagrams (and Pseudosections)*. Teaching Phase Equilibria. [https://serc.carleton.edu/research\\_education/equilibria/simplephasediagrams.html](https://serc.carleton.edu/research_education/equilibria/simplephasediagrams.html)
- Piccoli, F., Lanari, P., Hermann, J., & Pettke, T. (2022). Deep subduction, melting, and fast cooling of metapelites from the Cima Lunga Unit, Central Alps. *Journal of Metamorphic Geology*, 40(1), 121-143. <https://doi.org/10.1111/jmg.12621>
- Pitzer, K. S., & Sterner, S. M. (1998). Equations of state valid continuously from zero to extreme pressures for H<sub>2</sub>O and CO<sub>2</sub>. *The Journal of Chemical Physics*, 101(4), 3111. <https://doi.org/10.1063/1.467624>
- Powell, R., & Holland, T. (1994). Optimal geothermometry and geobarometry. *American Mineralogist*, 79(1-2), 120-133.
- Powell, R., & Holland, T. (2010). Using Equilibrium Thermodynamics to Understand Metamorphism and Metamorphic Rocks. *Elements*, 6(5), 309-314. <https://doi.org/10.2113/gselements.6.5.309>
- Powell, R., & Holland, T. J. B. (1985). An internally consistent thermodynamic dataset with uncertainties and correlations: 1. Methods and a worked example. *Journal of Metamorphic Geology*, 3(4), 327-342. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.1985.tb00324.x>
- Powell, R., & Holland, T. j. b. (1988). An internally consistent dataset with uncertainties and correlations: 3. Applications to geobarometry, worked examples and a computer program. *Journal of Metamorphic Geology*, 6(2), 173-204. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.1988.tb00415.x>
- Powell, R., & Holland, T. J. B. (2008). On thermobarometry. *Journal of Metamorphic Geology*, 26(2), 155-179. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.2007.00756.x>
- Powell, R., Holland, T., & Worley, B. (1998). Calculating phase diagrams involving solid solutions via non-linear equations, with examples using THERMOCALC. *Journal of Metamorphic Geology*, 16(4), 577-588. <https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.1998.00157.x>
- Schorn, S. (2018). Dehydration of metapelites during high-P metamorphism: The coupling between fluid sources and fluid sinks. *Journal of Metamorphic Geology*, 36(3), 369-391. <https://doi.org/10.1111/jmg.12296>
- Schorn, S. (2021). *Introduction to phase diagram calculations in KFMASH*. <https://hpxeosandthermocalc.org/the-thermocalc-software/thermocalc-calculation-facilities/thermocalc/pseudosections/>
- Siron, G., Goncalves, P., Marquer, D., Pierre, T., Paquette, J.-L., & Vanandois, J. (2020). Contribution of magmatism, partial melting buffering and localized crustal thinning on the late Variscan thermal structure of the Agly massif (French Pyrenees). *Journal of Metamorphic Geology*, 38(8), 799-829. <https://doi.org/10.1111/jmg.12549>

- Spear, F. S., & Menard, T. (1989). Program GIBBS; a generalized Gibbs method algorithm. *American Mineralogist*, 74(7-8), 942-943.
- Stixrude, L., & Lithgow-Bertelloni, C. (2011). Thermodynamics of mantle minerals—II. Phase equilibria. *Geophysical Journal International*, 184(3), 1180-1213. <https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2010.04890.x>
- Stüwe, K., & Powell, R. (1989). Metamorphic segregations associated with garnet and orthopyroxene porphyroblast growth: Two examples from the Larsemann Hills, East Antarctica. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 103(4), 523-530. <https://doi.org/10.1007/BF01041757>
- Vernon, R. H. (1976). Equilibrium Aspects of Metamorphic Reactions. En R. H. Vernon (Ed.), *Metamorphic Processes: Reactions and Microstructure Development* (pp. 30-74). Springer Netherlands. [https://doi.org/10.1007/978-94-015-1109-4\\_2](https://doi.org/10.1007/978-94-015-1109-4_2)
- Villares, F. (2021). *Petrogenesis and age of the Pelitetec Ophiolitic belt and the Tampanchi ultramafic-mafic complex, Cordillera Real (Ecuador): Geodynamic implications for the evolution of the Andean active margin*. Universidad de Granada. <https://digibug.ugr.es/handle/10481/67843>
- White, R. W., Powell, R., Holland, T. J. B., Johnson, T. E., & Green, E. C. R. (2014). New mineral activity–composition relations for thermodynamic calculations in metapelitic systems. *Journal of Metamorphic Geology*, 32(3), 261-286. <https://doi.org/10.1111/jmg.12071>
- Whitney, D. L., & Evans, B. W. (2010). Abbreviations for names of rock-forming minerals. *American Mineralogist*, 95(1), 185-187. <https://doi.org/10.2138/am.2010.3371>
- Winter, J. D. (2014). *Principles of igneous and metamorphic petrology*. Pearson education Harlow, UK.
- Wisniowski, L., Pedrosa-Soares, A., Medeiros-Junior, E., Belém, J., Dussin, I., & Queiroga, G. (2021). Ultra-high temperature, mid-crustal level, contact metamorphism imprinted on granulite facies paragneisses by a norite intrusion (São Gabriel da Baunilha, Araçuaí orogen, southeast Brazil). *Journal of Metamorphic Geology*, 39(7), 867-895. <https://doi.org/10.1111/jmg.12594>
- Xiang, H., & Connolly, J. A. D. (2021). GeoPS: An interactive visual computing tool for thermodynamic modelling of phase equilibria. *Journal of Metamorphic Geology*, 40(2), 243-255. <https://doi.org/10.1111/jmg.12626>
- Zhang, X.-Z., Wang, Q., Dong, Y.-S., Zhang, C., Li, Q.-Y., Xia, X.-P., & Xu, W. (2017). High-Pressure Granulite Facies Overprinting During the Exhumation of Eclogites in the Bangong-Nujiang Suture Zone, Central Tibet: Link to Flat-Slab Subduction. *Tectonics*, 36(12), 2918-2935. <https://doi.org/10.1002/2017TC004774>

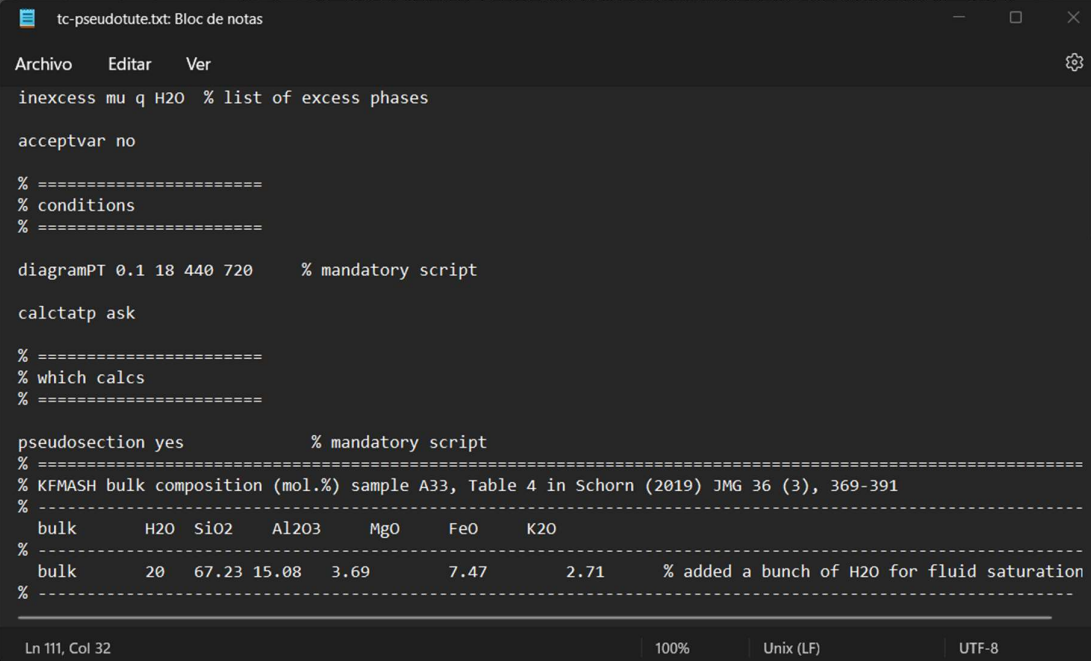
# ANEXOS

## ANEXO I

### GUÍAS RÁPIDAS

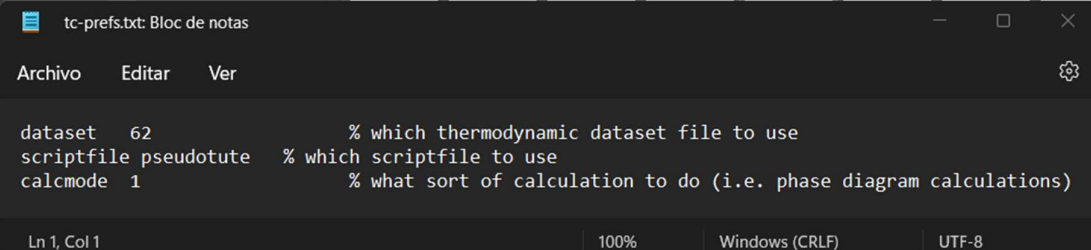
#### THERMOCALC

1. Editar el archivo de lectura introduciendo que base de datos se va a utilizar, el tipo de diagrama, en este caso P-T con sus respectivos rangos de cálculo para cada eje y activar la opción de pseudosección. Anadir algunas fases que probablemente ocurran en el diagrama incluyendo aquellas fases que estén en exceso.



```
tc-pseudotute.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
inexcess mu q H2O % list of excess phases
acceptvar no
% =====
% conditions
% =====
diagramPT 0.1 18 440 720 % mandatory script
calctatp ask
% =====
% which calcs
% =====
pseudosection yes % mandatory script
% =====
% KFMASH bulk composition (mol.%) sample A33, Table 4 in Schorn (2019) JMG 36 (3), 369-391
% -----
% bulk      H2O  SiO2  Al2O3  MgO   FeO   K2O
% -----
% bulk      20   67.23 15.08  3.69   7.47  2.71 % added a bunch of H2O for fluid saturation
% -----
Ln 111, Col 32 100% Unix (LF) UTF-8
```

2. Especificar en el archivo de preferencia que base de datos termodinámica se van a usar, cual es el archivo de lectura y el modo de cálculo (“calcmode 1” para pseudosecciones).



```
tc-prefs.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
dataset 62 % which thermodynamic dataset file to use
scriptfile pseudotute % which scriptfile to use
calcmode 1 % what sort of calculation to do (i.e. phase diagram calculations)
Ln 1, Col 1 100% Windows (CRLF) UTF-8
```





```

tc-pseudotute-dr.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
% -----
u<k>  g mu bi st chl q H2O  univariant

begin  end

5.300 532.82
      % 30g + 46mu + 17chl = 46bi + 10st + 69q + 48H2O
5.400 535.31
      % 30g + 46mu + 17chl = 46bi + 10st + 69q + 49H2O
5.500 537.78
      % 30g + 46mu + 17chl = 46bi + 10st + 69q + 49H2O
5.600 540.22
      % 30g + 47mu + 18chl = 47bi + 10st + 70q + 50H2O
5.700 542.62
      % 29g + 47mu + 18chl = 47bi + 10st + 70q + 51H2O
5.800 544.99
      % 29g + 47mu + 18chl = 47bi + 10st + 71q + 52H2O
5.900 547.34
      % 29g + 47mu + 18chl = 47bi + 10st + 71q + 52H2O
6.000 549.65
      % 29g + 48mu + 18chl = 48bi + 10st + 72q + 53H2O
6.100 551.94
      % 29g + 48mu + 18chl = 48bi + 10st + 72q + 54H2O
6.200 554.19
      % 29g + 48mu + 19chl = 48bi + 10st + 72q + 54H2O

Ln 25, Col 1 | 100% | Windows (CRLF) | UTF-8

```

```

tc-pseudotute-dr.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
15.000 671.03
      % 13g + 62mu + 34chl = 62bi + 10st + 84q + 116H2O

% -----
i<k>  mu st chl q H2O  - g bi

7.101 573.18 % g = 0, bi = 0

Ln 25, Col 1 | 100% | Windows (CRLF) | UTF-8

```

5. Se debe repetir el proceso encontrando todas las curvas univariantes, es decir las líneas de reacción y los puntos invariantes.

6. Copiar los valores de los cálculos del archivo de salida “tc-nombre\_del\_proyecto-dr” en el archivo “dr-project.txt” y especificar el inicio y fin de las curvas univariantes mediante los puntos invariantes de acuerdo a cada reacción.

```
dr-pseudosection.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
% -----
% points
% -----
i(als)  g cd mu sill and ky q H2O  invariant
4.307 536.19
% -----
i[bi,st]  g mu ky q H2O  - bi st
10.557 671.01  % bi = 0, st = 0
% -----
i[bi,ky]  g mu st q H2O  - bi ky
9.888 675.08  % bi = 0, ky = 0
% -----
i[sill,ky]  g mu bi st sill ky q H2O  invariant
7.464 687.84
Ln 1, Col 1  100%  Windows (CRLF)  ANSI
```

```
dr-pseudosection.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver
% lines
% -----
u[ky]   g cd mu sill and q H2O   univariant
i(als)  i[sill,and]  dashed
          % and = sill
5.4045  450.00
          % and = sill
5.2718  460.00
          % and = sill
5.1407  470.00
          % and = sill
5.0109  480.00
          % and = sill
4.8826  490.00
          % and = sill
4.7556  500.00
          % and = sill
4.6299  510.00
Ln 1, Col 1 | 100% | Windows (CRLF) | ANSI
```

7. Finalmente, ejecutar drawpd para obtener de manera gráfica la pseudosección previamente calculada.

```
C:\Users\Ismael\OneDrive - E...
drawpd 1.18 (Free Pascal version)
"dr-project" unrecognised
suffix to name for datafile : dr-project
```

**Manual referencial:**

Schorn, S. (2021). *Introduction to phase diagram calculations in KFMASH – tutorial III.* [https://hpxeosandthermocalc.files.wordpress.com/2021/10/3\\_kfmash\\_pt\\_pseudosection.zip](https://hpxeosandthermocalc.files.wordpress.com/2021/10/3_kfmash_pt_pseudosection.zip)

## Theriak-Domino

1. Editar el archivo de lectura de datos “therin.txt” eligiendo el modo de cálculo y especificando la composición en moles de cada elemento químico analizado en la muestra.

```
therin.txt: Bloc de notas
Archivo  Editar  Ver

! The first significant line should contain the external conditions as follows.
!
!   temperature(deg C)  pressure(bar)  optionally-[PGAS]-ratio
!   where
!       [PGAS]-ratio = (fluid pressure)/(total pressure)
!
! The second and further significant lines contain the bulk composition have the following form.
!
!   print-code  bulk-formula  use-code  optional_comment
!
!   where
!       print-code should start at position 1 and may take the following values.
!       < -1:  print information about selected or rejected phases from the database.
!             NO EQUILIBRIUM CALCULATED.
!       =-1:  print composition, considered phases and solution models.
!             NO EQUILIBRIUM CALCULATED.
!       = 0:  short output (stable assemblage)
!       = 1:  long output (composition, considered phases, solution models, stable
!             assemblage, activities of all phases
!
!       bulk-formula is the element bulk composition written as follows.
!       ELEMENT1(Amount1)ELEMENT2(Amount2).....
!       A ? for the oxygen amount instructs the program to assign exactly
!       the stoichiometric oxygene atoms to the other elements.
!
!       use-code controls which phases are read from the database. Usually this is "*"
!       for all phases matching the chemical system defined by bulk-formula.
!
!       optional comment
!
! -----> dont' forget: at least two blanks between items!!! <-----
!
! For the most typical case, only one chemical input line is needed. The following lines are
! ignored. For calculation of binary or ternary diagrams however, two or three additionalchemical
! input lines are needed that define the the system« endmember compositions.
! -----
!       500      10000
! 0 K(3.714)FE(6.98)MG(6.149)AL(19.851)SI(75.088)H(50)O(?) O(0) * 0% Fet as Fe3+

Ln 41, Col 84      100%      Unix (LF)      ANSI
```

2. Iniciar Theriak-Domino mediante “start.bat” y ejecutar el módulo “Domino” elegir la base de datos termodinámica a usar, rangos de P-T con sus respectivos intervalos y modo de cálculo; esto generara una serie de archivos con los datos necesarios para graficar la pseudosección.

```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe - Domino
(i) PLEASE NOTE !
(i)
(i) Input may be a (case sensitive) keyword, a file name or just striking a key.
(i)
(i) Valid keywords are enclosed in " ". They may need additional input parameters.
(i) Alternative keywords are given in [ ] and are separated by |.
(i) CR is the "Carriage Return" or "Enter" key.
(i) Input of last run is given within < >.
(i) Where indicated, enter "?" for help !
(i)
(i) If you don't need this information any more, edit file 'theriak.ini'
(i) and set $GHELP= to value 0.
(i)

-----
initialization
-----
Initialization-file: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\theriak.ini
Program's directory: C:\TheriakDomino\IN\Programs\
Working directory: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\

Run: 09.08.2022 - 09:05:30

-----
database definition
-----
Enter [ "?" | CR | "files" | "script" | database filename ] <td-ds62-mp50-05.txt>?
```

3. Una vez finalizado el c culo de la pseudosecci n en la misma ventana de comandos se ejecuta el m dulo "Guzzler" en el que se especifican los ajustes necesarios para el procesado gr fico de los datos en bruto.

```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe - Guzzler
C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs>Guzzler

Program (THERIDOM): C:\TheriakDomino\IN\Programs\
path for program: C:\TheriakDomino\IN\Programs\

Working directory: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\

Program GUZZLER, Version (dd.mm.yy) 11.03.2020 (Windows, gfortran)
=====
"Labeling reactions in graphics files"
Written by:
  Christian de Capitani (Basel, Switzerland)
  E-mail: christian.decapitani@unibas.ch

Input dialogue and help by:
  Konstantin Petrakakis (Vienna, Austria)
  E-mail: konstantin.petrakakis@univie.ac.at

=====
RUN: 09.08.2022 - 09:07:13

try working directory: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\guzzler.last
log-file used: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Polit cnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\guzzler.last
Enter [ "?" | CR | graphics file name ] <Domplt.txt>?
```

4. Finalmente, el m dulo "Exploit" lee los datos generados por "Guzzler" y genera la pseudosecci n de manera gr fica.

```
C:\WINDOWS\system32\cmd.exe - exploit
C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Politécnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs>exploit
Program (THERDOM): C:\TheriakDominoWIN\Programs\
path for program: C:\TheriakDominoWIN\Programs\
Working directory: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Politécnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\
Program EXPLOT, Version (dd.mm.yy) 11.03.2020 (Windows, gfortran)
=====
"Create a PostScript(TM) file from graphics input"
Written by:
  Christian de Capitani (Basel, Switzerland)
  E-mail: christian.decapitani@unibas.ch
Input dialogue and help by:
  Konstantin Petrakakis (Vienna, Austria)
  E-mail: konstantin.petrakakis@univie.ac.at
=====
Run: 09.08.2022 - 09:08:07
log-file used: C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Politécnica Nacional\Titulacion\Theriak-Domino\Programs\exploit.last
Enter [ "?" | CR | graphics file name ] <clean>?
```

**Manuales referenciales:**

Christian de Capitani & Konstantin Petrakakis. (2020). *Commented run of DOMINO*. <https://titan.minpet.unibas.ch/minpet/theriak/prog11032020/TheriakDominoWIN/Documentacion.zip>

## Perple\_X

1. Especificar el nombre del proyecto junto con la base de datos termodinámica a usar, seguido de los datos composicionales, rango P-T y modelos minerales en el módulo BUILD.

```
C:\Users\Ismael\Desktop\Perple_X_6.9.1\build.exe

Perple_X version 6.9.1, source updated February 7, 2022.

Copyright (C) 1986-2022 James A D Connolly <www.perplex.ethz.ch/copyright.html>.

NO is the default (blank) answer to all Y/N prompts

Enter a name for this project (the name will be used as the
root for all output file names) [default = my_project]:

The problem definition file will be named: my_project.dat

Enter thermodynamic data file name [default = hp02ver.dat]:

Enter the computational option file name [default = perplex_option.dat]:
See: www.perplex.ethz.ch/perplex_options.html

Reading Perple_X options from: perplex_option.dat

The current data base components are:
NA2O  MgO  AL2O3  SiO2  K2O  CaO  TiO2  MnO  FeO  NiO  ZrO2  Cl2
O2    H2O  CO2
Transform them (Y/N)?
```

2. Iniciar el módulo VERTEX con el nombre del proyecto para que realice todos los cálculos de minimización.

```
C:\Users\Ismael\OneDrive - Escuela Politécnica Nacional\Titulacion\Perple_X\vertex.exe

Perple_X version 6.9.1, source updated June 20, 2022.

Copyright (C) 1986-2022 James A D Connolly <www.perplex.ethz.ch/copyright.html>.

Enter the project name (the name assigned in BUILD) [default = my_project]:
metapelita

Reading problem definition from file: metapelita.dat
Reading thermodynamic data from file: hp62ver.dat
Writing print output to file: metapelita.plt
Writing plot output to file: metapelita.plt
Writing phase assemblage data to file: metapelita.blk
Reading solution models from file: solution_model.dat

Reading Perple_X options from: perplex_option.dat
Writing auto refine summary to: not requested
Writing seismic data options to: metapelita_seismic_data.txt
Writing pseudocompound glossary to: metapelita_pseudocompound_glossary.txt
Writing Perple_X option summary to: metapelita_VERTEX_options.txt

Perple_X computational option settings for VERTEX:

  Keyword:          Value:      Permitted values [default]:

Auto-refine options:

auto_refine         aut        [auto] manual off
replicate_threshold 0.1E-3     [1e-2]; static opt; <0 => no replica test
rep_dynamic_threshold 0.1E-3     [1d-3]; dynamic opt; <0 => no replica test
```



3. Finalmente, se ejecuta el módulo PSSECT para graficar los datos obtenidos en VERTEX.

```
C:\Users\ismael\OneDrive - Escuela Politécnica Nacional\Titulacion\Perple_X\pssect.exe
Perple_X version 6.9.1, source updated June 20, 2022.
Copyright (C) 1986-2022 James A D Connolly <www.perplex.ethz.ch/copyright.html>.
Enter the project name (the name assigned in BUILD) [default = my_project]:
metapelita
Reading Perple_X options from: perplex_option.dat
-----
Perple_X plot options are currently set as:

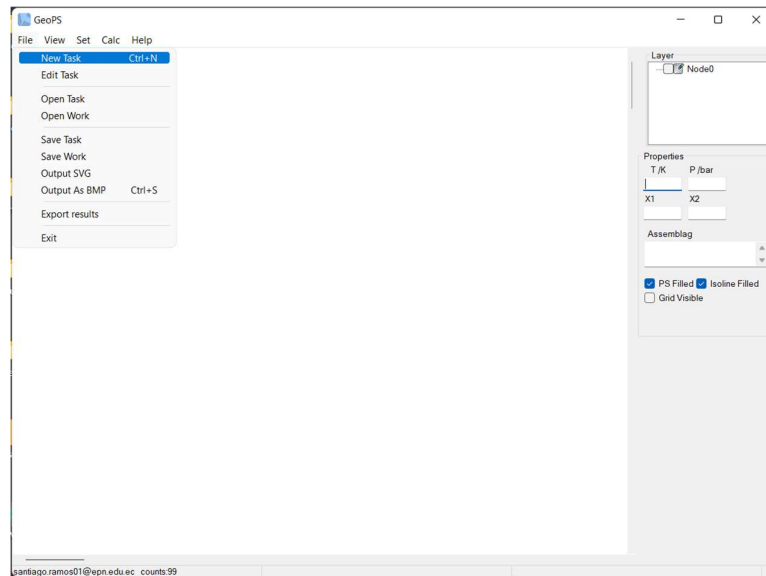
Keyword:          Value:      Permitted values [default]:
axis_label_scale  1.20      [1.2] (rel)
bounding_box :
                 0          [0] x-min (pts)
                 0          [0] y-min (pts)
                 595       [800] x-length (pts)
                 842       [800] y-length (pts)
field_fill        T          [T] F
field_label       T          [T] F
numeric_field_label T        [F] T, if T PSSECT writes list to *_assemblages.txt
replicate_label   0.250     0->1 [0.025]
field_label_scale 0.75      [0.72] (rel)
font              Helvetica
grid              F          [F] T
half_ticks        T          [T] F
line_width        1.00      0-99 [1.] (pts)
picture_transformation :
                 0.180     [0.18] x-scale (rel)
                 0.180     [0.18] y-scale (rel)
                 130.      [0.18] x-translation (pts)
                 220.      [0.18] y-translation (pts)
                 0.00      [0.0] rotation (deg)
plot_aspect_ratio 1.000     [1.0] x_axis_length/y_axis_length
splines           T          [T] F
tenth_ticks       F          [F] T
text_scale        1.000     [1.] (rel)
plot_extra_data
```

**Manuales referenciales:**

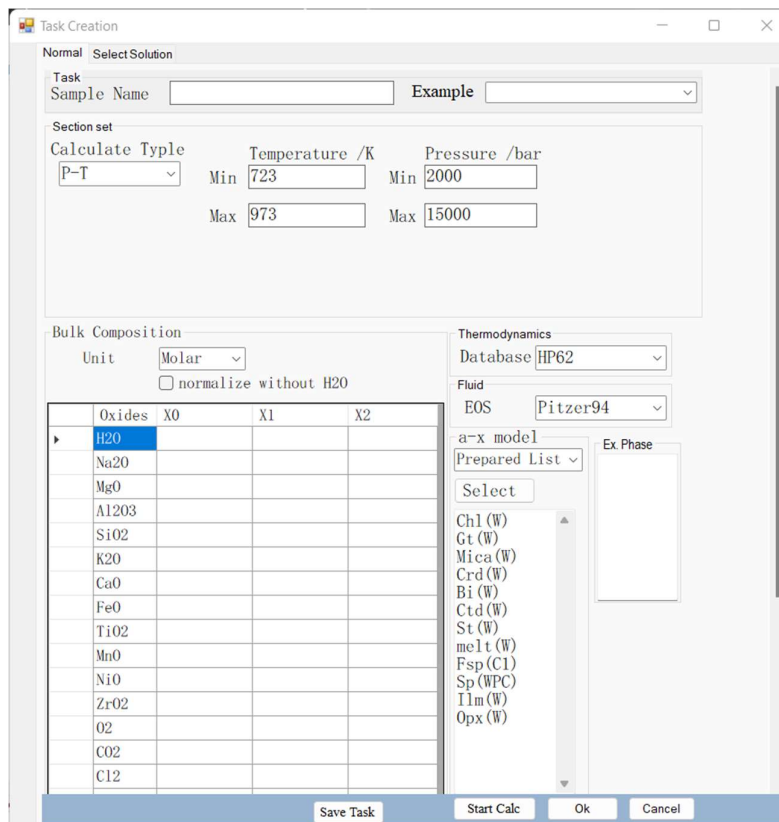
Castelli, D., & Groppo, C. (2022). *Perple\_X Tutorials*. [https://www.perplex.ethz.ch/perplex/tutorial/Castelli\\_Groppo\\_Torino\\_Tutorial/Castelli\\_Groppo\\_Torino\\_Perple\\_X\\_691\\_Tutorial.pdf](https://www.perplex.ethz.ch/perplex/tutorial/Castelli_Groppo_Torino_Tutorial/Castelli_Groppo_Torino_Perple_X_691_Tutorial.pdf)

# GeoPS

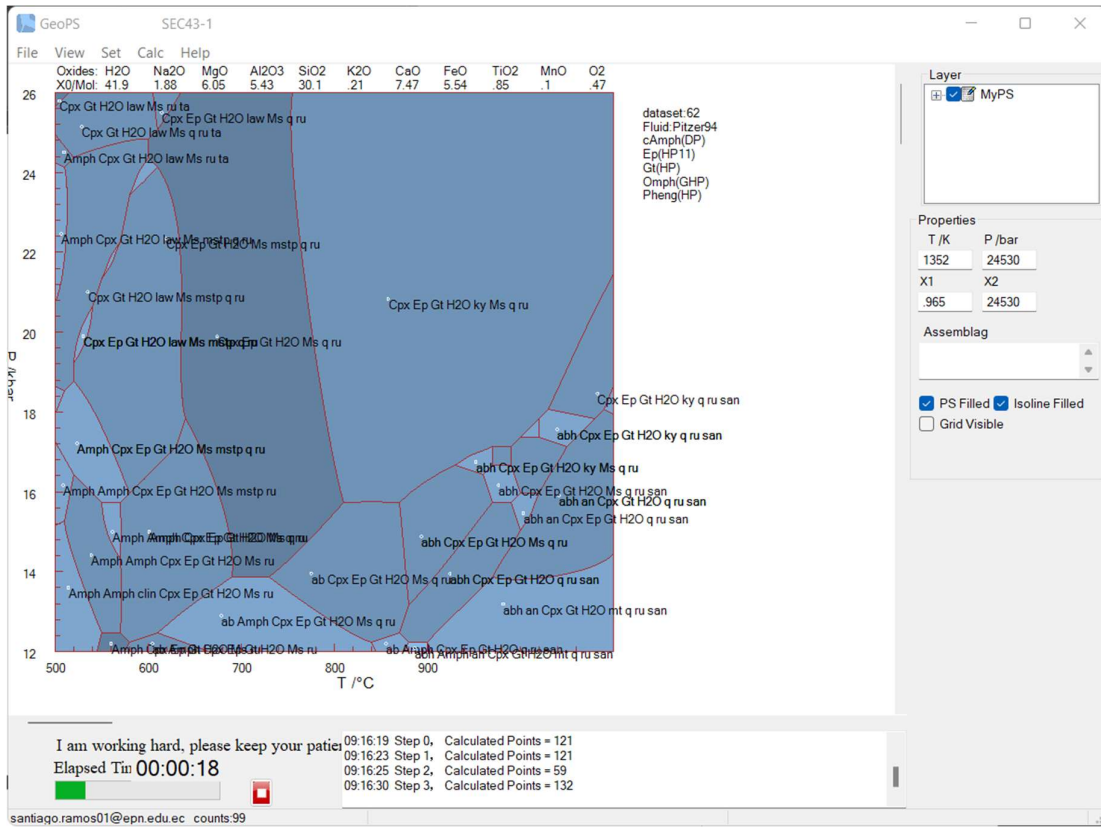
1. Ejecutar GeoPS, luego seleccionar archivo y nueva tarea.



2. En la ventana creación de tarea se define el nombre de la muestra, tipo de cálculo, rango de P-T, composición de roca total, base de datos termodinámica, ecuación de estado del fluido y modelos minerales.



- Elegir comenzar cálculo y la pseudosección se generará de manera grafica en la ventana principal del programa.



**Manual referencial:**

Christian de Capitani & Konstantin Petrakakis. (2020). *Commented run of DOMINO*.  
<https://titan.minpet.unibas.ch/minpet/theriak/prog11032020/TheriakDominoWIN/Documentati on.zip>

## ANEXO II

### Abreviaciones minerales según Whitney & Evans (2010)

TABLE 1. Updated list of abbreviations			Symbol	Mineral Name	IMA status*	Symbol	Mineral Name	IMA status*
Symbol	Mineral Name	IMA status*						
Acm	acmite	D	Chu	clinohumite	G	Ged	gedrite	Rd
Act	actinolite	A	Cpt	clinoptilolite	A	Gh	gehlenite	G
Adl	adularia	I	Cpx	clinopyroxene	GROUP	Gk	geikielite	G
Aeg	aegirine	A	Czo	clinozoisite	G	Gbs	gibbsite	A
Ak	åkermanite	G	Cln	clintonite	A	Gis	gismondine	A
Ab	albite	G	Coe	coesite	A	Glt	glauconite	GROUP
Afs	alkali feldspar	GROUP	Coh	cohenite	G	Gln	glaucophane	Rd
Aln	allanite	A	Crd	cordierite	G	Gme	gmelinite	A
Alm	almandine	G	Crr	corrensite	G	Gth	goethite	A
Als	aluminosilicate (Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub> polymorphs)	GROUP	Crn	corundum	G	Gdd	grandierite	G
Alu	alunite	Rd	Cv	covellite	G	Gr	graphite	G
Amk	amakinite	Rd	Crs	crystalite	G	Gre	greenalite	G
Ame	amesite	G	Crt	crossite	D	Grs	grossular	A
Amp	amphibole	GROUP	Crl	cryolite	G	Gru	grunerite	Rd
Anl	analcime (analcite)	A	Cbn	cubanite	G	Gp	gypsum	G
Ant	anatase	A	Cum	cumingtonite	Rd			
And	andalusite	G	Cpr	cuprite	G	HI	halite	G
Adr	andradite	G	Csp	cuspidine	G	Hrm	harmotome	A
Ang	anglesite	G				Hst	hastingsite	Rd
Anh	anhydrite	G	Dph	daphnite	not listed	Hsm	hausmannite	G
Ank	ankerite	G	Dat	datolite	G	Hyn	haüyne	G
Ann	annite	A	Dbr	daubreelite	G	Hzl	heazlewoodite	G
An	anorthite	G	Dee	deerite	A	Hd	hedenbergite	A
Ano	anorthoclase	I	Dia	diamond	G	Hem	hematite	A
Ath	anthophyllite	Rd	Dsp	diaspore	G	Hc	hercynite	G
Atg	antigorite	Rn	Dck	dickite	G	Hul	heulandite	A
Ap	apatite	GROUP	Dg	digenite	A	Hbn	hibonite	G
Apo	apophyllite	GROUP	Di	diopside	A	Hbs	hibschite	Rn
Arg	aragonite	G	Dpt	diopase	G	Hgb	högbomite	D
Arf	arfvedsonite	A	Dol	dolomite	G	Hol	hollandite	G
Arm	armalcolite	Rd	Drv	dravite	G	Hlm	holmquistite	Rd
Apy	arsenopyrite	A	Dum	dumortierite	G	Hbl	hornblende	GROUP
Aug	augite	A				Hw	howieite	A
Awr	awaruite	G	Eas	eastonite	Rd	Hu	humite	G
Ax	axinite	GROUP	Ec	ecandrewsite	A	Hgr	hydrogrossular	GROUP
			Eck	eckermannite	A	Hyp	hypersthene	D
			Ed	edenite	A			
			Elb	elbaite	G	Ill	illite	GROUP
Bab	babingtonite	G	Ell	ellenbergerite	A	Ilm	ilmenite	G
Bdy	baddeleyite	G	Eng	enargite	G	Ilv	ilvaite	G
Brt	barite (baryte)	A	En	enstatite (ortho-)	A			
Brs	barrosite	Rd	Ep	epidote	GROUP	Jd	jadeite	A
Bei	beidellite	G	Eri	erionite	A	Jrs	jarosite	Rd
Brl	beryl	G	Esk	eskolaite	G	Jim	jimthompsonite	A
Bt	biotite	GROUP	Ess	esseneite	A	Jhn	johannsenite	A
Bxb	bixbyite	G	Eud	eudialite	A			
Bhm	böhmite (boehmite)	G				Krs	kaersutite	Rd
Bn	bornite	A	Fas	fassaite	D	Kls	kalsilite	G
Brk	brookite	G	Fa	fayalite	G	Kam	kamacite (α-FeNi)	D
Brc	brucite	G	Fsp	feldspar	GROUP	Kln	kaolinite	A
Bst	bustamite	G	Fac	ferro-actinolite	Rd	Ktp	katophorite	Rd
			Fath	ferro-anthophyllite	Rd	Kfs	K-feldspar	informal
Cal	calcite	G	Fbrs	ferrobarrosite	A	Khl	K-hollandite	H
Ccn	cancrinite	G	Fcar	ferrocarpholite	A	Kir	kirschsteinite	G
Cnl	cannilloite	H	Fcel	ferroceladonite	A	Krn	kornepurine	G
Cb	carbonate mineral	GROUP	Fec	ferro-eckermannite	Rd	Kos	kosmochlor	A
Car	carpholite	G	Fed	ferro-edenite	Rd	Kut	kutnohorite (kutnahorite)	G
Cst	cassiterite	G	Fgd	ferrogedrite	Rd	Ky	kyanite	A
Cel	celadonite	A	Fgl	ferroglaucophane	Rd			
Clt	celestine	A	Fkrs	ferrokaersutite	A	Lrn	larnite	G
ClS	celsian	G	Fny	ferronyboite	H	Lmt	laumontite	A
Cer	cerussite	G	Fprg	ferropargasite	Rd	Lws	lawsonite	G
Cbz	chabazite	A	Frct	ferrichterite	A	Lzl	lazulite	A
Cct	chalcocite	G	Fs	ferrosilite	Rn	Lzr	lazurite	G
Ccp	chalcopyrite	G	Fts	ferrotschermakite	Rd	Lpd	lepidolite	GROUP
Chm	chamosite	G	Fwn	ferrowinchite	Rd	Lct	leucite	G
Chs	chesterite	A	Fi	fibrolite (fibrous sillimanite)	informal	Lm	limonite	not listed
Chl	chlorite	GROUP	Fl	fluorite	G	Liq	liquid	
Cld	chloritoid	G	Fo	forsterite	G	Lz	lizardite	G
Chn	chondrodite	G	Fos	foshagite	G	Lo	löllingite (loellingite)	G
Chr	chromite	G	Frk	franklinite	G			
Ccl	chrysocolla	A	Ful	fullerite	N	Mgh	maghemite	G
Ctl	chrysotile	Rd				Marf	magnesio-arfvedsonite	Rd
Cin	cinnabar	G	Ghn	gahnite	G	Mcar	magnesio-carpholite	A
Cam	clinoamphibole	GROUP	Glx	galaxite	G	Mfr	magnesioferrite	G
Clc	clinocllore	G	Gn	galena	G	Mhs	magnesiohastingsite	Rd
Cen	clinoenstatite	A	Grt	garnet	GROUP	Mhb	magnesiohornblende	Rd
Cfs	clinoferrosilite	A				Mkt	magnesiokatophorite	Rd

WHITNEY AND EVANS: MINERAL ABBREVIATIONS

Symbol	Mineral Name	IMA status*	Symbol	Mineral Name	IMA status*	Symbol	Mineral Name	IMA status*
Mrbk	magnesianriebeckite	Rd	Pgt	pigeonite	A	Tae	taenite (γ-Fe, Ni)	G
Msdg	magnesioidanagite	Rd	Pl	plagioclase	GROUP	Tlc	talca	G
Mst	magnesiostaurilite	A	Prh	prehnite	G	Trm	taramite	Rd
Mtm	magnesiostaurilite	Rn	Prm	prismaticite	Rd	Tnt	tennantite	G
Mws	magnesiowustite	not listed	Psb	pseudobrookite	Rd	Tnr	tenorite	A
Mgs	magnesite	A	Pmp	pumpellyite-(Al)	A	Tep	tephroite	G
Mag	magnetite	G	Py	pyrite	G	Ttr	tetrahedrite	A
Maj	majorite	A	Pcl	pyrochlore	A	Thm	thomsonite	A
Mlc	malachite	G	Prp	pyrope	G	Thr	thorite	G
Mng	manganosite	G	Pph	pyrophanite	G	Tly	tilleyite	G
Mrc	marcasite	G	Prl	pyrophyllite	G	Ttn	titanite (sphene)	A
Mrg	margarite	A	Pxf	pyroxferroite	A	Tpz	topaz	G
Mar	marialite	G	Pxm	pyroxmangite	G	Tur	tourmaline	GROUP
Mei	meionite	G	Po	pyrrhotite	G	Tr	tremolite	Rd
Mll	melilite	GROUP	Qnd	qandilite	A	Trd	tridymite	G
Mw	merwinite	G	Qz	quartz	A	Tro	troilite	G
Mes	mesolite	A	Rnk	rankinite	G	Ts	tschermakite	Rd
Mc	microcline	G	Rlg	realgar	G	Usp	ulvöspinel	G
Mlr	millerite	G	Rds	rhodochrosite	A	Urn	uraninite	G
Mns	minnesotaite	G	Rdn	rhodonite	A	Uv	uvarovite	A
Mog	moganite	A	Rct	richterite	A	Vtr	vaterite	A
Mol	molybdenite	G	Rbk	riebeckite	Rd	Vrm	vermiculite	G
Mnz	monazite	A	Rwd	ringwoodite	A	Ves	vesuvianite	A
Mtc	monticellite	G	Rdr	roedderite	A	Wds	wadsleyite	A
Mnt	montmorillonite	G	Rsm	rossmanite	A	Wag	wagnerite	Rd
Mor	mordenite	A	Rt	rutile	G	Wrk	wairakite	A
Mul	mullite	G	Sdg	sadanagaite	Rd	Wav	wavellite	A
Ms	muscovite	A	Sa	sanidine	G	Wht	whitlockite	G
Ntr	natrolite	A	Sap	saponite	G	Wlm	willmenite	G
Nph	nepheline	G	Spr	sapphirine	G	Wnc	winchite	Rd
Nrb	norbergite	G	Scp	scapolite	GROUP	Wth	witherite	G
Nsn	nosean	G	Sch	scheelite	G	Wo	wollastonite	A
Nyb	nyböite	Rd	Srl	schorl	G	Wur	wurtzite	G
Oi	olivine	GROUP	Scb	schreibersite	G	Wus	wüstite	G
Omp	omphacite	A	Sep	sepiolite	G	Xtm	xenotime	A
Opl	opal	G	Ser	sericite	D	Xon	xonotlite	G
Opq	opaque mineral	informal	Srp	serpentine	GROUP	Yug	yugawaralite	A
Orp	orpiment	G	Scd	siderite	G	Zeo	zeolite	GROUP
Oam	orthoamphibole	GROUP	Sil	sillimanite	G	Znw	zinnwaldite	GROUP
Or	orthoclase	A	Sme	smectite	GROUP	Zrn	zircon	G
Oen	orthoestatite	D	Sdl	sodalite	G	Zo	zoisite	G
Opx	orthopyroxene	GROUP	Sps	spessartine	A			
Osm	osumilite	G	Sp	sphalerite	A			
Plg	palygorskite	G	Spn	sphene (titanite)	D			
Pg	paragonite	A	Spl	spinel	G			
Prg	pargasite	Rd	Spd	spodumene	A			
Pct	pectolite	G	Spu	spurrite	G			
Pn	pentlandite	G	St	staurilite	G			
Per	periclase	G	Stv	stevensite	Q			
Prv	perovskite	G	Stb	stilbite	A			
Ptl	petalite	G	Stp	stilpnomelane	A			
PhA	phase A	not listed	Sti	stishovite	A			
Ph	phengite	G	Str	strontianite	G			
Php	phillipsite	A	Sud	sudowite	Rd			
Phl	phlogopite	A	Syl	sylvite	G			
Pmt	piemontite	A						

\* International Mineralogical Association (IMA) abbreviations: A = Approved; D = Discredited; G = Grandfathered (generally regarded as valid mineral name); GROUP = Name designates a group of mineral species; H = hypothetical (e.g., synthetic); I = intermediate in a solid-solution series; Q = questionable; Rd = Redefinition approved by IMA Commission on New Minerals, Nomenclature and Classification (CNMNC); Rn = Renamed with approval of the CNMNC.

Ab\* high-temperature albite

# ANEXO III

## Abreviaciones minerales según Holland & Powell (2011)

T. J. B. HOLLAND & R. POWELL

Group	Abbreviation	End-member	Formula	
Garnets & olivines	alm	almandine	Fe <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub>	
	andr	andradite	Ca <sub>3</sub> Fe <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub>	
	gr	grossular	Ca <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub>	
	knor •	knorringite	Mg <sub>3</sub> Cr <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>12</sub>	
	maj •	majorite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>12</sub>	
	py	pyrope	Mg <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>12</sub>	
	spss	spessartine	Mn <sub>3</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>12</sub>	
	chum	chionomite	Mg <sub>3</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	fa	fayalite	Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	fo	forsterite	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	lrm	larriite	Ca <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	mont	monticellite	CaMgSiO <sub>4</sub>	
	teph	tephroite	Mn <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	and	andalusite	Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub>	
	Aluminosilicates	ky	kyanite	Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub>
sill		sillimanite	Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub>	
amul •		Al-mullite	Al <sub>2</sub> Si <sub>0.5</sub> O <sub>4.75</sub>	
smul •		Si-mullite	Al <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub>	
fcld		Fe-chloritoid	FeAl <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub> (OH) <sub>2</sub>	
mcld		Mg-chloritoid	MgAl <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub> (OH) <sub>2</sub>	
mncld		Mn-chloritoid	MnAl <sub>2</sub> SiO <sub>5</sub> (OH) <sub>2</sub>	
fst		Fe-staurolite	Fe <sub>4</sub> Al <sub>18</sub> Si <sub>7.5</sub> O <sub>44</sub> (OH) <sub>4</sub>	
mst		Mg-staurolite	Mg <sub>4</sub> Al <sub>18</sub> Si <sub>7.5</sub> O <sub>44</sub> (OH) <sub>4</sub>	
mnst		Mn-staurolite	Mn <sub>4</sub> Al <sub>18</sub> Si <sub>7.5</sub> O <sub>44</sub> (OH) <sub>4</sub>	
tpz		hydroxy-topaz	Al <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> (OH) <sub>2</sub>	
Other orthosilicates		ak	akermanite	Ca <sub>3</sub> MgSi <sub>4</sub> O <sub>7</sub>
		geh	gehlenite	Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> SiO <sub>7</sub>
		jgd •	julgoldite (FeAl)	Ca <sub>4</sub> Fe <sub>6</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>21</sub> (OH) <sub>7</sub>
		merw	merwinite	Ca <sub>3</sub> MgSi <sub>4</sub> O <sub>7</sub>
	mpm	pumpellyite (MgAl)	Ca <sub>4</sub> MgAl <sub>3</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>21</sub> (OH) <sub>7</sub>	
	fpm	pumpellyite (FeAl)	Ca <sub>4</sub> FeAl <sub>3</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>21</sub> (OH) <sub>7</sub>	
	rnk	rankinite	Ca <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	
	sph	sphene	CaTiSiO <sub>5</sub>	
	spu	spurrite	Ca <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> CO <sub>11</sub>	
	ty	tilleyite	Ca <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> CO <sub>13</sub>	
	zrc	zircon	ZrSiO <sub>4</sub>	
	Sorosilicates	cz	clinozoisite	Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>12</sub> (OH)
		ep	epidote (ordered)	Ca <sub>2</sub> FeAl <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>12</sub> (OH)
		fep	Fe-epidote	Ca <sub>2</sub> Fe <sub>2</sub> AlSi <sub>6</sub> O <sub>12</sub> (OH)
		law	lawsonite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (OH) <sub>4</sub>
pmt •		piemontite (ordered)	Ca <sub>2</sub> MnAl <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>12</sub> (OH)	
zo		zoisite	Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>12</sub> (OH)	
Cyclosilicates	vsv	vesuvianite	Ca <sub>19</sub> Mg <sub>2</sub> Al <sub>11</sub> Si <sub>16</sub> O <sub>69</sub> (OH) <sub>9</sub>	
	crd	cordierite	Mg <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>18</sub>	
	herd	hydrous-cordierite	Mg <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>17</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	ferd	Fe-cordierite	Fe <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>18</sub>	
	mncrd	Mn-cordierite	Mn <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>18</sub>	
	osm1	osumilite (1)	KMg <sub>2</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>10</sub> O <sub>30</sub>	
High- <i>T</i> phases	osm2	osumilite (2)	KMg <sub>3</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>11</sub> O <sub>30</sub>	
	fosm	Fe-osumilite	KFe <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>10</sub> O <sub>30</sub>	
	apv •	Al-perovskite	AlAlO <sub>3</sub>	
	cpv •	Ca-perovskite	CaSiO <sub>3</sub>	
	ctsn •	CaSi-titanite	CaSi <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	
	fak •	Fe-akimotoite	FeSiO <sub>3</sub>	
	fpv •	Fe-perovskite	FeSiO <sub>3</sub>	
	frw •	Fe-ringwoodite	Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	fwl •	Fe-wadsleyite	Fe <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	mak •	akimotoite	MgSiO <sub>3</sub>	
	mpv •	Mg-perovskite	MgSiO <sub>3</sub>	
	mrw •	Mg-ringwoodite	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	mwd •	Mg-wadsleyite	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	
	phA	phaseA	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (OH) <sub>6</sub>	
	Pyroxenes & pyroxenoids	acm	aemite	NaFeSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>
caes •		Ca-eskola pyroxene	Ca <sub>0.5</sub> AlSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
cats		Ca-tschermaks pyroxene	CaAl <sub>2</sub> SiO <sub>6</sub>	
cen •		clino enstatite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
di		diopside	CaMgSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
en		enstatite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
fs		ferrosilite	Fe <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
hed		hedenbergite	CaFeSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
hen •		Hi-P clinoenstatite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
jd		jadeite	NaAlSi <sub>3</sub> O <sub>6</sub>	
kos •		kosmochlor	Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
mgts		Mg-tschermaks pyroxene	MgAlSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
pren •		protoenstatite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
pswo		pseudowollastonite	CaSiO <sub>3</sub>	
pxmn		pyroxmangite	MnSiO <sub>3</sub>	

**Table 1.** The formulae and abbreviations of the end-members of the phases in the internally consistent data set. A bullet beside an abbreviated name indicates that it is a new end-member in the dataset.

TIHERMODYNAMIC DATASET FOR PHASES OF PETROLOGICAL INTEREST

Table 1. (Continued)

Group	Abbreviation	End-member	Formula	
Amphibole	rhod	rhodonite	MnSiO <sub>3</sub>	
	wal •	walstromite	CaSiO <sub>3</sub>	
	wo	wollastonite	CaSiO <sub>3</sub>	
	anth	anthophyllite	Mg <sub>7</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	cumm	cummingtonite	Mg <sub>7</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	fael	ferroactinolite	Ca <sub>13</sub> Fe <sub>3</sub> Si <sub>13</sub> O <sub>32</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	fanth	Fe-anthophyllite	Fe <sub>7</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	fgl	ferroglaucophane	Na <sub>2</sub> Fe <sub>3</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	gl	glaucophane	Na <sub>2</sub> Mg <sub>5</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	grun	gruncrite	Fe <sub>7</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	parg	pargasite	NaCa <sub>2</sub> Mg <sub>4</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	rieb	riebeckite	Na <sub>2</sub> Fe <sub>3</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	tr	tremolite	Ca <sub>2</sub> Mg <sub>5</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
Other chain silicates	ts	tschermakite	Ca <sub>2</sub> Mg <sub>3</sub> Al <sub>4</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>22</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	deer	deerite	Fe <sub>18</sub> Si <sub>12</sub> O <sub>46</sub> (OH) <sub>10</sub>	
	fcar	ferrocapholite	FeAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (OH) <sub>4</sub>	
	fspr	Fe-sapphirine (221)	Fe <sub>4</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>20</sub>	
	mear	magnesiocapholite	MgAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub> (OH) <sub>4</sub>	
	spr4	sapphirine (221)	Mg <sub>4</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>20</sub>	
	spr5	sapphirine (351)	Mg <sub>3</sub> Al <sub>10</sub> Si <sub>20</sub>	
	Micas	am	annite	KFe <sub>3</sub> AlSi <sub>7</sub> O <sub>16</sub> (OH) <sub>2</sub>
		cel	celadonite	KMgAlSi <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
		east	eastonite	KMg <sub>2</sub> Al <sub>3</sub> Si <sub>7</sub> O <sub>16</sub> (OH) <sub>2</sub>
fcel		ferroceladonite	KFeAlSi <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
ma		margarite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
mnbi		Mn-biotite	KMn <sub>2</sub> AlSi <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
mu		muscovite	KAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
naph		sodaphlogopite	NaMg <sub>2</sub> AlSi <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
pa		paragonite	NaAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
phl		phlogopite	KMg <sub>3</sub> AlSi <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
Chlorites		afchl	Al-free chlorite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>
		ames	amesite (14A)	Mg <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>
		clin	clinochlore (ordered)	Mg <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>
	daph	daphnite	Fe <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>	
	fsud	ferrosudoite	Fe <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>	
	mnchl	Mn-chlorite	Mn <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>	
	sud	sudoite	Mg <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>	
	Other sheet silicates	atg	antigorite	Mg <sub>24</sub> Si <sub>16</sub> O <sub>52</sub> (OH) <sub>2</sub>
chr		chrysotile	Mg <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (OH) <sub>4</sub>	
fprr •		ferri-prehnite	Ca <sub>2</sub> FeAlSi <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
fstp •		ferrostilpnomelane	K <sub>0.5</sub> Fe <sub>0.5</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>15</sub> (OH) <sub>13.5</sub>	
fla		ferrotalc	Fe <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
gl •		grecnalite	Fe <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
kao		kaolinite	Al <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (OH) <sub>4</sub>	
liz •		lizardite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>5</sub> (OH) <sub>4</sub>	
minn •		Mg-minnesotaite	Mg <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
minn •		minnesotaite	Fe <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
mstp •		Mg-stilpnomelane	K <sub>0.5</sub> Mg <sub>0.5</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>15</sub> (OH) <sub>13.5</sub>	
pre		prehnite	Ca <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
prl		pyrophyllite	Al <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
ta		talc	Mg <sub>3</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
tap •		prl-talc	Al <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
tals		tschermak-talc	Mg <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	
Feldspars & feldspathoid		abh	albite (high)	NaAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>
	albite	ab	NaAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	
	an	anorthite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	
	ani	analcite	NaAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	cg •	carnegieite (low)	NaAlSiO <sub>4</sub>	
	egh •	carnegieite (high)	NaAlSiO <sub>4</sub>	
	kcm •	K-cymrite	KAlSi <sub>3</sub> O <sub>7</sub> (OH) <sub>2</sub>	
	kls	kalsilite	KAlSiO <sub>4</sub>	
	lc	leucite	KAlSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
	mic	microcline	KAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	
	ne	nepheline	NaAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	
	san	sanidine	KAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	
	Silica minerals	coe	coesite	SiO <sub>2</sub>
		crst	crystalite (high)	SiO <sub>2</sub>
		q	quartz	SiO <sub>2</sub>
		stv	stishovite	SiO <sub>2</sub>
	Other framework silicates	trd	tridymite (high)	SiO <sub>2</sub>
heu		heulandite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>7</sub> O <sub>12</sub> (OH) <sub>12</sub>	
hol •		hollandite	KAlSi <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	
hmt		laumontite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>8</sub> (OH) <sub>8</sub>	
me		meionite	Ca <sub>4</sub> Al <sub>6</sub> Si <sub>6</sub> CO <sub>27</sub>	
sd •		sodalite	Na <sub>8</sub> Al <sub>6</sub> Si <sub>6</sub> O <sub>24</sub> Cl <sub>2</sub>	
silb		silbite	CaAl <sub>3</sub> Si <sub>3</sub> O <sub>11</sub> (OH) <sub>14</sub>	
wa •		Si-wadeite	K <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	
wrk		wairakite	CaAl <sub>2</sub> Si <sub>7</sub> O <sub>13</sub> (OH) <sub>14</sub>	