Metamorphe und strukturelle Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes, Baja California Sur, Mexiko

Dissertation an der Fakultät für Geowissenschaften der Ludwig-Maximilians-Universität München

> vorgelegt von Andreas Schürzinger

München, den 30. September 2004

Erstgutachter: Zweitgutachter: Tag der mündlichen Prüfung: Prof. Dr. Ludwig MaschProf. Dr. Karl T. Fehr26. Januar 2005

Such are the things which this journey has given me an opportunity of seeing, and such are the reflections which that sight has raised. Novelty and ignorance must always be reciprocal, and I cannot but be conscious that my thoughts [...], are the thoughts of one who has seen but little.

Samuel Johnson, A Journey to the Western Isles of Scotland

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der metamorphen und strukturellen Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes (Ortega-Gutierrez 1982), einem Kristallingebiet, das sich südlich der Stadt La Paz im mexikanischen Bundesstaat Baja California Sur bis zur Südspitze der niederkalifornischen Halbinsel erstreckt.

Die vorgelegten Untersuchungen liefern auf Basis der geologischen Kartierung detaillierte Daten zu Strukturen und Metamorphose, wie dem Feldgradient der metamorphen Zonenfolge für einzelne Gebiete, pT-Pfade für Teilkomplexe und dem Bezug der metamorphen Isograden zur strukturellen Entwicklung. Damit wird die Entwicklung des Kristallinkomplexes erklärt und die spezifische tektonische Situation umrissen, in der diese Entwicklung abgelaufen ist.

Die wichtigste neue Erkenntnis ist, dass nicht der ganze Komplex ein eigenes tektonostratigrafisches Terrane bildet (Sedlock et al. 1993, Gastil 1991 Beck 1991 und Referenzen hierin), sondern dass sich eine in etwa SSW-NNE verlaufende Grenze durch den Komplex zieht, die Gesteine unterschiedlicher Herkunft und mit unterschiedlicher metamorpher Entwicklung gegeneinander stellt. Granitoide Intrusiva sind im nord-westlichen Bereich relativ primitive M-Typ Intrusiva, im süd-östlichen Bereich zeigen sich Magmatite mit höherer krustaler Kontamination (Schaaf et al. 2000). In dieser Arbeit konnte die in der Literatur als "La Paz Fault' bekannte, aber unterschiedlich interpretierte Störung (Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989, Sedlock et al. 1993, Schaaf et al. 2000) durch strukturelle Untersuchungen als Grenze in die tektonische Entwicklung eingeordnet werden. Der metamorphe Kontrast über die Scherzone hinweg ist gering, es konnte für den liegenden Teil ein pT-Pfad im Gegenuhrzeigersinn ermittelt werden.

Durch Vergleich mit Untersuchungen aus Baja California Nord (Johnson et al. 1999, Schmidt & Paterson 2002, Ortega-Rivera 2003) kann der La Paz Kristallinkomplex jetzt zu den Peninsular Ranges (Gastil 1983, 1991) gestellt werden, die eine Zweiteilung in einen westlichen und einen östlichen Teil zeigen, deren geochemische, metamorphe und strukturelle Charakteristika den hier ermittelten entsprechen.

Für die Niederdruck-Metamorphose konnten mit mehreren Methoden pT-Bestimmungen durchgeführt werden. Zum Einsatz kamen die Konstruktion petrogenetischer Netze für Metapelite (Spear et al. 1999, Pattison et al. 2002), verschiedene Geothermobarometer (z.B. Granat/Biotit, Holdaway 2000, GASP, Holdaway 2001) und ein relativ neuer Ansatz zur Berechnung von sog. ,pseudosections' durch modellierte thermodynamische Systeme bei bekannter Gesamtgesteinschemie (Connolly & Petrini 2002, Tinkham et al. 2001). Die pT-pseudosections stellen ein wertvolles Mittel zur grafischen Darstellung von modellierten metamorphen Paragenesen dar, die sich gut für den Vergleich mit den mikroskopisch und mit der Elektronenstrahl-Mikrosonde ermittelten Daten eignen.

Abstract

This Thesis deals with the metamorphic and structural development of the La Paz Crystalline Complex (Ortega-Gutierrez 1982), which extends south of the city of La Paz, Baja California Sur, Mexico, to the southern tip of the Baja California peninsula.

The results presented are data on the development of structures and metamorphism based on detailed geologic mapping. This includes the succession of metamorphic isograds, pT-paths for structural units and the relation of the two. It allows to explain the development of the crystalline complex in light of the specific tectonic situation.

The most important new result is that the whole complex does not make up one distinct tectonostratigraphic terrane, as supposed previously (Sedlock et al. 1993, Gastil 1991, Beck 1991 and references therein), but that the complex is separated by a SSW-NNE striking fault. This fault juxtaposes rocks of different origin and with different metamorphic history. Intrusives in the northwestern area are of relatively primitive M-type, in the south-eastern area, intrusives show a higher degree of crustal contamination (Schaaf et al. 2000). The structural work presented here shows that the fault already described in literature as the 'La Paz Fault', but interpreted differently (Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989, Sedlock et al. 1993, Schaaf et al. 2000) is indeed the structural feature described above. Metamorphic contrast across the fault is minor, but an anticlockwise pT-path could be constructed for the footwall.

Comparison with new results from the northern part of Baja California (Johnson et al. 1999, Schmidt & Paterson 2002, Ortega-Rivera 2003) shows that the La Paz Crystalline Complex is indeed a part of the Peninsular Ranges Batholith (Gastil 1983, 1991). The separation into a western and an eastern part is characteristic for this complex and can be compared to the geochemical, metamorphic and structural characteristics presented here.

PT-determinations were conducted for the overall low-pressure metamorphism using several methods: construction of petrogenetic grids for metapelitic rocks (Spear et al. 1999, Pattison et al. 2002), different geothermobarometers (e. g. garnet/biotite, Holdaway 2000, GASP, Holdaway 2001) and a relatively new approach to calculate pseudosections through thermodynamically modelled systems with known bulk-composition (Connolly & Petrini 2002, Tinkham et al. 2001). The pseudosections are a very useful graphic tool to represent modelled metamorphic mineral parageneses, which can be easily compared with actual measurements (Microscope, Electron Microprobe).

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis						
	Verzeichnis der Abbildungen und Tabellen					
1	Einleitung					
	1.1 Aufgabenstellung					
	1.2 Reg	ionaler Geologischer Überblick	13			
	1.2.1	Die "Peninsular Ranges"	14			
	1.2.2	Die Terranes Mexikos	17			
	1.2.3	Der La Paz Kristallinkomplex	18			
•	1.3 Ziel	dieser Arbeit, Vorgehen	22			
2	Bearb	eitete Einheiten	23			
	2.1 Gec	blogische Übersichtskarte Ele Tedes Sentes und Le Muele/Les Delemes	24			
	2.2 PIO	Profil Todos Santos una La Muela/Las Paloinas Profil Todos Santos: Gneise von Punta Lobos – Metasedimente El Cardonozo	23			
	2.2.1	Profil I a Muela/I as Palomas: Metapelite/nsammite I a Muela	32			
	2.2.2	Säulenprofil des gesamten metasedimentären Komplexes	35			
	2.2.5	fil El Triunfo	38			
	2.3 110	Profil El Triunfo	38			
	2.3.2	Strukturelle Merkmale: Anatomie der Scherzone El Triunfo	41			
	2.3.3	Metamorphe Merkmale: der Übergang von Glimmerschiefern zu Migmatiten	45			
	2.3.4	Orthogneise w. El Triunfo				
	2.4 Pro	fil El Novillo	47			
	2.5 Pro	fil Sierra de La Gata	50			
	2.5.1	Strukturelle Merkmale	50			
	2.5.2	Merkmale der Metamorphose	52			
	2.6 Arb	eitsgebiet Boca de la Sierra	54			
	2.6.1	Merkmale der Metamorphose	54			
	2.7 Zus	ammenfassung, Interpretation der aufgenommenen Profile	56			
3	Grun	dlagen der petrologischen Bearbeitung	59			
	3.1 Ana	llytische Methoden	59			
	3.1.1	Geländebeobachtungen	59			
	3.1.2	Mikroskopische Analysen	59			
	3.1.3	Mineralchemische Analysen	59			
	3.2 Met	hoden der Auswertung	60			
	3.2.1	There a demonstrate of the control o	00			
	5.2.2 2.2.2	I nermodynamische Grundlagen der Gleichgewichts-Berechnungen	00			
	3.2.3	Multi-Equilibrium Berechnungen	61			
	3.2.4	Das Programm PERPLE_X	62			
	3.2.5	I hermobarometrie	66			
4	Petrog	genetische Netze für Metapelite	69			
	4.1 Met	apelite ohne Granat	70			
	4.2 Gra	nai rumende Metapente	70 79			
5	Miner	alchemie und Thermobarometrie	82			

	51	Vorwärts – Modellierung von Phasendiagramm – Projektionen	82
	5.1		
	5.1	1.2 Granat führender Metapelit der Sierra La Gata	
	5.1	1.3 Gneise von Punta Lobos	
	5.2	Thermobarometrie	
	5.2	2.1 Metapelite El Triunfo	
5.2.2 Me		2.2 Metapelite Sierra La Gata	
	5.2	2.3 Metapelite Boca de la Sierra	
	5.2	2.4 Metabasite Punta Lobos	
	5.2	2.5 Metabasite El Novillo	
6	Is	Isotopen - Geochemie	
	6.1	Methodik	
	6.2	Ergebnisse	
7	Т	Interpretation der Ergebnisse	
/		F	
/	7.1	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als	Teil der Peninsular
]	7.1 Range	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117	Teil der Peninsular
]	7.1 Range 7.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung	Teil der Peninsular
, 1 8	7.1 Range 7.2 A	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang	Teil der Peninsular
,] 8	7.1 Range 7.2 A 8.1	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis	Teil der Peninsular
, 1 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis Mikrosondendaten	Teil der Peninsular
,] 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis Mikrosondendaten	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127
, 3 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2 8.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis Mikrosondendaten 2.1 Probe 076, Bereich La Muela 2.2 Probe 128, Bereich La Gata	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 130
, 1 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis Mikrosondendaten 2.1 Probe 076, Bereich La Muela 2.2 Probe 128, Bereich La Gata 2.3 Probe 191, Bereich Boca de la Sierra	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 130 132
, 1 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung Anhang Literaturverzeichnis Mikrosondendaten 2.1 Probe 076, Bereich La Muela 2.2 Probe 128, Bereich La Gata 2.3 Probe 191, Bereich Boca de la Sierra 2.4 Probe 080a, Bereich Punta Lobos	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 130 132 136
, 1 8	7.1 Range 7.2 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.3	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 127 130 132 136 137
, 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.3 8.3 8.3	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 127 130 132 136 137
, 8	7.1 Range 7.2 A 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.3 8.3 8.3 8.3	 Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 127 130 132 136 137 137
, 8	7.1 Range 7.2 8.1 8.2 8.2 8.2 8.2 8.2 8.3 8.3 8.3 8.3 8.3 8.3	Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als es117 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung	Teil der Peninsular 119 121 121 127 127 127 130 132 136 137 137 137 138

Verzeichnis der Abbildungen und Tabellen

Abbildung 1.1: Vorkommen des Peninsular Ranges Bathotlith, nach Ortega-Rivera (2003). Arbeitsgebiet eingerahmt
Abbildung 1.2: Westliche/Östliche Zone des PRB nach geochemischen und isotopischen
Parametern
Abbildung 1.3: Übersichtskarte der Terranes Mexikos, aus Sedlock et al. 1993. Arbeitsgebiet eingerahmt
Abbildung 1.4: Verteilung der Rb – Sr WR Alter im Los Cabos Block (aus Schaaf et al., Fig. 7) - vgl. auch die Lage der La Paz Fault. 20
Abbildung 1.5: Profil durch das Pericu-Terrane im Krustenmaßstab (aus Sedlock et al. 1993, Fig. 15). Die gewellten Linien im 45°-Winkel von links oben sind die La Paz Fault von Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989
Abbildung 2.1: Übersichtskarte La Paz Kristallinkomplex, M. ca. 1:250.000, mit Lage der Profile. UTM-Koordinaten der Zone 12Q
Abbildung 2.2: West-Ost - Profil im Maßstab 1:25.000 vom Gneis Punta Lobos bis zur metasedimentären Abfolge El Cardonozo. Anschluss nach Osten im Profil La Muela / Las Palomas
Abbildung 2.3: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – ellipsoidale, stark in Richtung der Lineation gelängte helle Domänen (evtl. duktil deformierte Klasten?)
Abbildung 2.4: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – späte mafische Gänge sind duktil mit deformiert
Abbildung 2.5: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – Alteration: "Nest' von Adr/Grs und Epidot
Abbildung 2.6: poikilitische Hornblende mit flaschengrünem Anwachssaum umwächst Epidot- Körner. Probe 118a, parallele Nickols (links), gekreuzte Nickols (rechts), Matrix Pl+Qtz
Abbildung 2.7: Bildung von Cpx (hohe Interferenzfarben und hohes Relief) und Pl (gut zu sehen im rechten Bild etwas rechts oberhalb der Bildmitte) nach Hbl (grüne Eigenfarbe im linken Bild). Probe 118a, parallele Nickols (links), gekreuzte Nickols (rechts)
Abbildung 2.8: ACF Diagramme zur Darstellung der progressiven Metamorphose in Metabasiten (nach Bucher & Frey 1995). Oben Ausgangssituation am Übergang Grünschiefer- /Amphibolitfazies (Ep neben Chl), Mitte Bildung von Hbl nach Rkt. (2-1), Unten Bildung von Cpx nach Rkt. (2-2). Bei jeder dieser Reaktionen wird stöchiometrisch auch viel An-Komponente gebildet
Abbildung 2.9: Paragenese Epidot (hohes Relief, grün-braune Eigenfarbe, etwa in der Bildmitte), Andradit/Grossular und Klinopyroxen (hohe Interferenzfarbe und Relief, oben Mitte rechts). Probe
Abbildung 2.10: ACF-Diagramm mit Paragenesen der Probe 080a
Abbildung 2.11: Marmor von Todos Santos – boudinierte, hier ca. 50 cm mächtige Lagen mit Reaktionssaum zum Glimmerschiefer (rot-braune Färbung)
Abbildung 2.12: pelitisch/psammitische Wechsellagerung mit syn-sedimentären Abschiebungen (auffällig von rechts oben ca. im 30°-Winkel nach links unten, die unterste ca. 10 cm mächtige Bank wird nicht versetzt), ein Peso etwas rechts der Bildmitte als Maßstab, Einheit 13 des Profils.
Tabelle 2.1: Gesamtgesteinschemie der Probe 076 aus dem Profil La Muela/LasPalomas im

Tabelle 2.1: Gesamtgesteinschemie der Probe 076 aus dem Profil La Muela/LasPalomas im Vergleich mit Analysen von Sediment-Gesteinen aus möglichen ähnlichen Ablagerungsräumen...34

Abbildung 2.13: AFM-Diagramm der Paragenese Bt+Grt+And(+Qtz+Ms+H ₂ O)(+Pl) in Probe 076 Bulk 076' ist die Gesamtgesteinschemie der Probe) 34
Abbildung 2 15: Säulenprofil des gesamten metasedimentären Komplexes 37
Abbildung 2 16: Profil M 1:25 000 durch den Überschiebungskomplex El Triunfo 39
Abbildung 2 17: Karte M 1:50 000 des Gebietes El Triunfo 40
Abbildung 2.18 (vorherige Seite): Strukturmerkmale der Scherzone an Beispielen, relative Positionen schematisch eingetragen im W – E Profil El Triunfo. Erläuterung im Text
Abbildung 2.19: Zusammenstellung von Strukturdaten für den westlichen Arbeitsbereich. Erläuterung im Text
Abbildung 2.20: Ausschnitt aus der Karte El Triunfo 1:50.000; kleinräumige, strukturell kontrollierte Zone der partiellen Anatexis in Metapeliten
Abbildung 2.21: verfaltetes mylonitisches s in Orthogneisen SW El Triunfo
Abbildung 2.22: Stereographische Projektion von Strukturdaten der Orthogneise
Abbildung 2.23: Profil El Novillo, M. 1:25.000
Abbildung 2.24: Aufschlussskizze der Scherzone La Huerta an der Straße La Paz – Los Planes. Faltenachsen stehen steil und fast parallel zur Lineation
Abbildung 2.25: Deformierte Kalksilikate in der Scherzone La Huerta
Abbildung 2.26: stereographische Projektion von Daten der Schieferung, Lineation und Schersinn in der Sierra de La Gata
Abbildung 2.27 (vorherige Seite): Profile Sierra La Gata, M. 1:25.000. Lokationen siehe Übersichtskarte Abb. 2.1
Abbildung 2.28: Szenen einer Aufschmelzung: Merkmale der partiellen Anatexis im Profil Bahia Los Muertos
Abbildung 2.29: Andalusit überwächst eine durch feine Erz-Körner erkennbare Schieferung. And- Korn füllt das ganze Bild. Breite des Bildes ca. 4 mm
Abbildung 2.30: Granate mit Einschlüssen von Pl, Bt, Ilm, Qtz, Matrix Qtz+Bt+Sil. Probe 191, Boca de la Sierra. BSE-Bild, Maßstabsbalken 0,5 mm
Abbildung 2.31: Kalksilikat-Paragenesen in unreinen Marmoren, Probe 192, Boca de la Sierra. BSE-Bild, Maßstabsbalken 50 µm
Abbildung 2.32: interpretiertes W – E Gesamtprofil durch den La Paz Kristallinkomplex. Erläuterung siehe Text
Tabelle 3.1: Mikrosonden – Spekrometerkristalle, Standards und Standardabweichungen nachFehr (1992) und eigenen Messungen.59
Abbildung 3.1: Stabilitätskriterium minimale freie Gibbs'sche Energie im G-X Diagramm, schematisch. a) ,pseudo-compounds' der Phasen a, b, c und d. b) kombinatorisch (Thermocalc, Geo-Calc, TWQ); Abbildung aus Connolly 1992, Erläuterung im Text
Abbildung 3.2: Vorgehen der Berechnungen mit PERPLE_X
Abbildung 3.3: geändertes Vorgehen – Arbeitsweise mit PERPLE_X zur automatischen Berechnung von n thermodynamischen Systemen
Tabelle 3.2: verwendete Geothermo- und Geobarometer. 66
Abbildung 4.1: Konstruktion der invarianten Punkte und univarianten Reaktionen in KFASH/KMASH (erweitert nach Pattison et al. 2002)
Abbildung 4.2: Erweiterung des KFASH/KMASH Systems zu KFMASH
Abbildung 4.3: pelitisches petrogenetisches Netz in KFMASH mit Alumosilikat-Phasengrenzen nach Pattison et al. 2002. Beobachtete Reaktionen sind eingezeichnet

Abbildung 4.4: Sillimanit ersetzt Andalusit randlich an einem ca. 1 mm messenden And-Korn – deutlich erkennbar am Winkel Spaltbarkeit (45° - 90°). Probe 014, Profil El Triunfo. Pfeile: Sillimanit
Abbildung 4.5: Biotit und Sillimanit-Nadeln als Einschlüsse in Quarz. Probe 014, Profil El Triunfo
Abbildung 4.6: Pinitisierter Cordierit relativ grobe Tafeln von Muskovit und Chlorit im Kern
Probe 128, Profil Santa Martha
Muskovit-Dehydratationsreaktionen und Reaktionen mit Schmelze werden im Rahmen der Anatexis im folgenden Abschnitt 4.1.2 mit diskutiert
Abbildung 4.7: Zusammenfassung der kritischen Punkte für die pT-Einordnung in nicht Granat führenden Metapeliten (Punkte $\otimes 1 - 4$, Erläuterung im Text)
Abbildung 4.8: (vorherige Seite) petrogenetisches Netz in NKFMASH für Granat führende Pelite nach Spear et al. 1999. Alumosilikat-Phasengrenzen nach Pattison et al. 2002. Beobachtete Reaktionen sind eingezeichnet
Abbildung 4.9: Grt – Crd Reaktionen. Crd ist komplett pinitisiert, Grt + Crd reagieren zu Bt + Sil nach Reaktion 12. Probe 133, Profil Santa Martha
Abbildung 4.10: Detail aus 4.9: Crd-Pinit, Grt, Sil und Bt. Probe 133, Profil Santa Martha77
Abbildung 4.11: a) Sil+Bt – Säume um ca. 1mm breites Leukosom (Pl+Qtz). Im Kern des Leukosoms sind späte Ms erkennbar (Pfeil). b) bei gekreuzten Nickols sind die Pl-Qtz Symplektite gut sichtbar
Abbildung 4.12 (Ausschnitt aus 4.11 b): Plagioklas – Quarz (links unten, Pl in Auslöschung mit Qtz Myrmekiten) und Biotit – Sillimanit (mitte rechts oben) Symplektite in anatektischen Gesteinen. Probe 3.21, Sierra La Gata
Abbildung 4.13: pT-Pfade bestimmt aus petrogenetischen Netzen. Reaktionen und
Stabilitätsbereiche vereinfacht nach Abb. 4.7 und 4.8. Erläuterung im Text
Abbildung 5.1: modelliertes Phasendiagramm für den Metapelit Probe 076 – vereinfacht, nur die Paragenesen mit Granat sind dargestellt
Abbildung 5.2: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Chlorit in der Probe 076. p in bar, T in °K
Abbildung 5.3: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Biotit in der Probe 076. p in bar, T in °K.
Abbildung 5.4: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Granat in der Probe 076. p in bar, T in
N
°K
Abbildung 5.6: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse Staurolith in der Probe 076. p in bar, T in °K.
Abbildung 5.7: modellierte modale Anteile für Muskovit in der Probe 076. p in bar, T in °K 87
Abbildung 5.8: modelliertes Phasendiagramm für den Metapelit Probe 133 – vereinfacht
Abbildung 5.9: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Chlorit in der Probe 133. p in bar, T in °K
Abbildung 5.10: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Biotit in der Probe 133. p in bar, T in °K
Abbildung 5.11: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Granat in der Probe 133. p in bar, T in
к

Abbildung 5.12: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse Cordierit in der Probe 133. p in bar, T in °K
Abbildung 5.13: modellierte modale Anteile für Muskovit in der Probe 133. p in bar, T in °K 93
Tabelle 5.1: (vorherige Seite) Gesamtgesteinschemien für die Modellierung der Gneise Punta Lobos, CaO-Anstieg nach rechts. 95
Abbildung 5.14: isobarer TX_{CO2} – Schnitt für die fixierte bulk-Zusammensetzung M18. Der Übersicht halber sind die Beschriftungen der pseudo-invarianten Punkte entfernt. Grandit-Stabilität links haus oberhelb der Kumun
Abbildung 5 15: alteriorter Metabasit: isobarar TV Sabritt für $V = 0.001$
Abbildung 5.16: alterierter Metabasit: isobarer TX_{CaO} – Schnitt für X_{CO2} = 0,01. Pfeil: Aufheizungspfad für Tabelle 5.2
Abbildung 5.17: Falschfarben-Darstellung der modellierten modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M12, M14 und M18. $Xco_2 = 0,001$, p in bar, T in ^o K
Abbildung 5.18: Falschfarben-Darstellung der modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M20, M21, M22 bei $Xco_2=0,001$ und $Xco_2 > 0,01$, p in bar, T in ^o K
Abbildung 5.19: Falschfarben-Darstellung der modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M12 – M16 bei $Xco_2=0,001$ und $Xco_2 > 0,01$, p in bar, T in°K. Modellierung unter Verwendung des Mischungsmodells von Engi & Wersin (1987) für Grandit. Merklich erweiterte Stabilität und vorhergesagte modale Gehalte für Grandit. 102
Tabelle 5.3 a, b: Ergebnisse und Mittelwerte der Grt-Bt Thermometer für Probe 076
Abbildung 5.20: Plot der KD-Werte der Grt-Bt Punktpaare für Probe 076
Tabelle 5.4: Ergebnisse der berechneten GASP-Barometer für Probe 076
Abbildung 5.21: Grafische Darstellung der Ergebnisse der WebInvEq - Web-Berechnung für Probe 076 (Gordon 1992, Gordon et al. 1994)
Abbildung 5.22: Elementverteilungsbilder Granat 3, Probe 128. a) links für Ca und b) rechts für
Mg
Tabelle 5.5 a, b: Ergebnisse und Mittelwerte der Grt-Bt Thermometer für Probe 128 107
Tabelle 5.6: Ergebnisse des Grt-Chl Thermometers für Probe 128
Tabelle 5.7: Ergebnisse der berechneten GASP-Barometer für Probe 128
Abbildung 5.23: Messbereiche Granat1, Probe 191. BSE-Bild
Abbildung 5.24: a (links): Elementverteilung Mg, b (rechts): Elementverteilung Ca. Granat 1, Probe 191 (Ausschnitt wie in Abbildung 5.4)
Tabelle 5.8: Grt-Bt Temperaturen Granat2, Probe 191: grau hinterlegte Spalten sind Messungen des Granat-Kerns. 109
Tabelle 5.9: kombinierte Ergebnisse des GASP-Barometers und Grt/Bt-Thermometers an Granat1, Probe 191: Bereiche Kern, Rand1, Rand2
Abbildung 5.25: BSE-Bild der Probe 080a (Grt/Ep/Cpx)
Abbildung 5.26: Plot von X Adr/X Ep im Grt/Ep-Thermometer. Probe 080a 111
Tabelle 6.1: Ergebnisse der Altersdatierungen 113
Abbildung 6.1: Zuordnung der Ergebnisse zu publizierten Daten
Abbildung 7.1: schematisches Profil und geodynamische Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes

Danksagung

Diese Arbeit entstand am Institut für Mineralogie, Petrologie und Geochemie der Ludwig-Maximilians-Universität München. Sie wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziell gefördert (Projekt Ma 686 19 1-2).

Prof. Dr. Ludwig Masch hat diese Arbeit angeregt und mich stets mit Interesse und großer Diskussionsbereitschaft begleitet. Vor allem für das mir entgegengebrachte Vertrauen möchte ich mich herzlich bedanken.

Für die Nutzung der Einrichtungen und Apparate des Insituts danke ich den Lehrstuhlinhabern Prof. Dr. H. G. Huckenholz⁺ und Prof. Dr. B. D. Dingwell.

Die Geländearbeit unterstützten Dr. Fernando Ortega-Gutierrez (UNAM México City), Lars Riewe und Jose Antonio Pérez-Venzor (UABCS, La Paz) sowie Dr. Catalina Lüneburg und Dr. Hermann Lebit (USC, L.A.).

Frau Hildegard Hofstetter und Herr Dimitru Martinchi⁺ präparierten zahllose Dünnschliffe und Mikrosondenschliffe

Ein herzlicher Dank für anregende Diskussionen und die stets angenehme Arbeitsatmosphöre geht an Prof. Dr. Karl T. Fehr, Dr. Birgit Fruhstorfer, Stefan Gottschaller, Prof. em. Mike Holdaway, Dr. Peter Schaaf, Keegan Schmidt PhD, Dr. Matthias Weger, Stefan Wamsler, Matthias Willbold.

Herr Stefan Bossert (CAST GmbH) stellte großzügig einen Rechner zur Verfügung und zeigte viel Verständnis für das Vorhaben, diese Arbeit abzuschliessen.

Meiner Familie, besonders meiner Frau Ute, danke ich für viel Geduld und liebevolle Unterstützung.

1 Einleitung

1.1 Aufgabenstellung

Der La Paz Kristallinkomplex (,Complejo Cristalino de La Paz', Ortega-Gutiérrez 1982; auch ,Los Cabos Block', Schaaf 2000) im mexikanischen Bundesstaat Baja California Süd erstreckt sich südlich und östlich der Provinzhauptstadt La Paz bis zur Südspitze der Halbinsel Niederkalifornien, dem Cabo de San Lucas. Die metamorphen und magmatischen Gesteine, aus denen er sich zusammensetzt, sind in mehrerlei Hinsicht für eine Untersuchung von Metamorphose- und Deformationsbedingungen interessant und geeignet:

- grundlegende lithologische Beschreibungen und Übersichtskartierungen sind vorhanden (Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1986, 1988, 1989),
- geochemische und isotopengeochemische Daten der Magmatite sowie paläomagnetische Daten sind publiziert (Böhnel et al. 1992, 2002, Schaaf et al. 1995, 2000),
- die Art der Metamorphose ist grundsätzlich erkannt (Ortega-Gutiérrez 1982),
- regionale Bedingungen (aktiver Kontinentalrand, Bedeutung des Terrane-Konzeptes) sind bekannt, werden aber im Detail kontrovers diskutiert.

Detaillierte Daten zu Strukturen und Metamorphose wie der Feldgradient der metamorphen Zonenfolge, pT-Pfade, der Bezug der metamorphen Isograden zur strukturellen Entwicklung, die Stellung des Plutonismus zu Deformation und Metamorphose können die Entwicklung des Kristallinkomplexes klären und die spezifische tektonische Situation umreissen, in der diese Entwicklung abgelaufen ist.

Vor dem Hintergrund der tektonischen Entwicklung Mexikos und des nördlichen Zentralamerikas soll zur Frage der Herkunft und zu den Nachbarschaftsbeziehungen des La Paz Kristallinkomplexes beigetragen werden.

1.2 Regionaler Geologischer Überblick

Für einen regionalen Überblick der niederkalifornischen Halbinsel können zwei Betrachtungsweisen gewählt werden.

Basierend auf langjähriger detaillierter Feldarbeit im US-Bundesstaat Kalifornien und in Baja California Nord sind die "Peninsular Ranges" als ein von mesozoischen Granitoiden intrudiertes Gebiet in der Literatur gut beschrieben. Hier werden mehrere orogen-parallele Gürtel ausgehalten (Gastil 1975, 1983).

Mit dem Konzept der tektonostratigraphischen Terranes (Ben-Avraham & Nur 1982) wird versucht, Gebiete gleicher tektonischer Historie zu erkennen. Für Baja California Süd und das mexikanische Festland sind die Geländebefunde wesentlich spärlicher als für den Norden, so dass vorwiegend nach Übersichts-Kartierungen und verfügbaren Daten gruppiert wird. Geochemische Daten zur Magmenherkunft, paläomagnetische Daten, sowie geophysikalische Daten wie Schwereund Magnetanomalien sind publiziert (Campa & Coney 1983, Sedlock et al.1993).

Das Arbeitsgebiet wird zu den Peninsular Ranges gestellt (Gastil 1975, 1983). Im Rahmen des Terrane-Modells ist es jedoch als eigenständiges "Pericu-Terrane' beschrieben (Sedlock et al. 1993).

Um eine regionale geologische Einordnung zu ermöglichen, werden im Überblick beide Betrachtungsweisen gezeigt.

1.2.1 Die ,Peninsular Ranges'

Als **Rahmengesteine** für die Plutonite der Peninsular Ranges (,PRB') werden mehrere lithostratigrahpische Einheiten ausgehalten. Von West nach Ost sind dies (Übersicht nach Gastil 1993, Schmidt & Paterson 2002 und Ortega-Rivera 2003):

- ,Forearc' Becken: tiefmarine Sedimente (Apt bis Eozän), die auf triassischen bis kretazischen Ophioliten lagern (,Valle Group') sowie fluviale bis flach-marine Sequenzen (,Rosario Group', Turon Maastricht). Die Valle Group ist blauschieferfaziell überprägt (Smith & Busby 1993, Sedlock 1996, 1999, Baldwin 1996, Bonini & Baldwin 1998). Diese Gesteine werden nicht von den Plutoniten intrudiert, die Rosario Group liegt auf den Batholithen (,onlap', Kimbrough et al. 2001). Datierungen an detritischen Zirkonen (Kimbrough et al. 2001) zeigen ein Becken, das durch die sich schnell hebenden Peninsular Ranges befüllt wird.
- Jurassicher kretazischer vulkanischer Bogen: klastische und vulkaniklastische Sedimente, Vulkanite, tw. grünschieferfaziell überprägt, intrudiert von Plutoniten der ,westlichen Zone' (,Alisitos Formation', Allison 1974, Busby et al. 1998, Fackler-Adams & Busby 1998). Als Alter ist fossil Apt-Alb belegt (Silver et al. 1963), radiometrisch (U/Pb Zirkon SHRIMP) sind 115±1,1 Ma an Vulkaniten datiert (Johnson et al. 1999). Die Alisitos Formation wird im Bereich der Sierra San Pedro Martir (Lokation siehe Abb. 1.1) in zwei Einheiten unterteilt: eine buntere siliziklastische mit kalkigen und mergeligen Einschaltungen, sowie eine eintönigere, vulkanisch und vulkaniklastisch betonte (Johnson et al. 1999).
- Triassische kretazische ,Übergangs-Zone' (,transition assemblage'): vulkanische, vulkaniklastische, turbiditische Sedimente, die mit der Intrusion der PRB Plutonite amphibolitfaziell überprägt wurden (Rothstein 1997, zit. in Schmidt & Paterson 2002; Kopf et al. 2000).
- Paläozoische klastische regional metamorphosierte Beckensedimente (Ordoviz Perm?) und
- Oberproterozoische bis permische karbonatische und siliziklastische Metasedimente (Glimmerschiefer, Paragneise). Die beiden letzten Einheiten sind Teil des stabilen nordamerikanischen Kratons bzw. stellen Beckensedimente des Kontinentalrandes dar (Gastil 1993).

Die **Intrusiva** des "Peninsular Ranges Batholith' sind eine Abfolge jurassisch-kretazischer kalkalkalischer Magmatite mit vielen einzelnen Intrusiv-Zentren. Vorkommen sind im südlichen US-Bundesstaat Kalifornien und Baja California Nord erkannt (Gastil 1975, 1983, 1993). Der La Paz Kristallinkomplex und Vorkommen im mexikanischen Bundesstaat Jalisco wurden vorbehaltlich detaillierterer Ergebnisse mit einbezogen (Ortega-Rivera 2003). Entlang der Küste des Golfs von Kalifornien sind Magmatite des PRB nach Süden in einem schmalen Streifen bis 26° n. Br. belegt (Sedlock et al. 1993). Charakteristisch ist eine Einteilung in einen westlichen und einen östlichen Bereich, die sich durch Intrusion in Kruste ozeanischer bzw. kontinentaler Affinität unterscheiden (siehe Abbildung 1.1).

Diese Unterscheidung wird von mehreren Merkmalen unterstützt, die zusammengenommen charakteristisch für den einen oder anderen Bereich sind:

,Gabbro-Zone': Im westlichen Bereich kommt eine bunte Lithologie mit Gabbros, Quarz-Gabbros, Dioriten, Leuko-Granodioriten und Tonaliten vor. Es wird kein Übergang von Gabbros zu leukokrateren Gesteinen beobachtet. Im östlichen Bereich gehen die Gabbros stark zurück, Tonalit und Granodiorite mit niedrigen K₂O - Gehalten dominieren (~80%), Granite und Monzogranite bilden die übrigen Lithologien. Die Bezeichnung ,Gabbro-

Zone' ist für den westlichen Bereich gebräuchlich, auch wenn der Anteil an echten Gabbros < 20% ist (Gastil 1975).

- "Magnetit Grenze': im westlichen Bereich ist Magnetit die stabile magmatische FeTi-Phase, gegenüber Ilmenit im östlichen Bereich (Gastil 1994)
- Sr_i-Werte: Initiale ⁸⁷Sr/⁸⁶Sr-Werte sind im westlichen Bereich < 0,705; im östlichen höher (Gromet & Silver 1987).
- δO^{18} -Werte: δO^{18} -Werte sind im westlichen Bereich um +6,0; im östlichen höher bis +12,0 (Gromet & Silver 1987).
- SEE-Fraktionierung: Seltenerdelemente sind im westlichen Bereich schwach, im östlichen stark fraktioniert (Gromet & Silver 1987).
- $\varepsilon_{Nd}(T)$ -Werte: $\varepsilon_{Nd}(T)$ -Werte sind schwach korelliert, aber generell im westlichen Bereich höher (+8 bis 0) als im östlichen (+2 bis -6) (Gromet & Silver 1987).

Die Einteilung in westlichen und östlichen PRB wird von allen Autoren für die Peninsular Ranges erkannt. Die Grenze ist je nach Parameter scharf oder einige Kilometer breit. Herkunft und Art dieser Grenze werden auf unterschiedliche Arten erklärt:

- Die Grenze ist ein schon prä-triassisch angelegtes Merkmal des gerifteten Randes der nordamerikanischen kontinentalen Kruste (Thomson & Girty 1994).
- Die Grenze stellt eine Sutur zwischen einem jurassischen Back-Arc Becken und dem nordamerikanischen Kontinent dar, die nach dem Kollaps des Beckens in der Kreide geschlossen wurde (Busby et al. 1998).
- Die Grenze stellt eine Sutur zwischen einem exotischen Terrane (= der Alisitos Formation) und dem Kontinent dar, das in der Kreide an den Kontinent ,angedockt' hat (Johnson et al. 1999).
- Die Grenze stellt eine Scherzone innerhalb des Kontinentalrandes dar, an der Verformung durch ein weiter aussen passierendes Terrane aufgefangen wird (diskutiert, aber verworfen in Schmidt & Paterson 2002).

Schmidt & Paterson (2002) und Johnson et al. (1999) belegen, dass an der Grenze zwischen westlichem und östlichem Peninsular Ranges Batholith zwar eine mächtige Scherzone existiert, diese aber keine nennenswerte laterale Bewegung zeigt ("Main Martir Thrust"). Statt dessen wird damit vertikaler Versatz und Aufstieg des östlichen PRB bei schneller Dekompression von ~0,5 GPa auf ~0,3 GPa, und damit auch der abrupte metamorphe Gradient von grünschieferfaziell in der östlichsten Alisitos Formation zu amphibolitfaziell in der Übergangsformation erklärt.

Die Alisitos Formation wird am unmittelbaren Kontakt mit der Scherzone in zwei Einheiten gegliedert: einen vulkanisch und vulkaniklastisch dominierten, generell flach gelagerten bis leicht offen gefalteten Bereich, der von einem mehr sedimentär dominierten Bereich (siliziklastisch, vulkaniklastisch und kalkig) strukturell überlagert oder überschoben wird (Schmidt & Paterson 2002, Johnson et al. 1999).



Abbildung 1.1: Vorkommen des Peninsular Ranges Bathotlith, nach Ortega-Rivera (2003). Arbeitsgebiet eingerahmt.



Abbildung 1.2: Westliche/Östliche Zone des PRB nach geochemischen und isotopischen Parametern.

1.2.2 Die Terranes Mexikos

Für die Erklärung der geologischen Struktur Mexikos hat sich das ,Terrane'-Konzept allgemein bewährt (Coney et al. 1980, Ben-Avraham & Nur 1982, Campa & Coney 1983, Sedlock et al. 1993). Kritische Fragen zur Einordnung und Abgrenzung eines Gebietes als tektonostratigraphisches Terrane sind eine eigene geologische Geschichte, die sich von der Geschichte angrenzender Terranes unterscheidet, sowie die Begrenzung durch Störungen.

Für ein Terrane müssen also Entstehung (Art und Ort der Entstehung), geologische Entwicklung (stratigraphisch, metamorph) und das "Andocken' (engl. ,docking'), entweder an einen Kraton oder ein anderes Terrane, jeweils im zeitlichen Zusammenhang, erforscht werden.

Der La Paz-Kristallinkomplex bildet nach Sedlock et al. 1993 das Pericu-Terrane (siehe Abb. 1.3 aus Sedlock et al. 1993). Für die Einstufung als eigenes Terrane ist v. a. das Fehlen von vulkanischen Gesteinen entscheidend (Ortega-Gutierrez, pers. Komm. 1997). Gastil (1975) stellte den La Paz Kristallinkomplex als Alisitos-Terrane (entspr. ,Yuma'-Terrane bei Sedlock et al. 1993) zu den Peninsular-Ranges (siehe Abb. 1.1).

Paläomagnetische Daten für Baja California scheinen auf einen Transport von über 2000 km entlang eines großen, dextralen Schersystems nach Norden hinzuweisen (Hagstrum et al. 1985, 1987, Lund et al. 1991a und b; zusammenfassende Diskussion in Beck 1991, Gastil 1991 und Sedlock et al. 1993). Ob das Pericu-Terrane dabei immer zusammen mit der restlichen Halbinsel Baja California transportiert wurde, wird kontrovers diskutiert (Sedlock et al. 1993). Neuerdings werden die paläomagnetischen Daten anders interpretiert: sie könnten durch eine Kippung der

gemessenen Einheiten fälschlicherweise auf die großen Nord-/Süd-Versätze deuten. Wird die Kippung (die durch die Öffnung des Golfs von Kalifornien an jungen Abschiebungen entstanden sein kann) herausgerechnet, so bleiben allenfalls einige hundert Kilometer an Versatz (Böhnel et al. 2002).

Nach neuen isotopengeochemischen und paläomagnetischen Daten wird zumindest der südliche Teil des La Paz Komplexes zum Puerto Vallarta Batholith (im ,Guerrero'- oder ,Nahuatl'-Terrane) mit einer Paläoposition nahe Puerto Vallarta auf der östlichen Seite des Golfs von Kalifornien gestellt (Schaaf et al. 2000, Schaaf et al. 1995, Centeno-García et al. 1993, Böhnel et al. 1992). Dies widerspricht einem großen Versatz in Nord-Süd Richtung. Das Pericu-Terrane hätte damit für das Mesozoikum eine relativ stabile Position unmittelbar westlich des Nahuatl-Terranes, von dem es erst im späten Miozän (ca. 8 - 5,5 Ma) durch die Öffnung des Golfs von Kalifornien und die Ausbildung einer neuen Plattengrenze (zwischen Pazifischer, Cocos und Nordamerikanischer Platte) getrennt wurde (Sedlock et al. 1993).



Abbildung 1.3: Übersichtskarte der Terranes Mexikos, aus Sedlock et al. 1993. Arbeitsgebiet eingerahmt

1.2.3 Der La Paz Kristallinkomplex

Zunächst werden allgemeine Beschreibungen, lithostratigraphische Gliederung, Daten zur Metamorphose und Altersdatierungen zusammengefasst. Danach werden besondere Merkmale, die in der Literatur erkannt sind und für die Deutung wichtig sind, diskutiert. Alle Lokationen sind in der Übersichtskarte (Abb. 2.1) eingetragen.

Allgemeine Beschreibungen

Ortega-Gutiérrez (1982) hat den La Paz Kristallinkomplex in einem Abstract beschrieben als eine Serie von progressiv metamorphen pelitisch-psammitischen Metasedimenten (Glimmerschiefer, Gneise, Migmatite), sowie wenigen Metakarbonaten. Diese werden intrudiert von einem teilweise stark deformierten zonierten Pluton (im Kern Gabbro-Norit, nach aussen folgen Diorit und Granodiorit – gemeint ist der El Novillo Norit-Komplex) und einem nicht deformierten granitischen Batholith, der wiederum deformierte Plutonite und Metasedimente intrudiert. Temperatur und Druck der Metamorphose schätzt er auf 600 - 700 °C und 0,1 - 0,3 GPa ein. Er bemerkt eine enge Abfolge der Isograden der metamorphen Zonen (Biotit, Andalusit, Sillimanit und Cordierit).

Eine detaillierte Beschreibung des Gebietes zwischen La Paz und Todos Santos in einer Artikelserie von Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1986, 1988, 1989) enthält Detailkartierungen und eine lithostratigraphische Einteilung. Folgende Einheiten werden ausgehalten:

- Metasedimente: Phyllite, Metapsammite, Gneise und Migmatite, Marmore und metamorphosierte Mergel. Das Sedimentationsalter wird als prä-kretazisch eingestuft.
- Prä- und syntektonische, verformte Plutonite: Quarzmonzonite, Tonalite, Diorite und dioritische Gänge und Gabbros.
- Posttektonische Plutonite: nicht deformierte Granodiorite, granodioritische Gänge und granitische Pegmatite.
- Extrusiver Magmatismus wird dem Tertiär zugeordnet, Vulkanite und vulkanodetritische Sedimente überlagern die älteren Einheiten.

Die Metamorphose (450-650°C bei <0,45 GPa, teilweise höher) wird als zeitgleich mit Intrusion der prä- und syntektonischen Plutonite angesehen, gefolgt von intensiver Deformation vor allem entlang einer breiten Scherzone, die sich von Todos Santos bis in die Region östlich von La Paz zieht. Der Bewegungssin ist aufschiebend und sinstral.

Sedlock et al. (1993) vergleichen die Metasedimente des Pericu-Terranes mit Einheiten im Tahue-Terrane (s. Abb. 1.3) und nehmen deshalb auch triassische (evtl. sogar paläozoische) Alter an. Die Metamorphose (es werden zusätzlich Hornblende-Sillimanit - Schiefer und Diopsid-Hornblende-Biotit - Gneise nach Murillo-Muneton 1991 beschrieben) wird als höchstens amphibolitfaziell und zeitgleich mit der Intrusion der mafitischen Magmatite und ,low-K' Granitoide angesehen. Die Gneise von Punta Lobos werden als möglicher ,metamorphic core complex' gedeutet, dessen Ausgangsgesteine und Metamorphose unbekannt sind. Als Westgrenze des Terranes wird die steil nach Westen einfallende ,La Paz Fault' angesehen, wobei nicht ausgeschlossen wird, dass Pericu - Gesteine unter der känozoischen Bedeckung nach Westen weiter reichen.

Altersdatierungen

Bei Altersdatierungen wurde generall versucht, prä- und syntektonische Plutonite von den posttektonischen zu Unterscheiden.

Als ermittelte Alter für prä- und syntektonische, verformte Plutonite werden berichtet: ~ 116Ma, [K-Ar] Hausback (1984) und Murillo-Muneton (1991); 129 \pm 15Ma, [Rb-Sr – WR] Schaaf et al. (2000).

Für posttektonische Plutonite sind folgende Alter publiziert: 91-64Ma, [K-Ar] Murillo-Muneton (1991); 109-70Ma, [K-Ar], Hausback (1984); 93Ma, [U-Pb an Zr] Hausback (1984); 115±4Ma, [Rb-Sr – WR], Schaaf et al. (2000).

Eine Zuordnung der datierten Gesteine zu bestimmten Zonen – wie für die Peninsular Ranges bekannt – ist noch nicht gelungen. Auf Basis der von ihm bestimmten Daten nimmt Schaaf et al. (2000) eine Einteilung in nördlichen und südlichen Los Cabos Block vor (siehe Abbildung 1.4 – Fig. 7 aus Schaaf et al. 2000).



Abbildung 1.4: Verteilung der Rb – Sr WR Alter im Los Cabos Block (aus Schaaf et al., Fig. 7) - vgl. auch die Lage der La Paz Fault.

Känozoische Geschichte

Der Komplex wird im Norden von miozänen Vulkaniten überlagert, nach Westen wird er von einer westfallenden Abschiebung begrenzt. Die jüngste tektonische Phase steht in Zusammenhang mit der Öffnung des Golfs von Kalifornien und resultiert in einer Horst-Graben-Struktur (vgl. Abb. 2.1, Graben von Los Planes und San Jose del Cabo). Die Gräben sind jeweils mit tertiären und quartären kontinentalen grobklastischen Sedimenten und Alluvionen gefüllt (Sedlock et al. 1993 und Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1986, 1988, 1989).

Besondere Merkmale

Die ,La Paz Fault' (,Falla de La Paz')

Die ,La Paz Fault' (,Falla de La Paz') erscheint in fast allen Publikationen zum La Paz Kristallinkomplex, jedoch mit unterschiedlichen Deutungen und unterschiedlich gezeichneter Lage:

Bei Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) ist die La Paz Fault ein System kretazischer duktiler Scherzonen, die *im* Kristallinkomplex liegen und eine aufschiebende und lateral sinistrale Komponente haben. Die Deformation stand im zeitlichen Zusammenhang mit den granitoiden Intrusionen, im Süden (zwischen Todos Santos und El Triunfo) ist das Einfallen des mylonitischen s mittelsteil nach Osten, im Norden (östlich des El Novillo Komplexes) ist es steil. Schaaf et al. (2000) zeichnen die La Paz Fault an derselben Stelle, beschreiben sie aber als abschiebend, nach Westen fallend und in der Anlage känozoisch sowie mehrfach aktiviert. In der Karte ist eine sinistrale Lateral-Komponente eingetragen (vgl. Abb. 1.4).

In Sedlock et al. (1993) und Mitre-Salazar & Roldan-Quintana (1989) ist die La Paz Fault die Grenze des Pericu-Terranes nach Westen, ein Element, das subvertikal im Krustenmaßstab erkennbar ist und sich an der Oberfläche durch eine westfallende Abschiebung bemerkbar macht. Sie wird westlich des El Novillo Komplexes eingetragen und bedingt auch die tertiäre Graben- oder Halbgraben-Struktur westlich von La Paz. In Sedlock et al. (1993) sind auch die Mylonite, die Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) als die La Paz Fault bezeichnen, eingetragen; sie werden aber explizit nicht als La Paz Fault benannt (s. Abb. 1.5)



Abbildung 1.5: Profil durch das Pericu-Terrane im Krustenmaßstab (aus Sedlock et al. 1993, Fig. 15). Die gewellten Linien im 45°-Winkel von links oben sind die La Paz Fault von Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989.

Gneise von Punta Lobos

Die Gneise von Punta Lobos sind in Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) zusammen mit dem ,Todos Santos Marmor' und dem ,El Cardonozo - Phyllit' beschrieben (Lokationen siehe Abb. 2.1):

Der Gneis ist gebändert, dunkel grau-grün und zeigt reliktische Strukturen einer klastischen, geschichteten Sequenz. Er zeigt ein mylonitisches s, das flach nach NW einfällt und eine klare Lineation nach NW. Es werden ellipsoidale, in die Schierferung und mit der langen Achse in die Lineation eingeregelte Domänen beschrieben, die fraglich als Klasten (,guijarras' = wörtlich ,Kiesel') gedeutet werden. Diese Klasten sind gut im verwitterten Zustand zu erkennen, wogegen im frischen Bruch die Identifikation schwierig ist, weil die mineralogische Zusammensetzung der der Matrix entspricht. In einigen Lagen sind bis fünf Zentimeter messende Granat-Poikiloblasten, die teilweise retrograd durch Chlorit und Epidot ersetzt sind, erkennbar. Als primäre Paragenesen werden Qtz + Pl + Grt + (Zo oder Di+Scp oder Di+Kfs oder Cc) und Qtz + Pl + Hbl + (Kfs oderKfs+Bt oder Kfs+Ep) genannt. Akzessorisch kommen Turmalin, Titanit und Zirkon vor. Epidotwird als meist sekundär erkannt. (Übersetzt und zusammengefasst aus Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989).

Strukturell über den Gneisen von Punta Lobos folgt der Todos Santos Marmor, ein unreiner Marmor mit Lagen von 40 cm bis 2 m Mächtigkeit, der mit siliziklastischen Sedimenten verbunden ist und nach oben in den El Cardonozo – Phyllit übergeht.

Diese drei Einheiten werden in der Gegend um Todos Santos von Tonaliten (,Tonalita Buena Mujer') intrudiert. Im Zentrum dieses Tonalit-Vorkommens werden ultramafische Gesteine

beschrieben (,Gabro El Volcan'). Die Tonalite werden als konkordant mehrfach in Lagen in Metasedimente und Gneise intrudiert beschrieben.

Interpretiert werden diese Einheiten zusammen als ein sedimentärer siliziklastischer Komplex, generell feinkörnig (El Cardonozo Phyllit) mit kalkigen Einschaltungen (Todos Santos Marmor) und mächtigen mergeligen Lagen (Gneis Punta Lobos).

Migmatite der Sierra de la Gata

Im Bereich der Sierra de la Gata (s. Abb. 2.1) beschreiben Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1995) einen Komplex von Metasedimenten, deren metamorpher Grad von Osten nach Westen ansteigt. In Aufschlüssen vom Strand am Golf von Kalifornien bis zum Scheitel des Gebirges ist die Abfolge And – And+Sil – Sil+Bt+Kfs zu beobachten mit steigendem Volumenanteil von Diatexiten bis hin zu nebulitischen Strukturen. Westlich der Passhöhe ist ein großer granitoider Körper mit Or>Pl>Qz>>Bt+Ms+Grt aufgeschlossen, der als Diatexit interpretiert wird. Dieser Körper wurde auch von Schaaf et al. (2000) bearbeitet und die Granate auf 118±12 Ma datiert.

1.3 Ziel dieser Arbeit, Vorgehen

Ziel war, die geologische Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes im Bezug auf Metamorphose und Plutonismus zu klären. Dazu wurden folgende Untersuchungen durchgeführt:

- Detailkartierungen M. 1:25.000 und Profilaufnahmen in den Gebieten Todos Santos/Punta Lobos, El Cardonozo/Rancho La Muela, El Triunfo/San Antonio, El Salto/El Novillo, Sierra de la Gata/Bahia de Muertos, Sierra de la Gata/Boca de Alamo, Boca de la Sierra, sowie Übersichtskartierungen.
- Bestimmung der Folge der Metamorphose- und Intrusionsereignisse (Geländebeobachtungen, Bezug zu Altersdatierungen),
- Bestimmung des Feldgradienten der metamorphen Zonenfolge an Indexmineralen,
- Rechnergestützte Modellierung von Phasenbeziehungen im Pelit- und Karbonat- System, um beobachtete Reaktionen quantitativ belegen zu können,
- pT-Pfade ermittelt an Einzelproben,
- Bezug der metamorphen Isograden zur strukturellen Entwicklung der Schieferung und zu Scherzonen,
- neue Mineralabkühlalter im Bezug zu publizierten Kristallisationsaltern,
- Diskussion der Stellung des Plutonismus zu Deformation und Metamorphose,
- Diskussion der Einordnung in den regionalen Kontext (Terrane-Konzept, Peninsular Ranges).

Die Erklärung der spezifischen tektonischen Situation und der metamorphen Entwicklung wird durch Vergleich der Daten mit semi-quantitativen Modellen für hT/IP-Metamorphose belegt. Die Einordnung in die tektonische Entwicklung Mexikos und der westlichen nordamerikanischen Kordillere erfolgt über die Betrachtung der geochemischen Daten und Altersdatierungen. Durch Analogien von Strukturen, metamorpher Entwicklung und Parallelisierung von Lithologien wird die Zuordnung zu den Peninsular Ranges Kaliforniens und Baja California Nords erreicht.

Die petrologischen, geothermobarometrischen und strukturellen Untersuchungen wurden am Institut für Mineralogie, Petrologie und Geochemie der Ludwig-Maximilians-Universität München (IMPG) durchgeführt. Isotopische Analysen für Altersdatierungen wurden in Zusammenarbeit mit dem Labor für Geochronologie des IMPG, dem Instituto de Geofisica, UNAM, Mexiko-City (Dr. Peter Schaaf) und dem Bayerischen Geologischen Landesamt durchgeführt. Dabei standen insbesondere sehr genau die Probenlokationen zu den publizierten Altersdaten zur Verfügung, so dass eine gute Einordnung auch im Bezug auf die Bestimmung der Kontrolle von metamorphen Isograden durch Pluton-Grenzen erreicht wurde.

2 Bearbeitete Einheiten

Die bearbeiteten Einheiten werden nach zusammenhängenden Bereichen gegliedert besprochen. Es hat sich als günstig erwiesen, einzelne Profile mit Ihren markanten strukturellen, lithologischen und metamorphen Merkmalen einzeln zu beschreiben und dann in einer Übersicht zusammenzufassen. So kann mit jedem Profilschnitt ein spezielles Charakteristikum des Baues des Kristallinkomplexes diskutiert werden.

Das Arbeitsgebiet wurde dazu in vier westliche und zwei östliche Bereiche aufgegliedert: Todos Santos / La Muela / Las Palomas (2.2), El Triunfo (2.3), El Novillo (2.4) bilden zusammen die westlichen Bereiche. Sierra de La Gata (2.5) und Boca de la Sierra (2.6) bilden zusammen die östlichen Bereiche ab. Lokationen siehe Übersichtskarte in Abbildung 2.1.



2.1 Geologische Übersichtskarte

Abbildung 2.1: Übersichtskarte La Paz Kristallinkomplex, M. ca. 1:250.000, mit Lage der Profile. UTM-Koordinaten der Zone 12Q.

2.2 Profile Todos Santos und La Muela/Las Palomas

Ein metasedimentärer Komplex lagert auf Meta-Vulkaniten. Niederdruck-Meatmorphose und Kontakt-Metasomatose durch die Intrusiva haben am Kontakt Vulkanit/Kalkstein eine imposante Alterationszone mit bunter Mineralogie entstehen lassen. Zum Hangenden wird eine siliziklastische Sequenz beobachtet.

2.2.1 Profil Todos Santos: Gneise von Punta Lobos – Metasedimente El Cardonozo

Gneis Punta Lobos (Lithologische Einheit 1 und 2 des Profilschnittes)

Im Abschnitt 1.2.3 wurde die Interpretation der metasedimentären Einheit durch Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) vorgestellt. Die Gneise von Punta Lobos werden darin als komplett metasedimentär interpretiert. Beaobachtete Paragenesen waren Qtz + Pl + Grt + (Zo oder Di+Scp oder Di+Kfs oder Cc) und Qtz + Pl + Hbl + (Kfs oder Kfs+Bt oder Kfs+Ep).

Probenpunkte [m ü. NN] 100 099 098 097 096 095 094 +2250 1 Δ Alteration 0 Gneise Punta Lobos -250 [Tonalit 'La Buena Mujer'] sf 344/14, 123/8 85/33 140/27 1 = 325/12. Top NW A' A

Profil Todos Santos, M(H+V) = 1:25.000, Profilrichtung 084°, AA' = 3,2 km

Abbildung 2.2: West-Ost - Profil im Maßstab 1:25.000 vom Gneis Punta Lobos bis zur metasedimentären Abfolge El Cardonozo. Anschluss nach Osten im Profil La Muela / Las Palomas.

Im Aufschluss an der Punta Lobos am Strand südwestlich von Todos Santos fallen die hell-dunkle Bänderung im dm- bis m – Maßstab auf. Das Gestein ist geschiefert (sf = 340/14), dicht und meist grünlich bis dunkelgrün-grau gefärbt. Auffallend sind ellipsoidale, stark in Richtung der Lineation (l-Tektonit, l = 322/12) gelängte helle Domänen (evtl. duktil deformierte Klasten?) mit viel Pl+Qtz+Kfs mit wenigen Hbl in einer Matrix desselben Mineralbestands mit modal mehr Hbl (Abb. 2.3).

Späte mafische Gänge von bis 1m Weite sind ebenfalls duktil mit deformiert (s. Abb. 2.4). Klüfte sind intensiv grün mit Ep mineralisiert. An einigen Stellen (Punta San Pedro) fallen große, poikiloblastische Granate (\emptyset bis 5 cm) auf. Die Matrix besteht hier vorwiegend aus Ep+Qtz+Pl (s. Abb. 2.5).

Kinematische Indikatoren (Druckschatten um Granate und Pl+Qtz+Kfs – Klasten) zeigen die Bewegungsrichtung des Hangenden nach NW (s. Abb. 2.18, Indikator a).



Abbildung 2.3: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – ellipsoidale, stark in Richtung der Lineation gelängte helle Domänen (evtl. duktil deformierte Klasten?).



Abbildung 2.4: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – späte mafische Gänge sind duktil mit deformiert.



Abbildung 2.5: Charakteristika der Gneise Punta Lobos – Alteration: "Nest' von Adr/Grs und Epidot.

Mineralbestand und identifizierte Reaktionen:

Die Probe 080b aus einer dunklen Lage des Gneises zeigt ein sehr feinkörniges Hornblende/Plagioklas-Quarz Pflaster, Hornblenden haben grüne Eigenfarbe und sind schwach pleochroitisch. Klinopyroxen kommt in Zwickeln oder in wenigen, größeren Körnern von bis 1mm Länge vor. Plagioklase sind Andesine (An₃₅₋₄₅), Hornblenden haben Si_T ~ 6,5-6,6; (Na+K)_A ~0,5 (mit der Mikrosonde bestimmt, siehe Anhang 8.2.4), liegen also nomenklatorisch etwa an der Grenze Hornblende s. str. und Tschermakit. Auf C-Plätzen wurde ein Ersatz von Al³⁺ durch Fe³⁺ von bis zu 0,45 Kationen errechnet (nach Schumacher 1997). Fe³⁺/[Al³⁺]⁶ ist aber nur an wenigen Messpunkten > 1 (,Hastingsit'), meistens zwischen 0,7 und 1. Fe²⁺/Fe²⁺+Mg²⁺ ist um 0,5. Akzessorisch kommen Titanit und Kalzit vor.

Die Proben 118a und b, ebenfalls aus einer dunklen Lage, weisen eine Bänderung im ca. 2 mm Bereich auf mit Hornblende-reicheren bzw. -ärmeren Lagen. Hier konnten zwei charakteristische Mineralreaktionen identifiziert werden:

Einige grüne-dunkelgrüne poikilitische Hornblenden haben reliktische Einschlüsse von Zoisit, die lobate Ausbildung der Korngrenze deutet auf eine Reaktion hin (s. Abb. 2.6). Die Hornblende hat einen flaschengrünen Anwachssaum und ist von hypidiomorphen Plagioklasen umgeben. Quarz und Plagioklas bilden die Matrix um das Korn. Hierzu kann folgende, für den Übergang Grünschieferfazies – Amphibolitfazies in Metabasiten kritische Reaktion formuliert werden:

(2-1) 4 Chl + 18 Zo + 21 Qtz = 5 TS-Hbl + 26 An + 20 H₂O (Bucher & Frey 1995, p. 268)

Epidot wird in einzelnen Körnern mit Erz verwachsen isoliert in der Matrix aus Pl+Qtz beobachtet, Chlorit wird nur noch als retrograde Bildung beobachtet. Plagioklase haben $\sim An_{40}$.

In Niedrigdruck-Amphiboliten kann diese Reaktion schon bei ca. 500°C ablaufen, bei 550°C sind Epidot und Chlorit typischerweise komplett verschwunden (Bucher & Frey 1995).



Abbildung 2.6: poikilitische Hornblende mit flaschengrünem Anwachssaum umwächst Epidot-Körner. Probe 118a, parallele Nickols (links), gekreuzte Nickols (rechts), Matrix PI+Qtz

Im selben Schliff kann an anderer Stelle die Bildung von Klinopyroxen beobachtet werden (Abb. 2.7), die für die nächst höhere Stufe der Amphibolitfazies charakteristisch ist:

(2-2) 1 TS-Hbl + 6 Zo + 3 Qtz = 10 An + 4 Di + 4 H₂O (Bucher & Frey 1995, p. 268)

Diese Bildung von Klinopyroxen kann schon bei Temperaturen unter 600°C erfolgen, für Mitteldruck-Serien erst ab ca. 650°C.



Abbildung 2.7: Bildung von Cpx (hohe Interferenzfarben und hohes Relief) und PI (gut zu sehen im rechten Bild etwas rechts oberhalb der Bildmitte) nach HbI (grüne Eigenfarbe im linken Bild). Probe 118a, parallele Nickols (links), gekreuzte Nickols (rechts).

Im ACF-Diagramm kann dieser Ablauf wie in Abbildung 2.8 dargestellt werden.

Nach Bucher & Frey 1995, p. 280 ist das Fehlen von Granat (Prp) typisch für Niedrigdruck-Amphibolite. Die frühe Bildung von Cpx (Ep ist noch im Gestein vorhanden!) weist ebenfalls auf eine Niederdruck-Entwicklung hin.



Abbildung 2.8: ACF Diagramme zur Darstellung der progressiven Metamorphose in Metabasiten (nach Bucher & Frey 1995). Oben Ausgangssituation am Übergang Grünschiefer-/Amphibolitfazies (Ep neben Chl), Mitte Bildung von Hbl nach Rkt. (2-1), Unten Bildung von Cpx nach Rkt. (2-2). Bei jeder dieser Reaktionen wird stöchiometrisch auch viel An-Komponente gebildet.

Die Probe 080a aus einer helleren Lage mit bis ca. 2 mm großen Granaten ist stark alteriert. Poikiloblastische Granate ($Grs_{20-30} - Adr_{70-80}$) sind im Dünnschliff fast bräunlich und eng und unregelmäßig mit Klinopyroxen (ca. $Di_{50} - Hed_{50}$), Skapolith (Me_{66}) und Epidot/Klinozoisit (Ep_{25-30}) verwachsen (s. Abb. 2.9). Diese Aggregate bilden eine Bänderung mit 1-2 mm breiten Lagen, sehr ähnlich den Proben 118 a und b. Die Matrix besteht aus Quarz, Plagioklas (An_{25-30}) und Alkalifeldspat. Es wird wenig Kalzit beobachtet. Akzessorisch kommen Titanit, Turmalin und Zirkon vor. Minerale aus dieser Probe wurden mit der Mikrosonde analysiert.



Abbildung 2.9: Paragenese Epidot (hohes Relief, grün-braune Eigenfarbe, etwa in der Bildmitte), Andradit/Grossular und Klinopyroxen (hohe Interferenzfarbe und Relief, oben Mitte rechts). Probe 080a, parallele Nickols (links), gekreuzte Nickols (rechts).

Die Genese der Granate (Adr₇₀₋₈₀) ist nicht einfach durch progressive Metamorphose von Basiten (s. o.) erklärbar – dabei müsste sich als Granat Pyrop/Almandin bilden (s. Abb. 2.10 – ACF Diagramm). Eher kann man eine (Kontakt-)Metasomatose in Betracht ziehen, wobei zu erklären ist, ob der Granat durch Zufuhr von Fe³⁺ in unreinen Karbonaten (eine Skarn-ähnliche Bildung), oder durch Zufuhr von Ca²⁺ in den Metabasiten (ähnlich der Rodingit-Genese) entsteht. Dadurch würde sich im ACF-Diagramm für Basite der Gesamtgesteins-Chemismus zum C-Apex hin verschieben – die Paragenesen mit Adr/Grs links der Konode Ep/Zo – Cpx würden möglich.

Folgende Beobachtungen unterstützen die zweite Möglichkeit:

- die Schieferung in den Proben 118a und 080a ist sehr ähnlich ca. 1-2 mm breite helle Pl-Qtz-(Kfs) Bänder wechseln sich mit schmalen Lagen mit dunklen Mineralen (Hbl+Ep/Czo oder Grt+Di+Ep/Czo) ab,
- f
 ür die Bildung der Hedenbergit-Komponente wird Fe²⁺ ben
 ötigt einem karbonatischen Gestein m
 üsste man also Eisen in beiden Oxidationsstufen gleichzeitig zuf
 ühren,
- Granat ist eng und unregelmäßig mit Cpx und Ep/Czo verwachsen Kalzit wird nicht in Paragenese mit Adr (+ Qtz) beobachtet, die Bildung aus CaCO₃ + Fe₂O₃ + SiO₂ ist daher fraglich.



Abbildung 2.10: ACF-Diagramm mit Paragenesen der Probe 080a.

Die Reaktion Adr + 2 Czo = Grs + 2 Ep kann als Geothermometer verwendet werden (Heuss-Aßbichler & Fehr 1997). Dies wird in Abschnitt 5.1 besprochen.

Interpretiert werden die Gneise von Punta Lobos zusammenfassend als ein Komplex von Metabasiten, der in geschonten Partien noch Amphibolit-Charakter zeigt (Probe 118a), während er im Kontakt mit dem darüberliegenden Marmor ("Marmor von Todos Santos", Probe 080a) stark metasomatisch verändert wurde. Die unregelmäßige Bänderung im dm- bis m- Maßstab erklärt sich als Materialunterschied im Protolithen entweder durch Umlagerung bei der Entstehung oder dadurch, dass zumindest Teile des Kopmlexes eine gering transportierte vulkanosedimentäre Abfolge darstellen (mit einzelnen groben Klasten, die nun duktil deformiert als gelängte Ellipsoide vorliegen).

Um die vorgestellten Alterationen hervorzubringen, wäre eine flache Intrusion unterhalb der Gneise am effektivsten. Intrusiva können unter den Gneisen nicht belegt werden, passen aber gut in den regionalen Kontext (siehe geologische Übersichtskarte Abb. 2.1). Besonders wirkungsvoll für Wärmetransport und Alteration des vulkanosedimentären Komplexes sind hydrothermale Konvektionszellen (De Yoreo et al. 1991).

Marmor Todos Santos (Lithologische Einheit 3 des Profilschnittes)

Der Marmor kommt nur in boudinierten Lagen von dm bis ca. zwei Meter Mächtigkeit in Glimmerschiefern vor (s. Abb 2.11). Am Kontakt zum siliziklastischen Sediment sind oft monomineralische Säume von sehr großen Vesuvian-XX entwickelt. Paragenesen sind Ves+Grs/Adr+Pl+Cpx±Scp±Qtz±Cal, reiner Kalzit-Marmor ist auf schmale Bereiche im Kern der Marmor-Boudins beschränkt.

Die Boudinage bedingt lokal im Aufschluss ein Umbiegen der Schieferung, die generell in Profilrichtung nach E immer steiler einfällt; von 123/8 ca. 1 km E der Punta Lobos auf 85/33 etwa 2 km E. Kinematische Indikatoren zeigen weiter Top nach NW bzw. aufschiebend gerichtete Bewegung.

Der Marmor von Todos Santos geht nach oben in einen immer reineren Glimmerschiefer über, man beobachtet noch einzelne Karbonat-Lagen und mergelige Schichten (lith. Einheit 4 des Profilschnittes).



Abbildung 2.11: Marmor von Todos Santos – boudinierte, hier ca. 50 cm mächtige Lagen mit Reaktionssaum zum Glimmerschiefer (rot-braune Färbung).

2.2.2 Profil La Muela/Las Palomas: Metapelite/psammite La Muela

Glimmerschiefer ,El Cardonozo'

Der 'Filita El Cardonozo' wird von Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) als pelitischpsammitischer metasedimentärer Komplex beschrieben. Östlich des "Milonita Canada el Oreganal' trete ein extrem feinkörniger Phyllit auf (im Profil Abb. 2.14 östlich des projizierten "Granodiorit-Mylonit'-Körpers). Andalusit-Porphyroblasten, die teilweise (vor allem im östlichen Teil des Profils) deformiert sind, sind das vorherrschende, im Aufschluss auffällige metamorphe Mineral neben Biotit.

Aus den detaillierten Profilaufnahmen dieser Arbeit in mehreren etwa Ost-West verlaufenden Trockentälern (,El Salado', ,Las Palomas', ,La Muela', ,El Pamerito', ,El Rosario', ,El Triunfo' von Süd nach Nord, Lokationen siehe Übersichtskarte, Abb. 2.1) war es möglich, ein Säulenprofil der sedimentären Abfolge zu konstruieren (Abb 2.15). Die Mächtigkeiten werden wohl durch die vorhandene W-vergente enge bis isoklinale Verfaltung im Aufschlussmaßstab überschätzt, es konnten aber nur im Norden (siehe Profil ,El Triunfo') verfaltete lagenparallel intrudierte Granodiorite als Marker für eine Konstruktion der Faltung im Kartenmaßstab benutzt werden.

Zusammen mit dem Marmor von Todos Santos, der zum Hangenden hin in die Glimmerschiefer übergeht, wurden im Säulenprofil drei große Einheiten ausgehalten, die aus 16 einzelnen, feiner gegliederten Einheiten zusammen gruppiert wurden. In der unteren Einheit werden gelegentlich karbonatische Einschaltungen (als boudinierte Karbonat-Linsen) beobachet, sie umfasst mit den Einheiten 3 - 11 auch reine Pelite und Psammite. Die mittlere Abfolge (aus den Einheiten 13 - 15 gebildet) zeigt eine rein pelitisch-psammitische Wechsellagerung, wobei die gröberen Sedimente vorherrschen, darüber folgen wieder sehr feinkörnige Lagen mit sehr viel Alumosilikat (Einheit 16), bei der auch Korngrößenreduktion durch Deformation beobachtet wird (Bezeichnungen der Einheiten sind in den Profilen Todos Santos Abb. 2.2, La Muela/Las Palomas Abb. 2.14 und El Triunfo Abb. 2.16 sowie im Säulenprofil Abb. 2.15 gleich gewählt, so dass sie leicht parallelisiert werden können).

Sedimentäre Eigenschaften

Interessant sind vor allem Beobachtungen an den gröber klastischen Einheiten 13 und 15 (s. Profil Abb. 2.14 und Säulenprofil Abb. 2.15). Hier können ein "fining-upwards" in den Qtz-reicheren Bänken und "load-casts" und gelegentlich syn-sedimentäre kleine Abschiebungen beobachtet werden (s. Abb. 2.12). Korngrößenabfolgen des Sediments, die für einen Ablagerungsraum charakteristisch wären, können Aufgrund der metamorphen Überprägung nicht mehr zuverlässig bestimmt werden – die gezeigten "fining-upwards" – Sequenzen kommen nur an wenigen Stellen so vor.



Abbildung 2.12: pelitisch/psammitische Wechsellagerung mit syn-sedimentären Abschiebungen (auffällig von rechts oben ca. im 30°-Winkel nach links unten, die unterste ca. 10 cm mächtige Bank wird nicht versetzt), ein Peso etwas rechts der Bildmitte als Maßstab, Einheit 13 des Profils.

Für eine Probe (076, ein Pelit mit modal > 50% Glimmer) aus dem Komplex wurde die Gesamtgesteinschemie bestimmt (s. Tabelle 2.1). Im Vergleich mit Durchschnitts - Analysen (Carmichael 1989) von vergleichbaren klastischen Sedimenten und Metamorphiten fällt auf, dass der SiO₂ – Gehalt sehr hoch ist (68%), die Gehalte an Alkalien und Erdalkalien aber relativ niedrig sind.

	Carmichael (19	La Muela			
	Shales	Shales	Greywacke	Mica-schist	076
	(geosyncl.)	(platform)			
SiO2	58,9	50,7	66,7	64,3	68,73
TiO2	0,78	0,78	0,6	1,0	0,85
AI2O3	16,7	15,1	13,5	17,5	14,92
Fe2O3	2,8	4,4	1,6	2,1	6,32
FeO	3,7	2,1	3,5	4,6	-
MnO	0,09	0,08	0,1	0,1	0,06
MgO	2,6	3,3	2,1	2,7	1,43
CaO	2,2	7,2	2,5	1,9	1,08
Na2O	1,6	0,8	2,9	1,9	1,95
K2O	3,6	3,5	2,0	3,7	1,65

Tabelle 2.1: Gesamtgesteinschemie der Probe 076 aus dem Profil La Muela/LasPalomas im Vergleich mit Analysen von Sediment-Gesteinen aus möglichen ähnlichen Ablagerungsräumen.

Gesteinschemie und sedimentäre Merkmale lassen einen vorsichtigen Schluss auf einen relativ distalen, aber stark klastisch beeinflussten dynamischen Ablagerungsraum zu.

Metamorphe Charakteristika

Die vorherrschende Paragenese in den feinkörnigen Sequenzen, auch in den feineren Lagen von psammitischen Abfolgen mit ,fining-upwards', ist Bt+Qtz+Pl±And±Ms. Aus einem schmalen Band (Probe 076, Lokation siehe Profil Abb. 2.14) wurden Handstücke mit Granat-Porphyroblasten beprobt, an Ihnen wurde die Mineralchemie mit der Mikrosonde bestimmt: Bt_{An68}+Qtz+Pl_{An28}+And+Grt_{Alm75Prp08Sp17}. AFM-Darstellung der Paragenese und Bulk-Chemismus in Abbildung 2.13.



Abbildung 2.13: AFM-Diagramm der Paragenese Bt+Grt+And(+Qtz+Ms+H₂O)(+PI) in Probe 076. ,Bulk 076' ist die Gesamtgesteinschemie der Probe)

Die Austauschreaktion Ann + Prp = Phl + Alm eignet sich als Geothermometer, in Paragenese mit Pl auch für eine Druck-Abschätzung. Dies wird in Abschnitt 3.2.5 detailliert besprochen.

Der Tonalit ,La Buena Mujer' und der Granodiorit-Mylonit ,Canada el Oreganal' haben Kontaktaureolen ausgebildet (Darstellung im Profil Abb. 2.14). Hier ist vor allem die Reaktion

(2-3) And = Sil

zu beobachten. Andalusit-Körner sind randlich in Sillimanit umgewandelt, der meist in feinen Fasern ("Fibrolith') im Aggregat mit Ms vorkommt, aber auch massiv kristallisiert mit Körnern bis 0,1 mm. Der Sillimanit richtet sich mit der kristallographischen C-Achse dann parallel zur C-Achse des vorhandenen Andalusits aus, im Schliff beobachtet man die deutliche Spaltbarkeit im 45° Winkel zur Spaltbarkeit 90° des Andalusits. Weitere metamorphe Reaktionen werden im Zusammenhang mit den Profilen El Triunfo und La Gata besprochen.

Merkmale der Deformation

Metapelite und Metapsammite sind eng bis isoklinal mit im Meter- bis Zehner-Meter - Bereich liegenden Wellenlängen beobachtbar verfaltet. Eine langwelligere Verfaltung, für die die beobachteten Falten möglicherweise Parasitär-Strukturen sind, konnte im Bereich La Muela / Las Palomas nicht nachgewiesen werden, ist aber wahrscheinlich.

Die Schieferung hat im Bereich La Muela / Las Palomas im Mittel die Orientierung 115/38, Lineationen fallen meist mittelsteil nach SE - SSE ein.

Die ausgebildeten Falten sind Biegescherfalten, d. h. man beobachtet einerseits nahe Faltenkernen eine scheinbare Verdickung der Schichten, andererseits sind durch Kompetenzunterschiede der pelitischen und psammitischen Lagen disharmonische asymmetrische Kleinfalten zu beobachten (siehe Abb. 2.18 Indikator b). Die Orientierung dieser Kleinfalten-Achsen wurde als kinematischer Indikator benutzt, um die Bewegung von hangendem und liegendem Block des Metasedimentkomplexes relativ zueinander zu konstruieren (nach Eisbacher 1991). Ergebnis ist auch hier aufschiebende und links-laterale Bewegung.

Häufig werden als späteres Verfomungsereignis spröde Abschiebungen mit Versätzen im Bereich einiger Meter beobachtet, Kataklasezonen sind dicht grünlich mineralisiert. Einfallen ist generell steil nach E.

2.2.3 Säulenprofil des gesamten metasedimentären Komplexes

Aus dem Profil der Abbildung 2.14 wurde unter Annahme eines mittleren Einfallens ein Säulenprofil konstruiert (Abbildung 2.15). Die echte Mächtigkeit der sedimentären Abfolge ist durch die Verfaltung nicht zu konstruieren, wird aber auf > 800 m geschätzt.






Abbildung 2.15: Säulenprofil des gesamten metasedimentären Komplexes

2.3 Profil El Triunfo

Anatomie einer mächtigen duktilen Scherzone, die unterschiedliche Lithologien erfasst.

2.3.1 Profil El Triunfo

Im Profil El Triunfo finden sich im wesentlichen die Einheiten des Profils La Muela / Las Palomas wieder – das Profil liegt parallel zum Streichen der Schieferung ca. 15 km weiter nördlich. Die basale und die hangende Einheit bilden wieder die deformierten Tonalite / Granodiorite, sie sind deutlich mylonitisiert. Die Grenze des Metasedimentkomplexes zu diesen Magmatiten lässt sich über die gesamte Strecke aus dem Süden von La Muela nach El Triunfo verfolgen (s. Übersichtskarte Abb. 2.1). Auch die im Säulenprofil (Abb. 2.15) höchste Einheit 16 (sedimentär sehr homogene, feinkörnige Pelite) lässt sich noch ausmachen – die Deformation hat hier die Korngrößen reduziert, das Gestein wurde im Gelände als Phyllonit angesprochen. Die Einheiten 2 bis 4 (Marmor und Mergelige Lagen) wurden nicht mehr beobachtet, Karbonate tauchen aber strukturell unter den hier liegenden Tonaliten wieder im Profil El Novillo (Abschnitt 2.4) auf. Die Einheiten 5-15 konnten nicht mehr ausgegliedert werden.

Der Anteil der (deformierten) Granodiorite, die den Metasediment-Stapel etwa lagenparallel intrudieren, hat sich auf ca. 70 % erhöht – d. h. in Karte und Profil treten die Metasedimente nun in Lagen zwischen den Magmatiten auf. Entsprechend hat sich auch der metamorphe Grad von Süden nach Norden erhöht – Sillimanit ersetzt Andalusit als Alumosililkat, Crd+Kfs – Paragenesen tauchen auf, Migmatite werden beobachtet. Diese sehr kleinräumige metamorphe Zonenfolge ist ebenfalls in der Karte mit Isograden von Index-Mineralien ausgehalten (s. Abb. 2.17 und die Disukssion in 2.3.3).



Abbildung 2.16: Profil M. 1:25.000 durch den Überschiebungskomplex El Triunfo



Abbildung 2.17: Karte M. 1:50.000 des Gebietes El Triunfo

2.3.2 Strukturelle Merkmale: Anatomie der Scherzone El Triunfo

Im Profil El Triunfo können (mit Projektion einiger Lokationen auf die Profilebene) sehr schön die Merkmale der Verformung dargestellt werden. Dazu wurden in Abbildung 2.18 das Profil und die für die jeweilige Position in der Scherzone charakteristischen Strukturen (Dünnschliff-, Handstück- und Aufschlussmaßstab) zusammen abgebildet. Alle Bilder wurden dem einheitlichen Bewegungssinn Top nach W und aufschlebend entsprechend orientiert. Bildflächen sind senkrecht zur Schieferung und parallel zur Lineation aufgenommen.

In der strukturell niedrigsten Einheit, den Gneisen von Punta Lobos, bilden die Qtz/Fsp-Porphyroklasten kinematische Indikatoren durch Druckschatten aus (σ -Klast, Abb. 2.18 a, von relativ weit südlich projiziert).

In der Abfolge La Muela / Las Palomas, wo noch keine partielle Aufschmelzung beobachtet wird, sind in Metapeliten/psammiten asymmetrische Kleinfalten durch Kompetenzkontrast ausgebildet (Abb. 2.18 b, schematisch in 2.18 c dargestellt). Die Asymmetrie stellt wieder einen kinematischen Indikator dar, wenn spätere Rotation/Überkippung ausgeschlossen werden kann. Die Orientierung der Kleinfaltenachsen kann in der stereographischen Projektion geplottet werden und wurde als Bewegungsindikator verwendet (Abb. 2.19 b). Im Aufschluss sind ca. 20 m unterhalb der Überschiebungsbahn der hangenden Granodiorite Schleppfalten ausgebildet (Abb. 2.18 d, Wellenlänge der Kleinfalten ca. 50 cm). Auch sie zeigen über Ihre Vergenz und Asymmetrie die Bewegungsrichtung an (schematisch in 2.18 c).

Im Profil El Triunfo sind von Westen nach Osten Mikro - Strukturen von Ortho-Myloniten abgebildet. Abbildung 2.18 e zeigt einen relativ mild deformierten Tonalit (-Protomylonit). Quarze (im Bild rechts oben) zeigen Subkornbildung, das Gefüge ist Pl-gestützt, diese ca. 1 mm großen Körner zeigen Verbiegung und randliche Rekristallisation. Probe 036, Lokation in der Karte Abb. 2.17.

Im Granodiorit-Mylonit 2.18 f sind die Feldspäte randlich rekristallisiert, Quarz-Linsen sind komplett rekristallisiert, 120° Korngrenzen weisen auf eine Temperung hin. Feldspäte werden von Glimmer-Bahnen umflossen und sind teilweise rotiert. Probe 037, Lokation in der Karte Abb. 2.17.

2.18 g zeigt einen Ultra-Mylonit (unterschiedlicher Maßstab zu e und f!). Alle Körner sind rekristallisiert, Korngrößen im Vergleich zu e und f stark reduziert. In der Bildmitte (Pfeil) ist ein reliktischer Plagioklas (\emptyset ca. 50 µm) zu erkennen. Probe 061, Lokation südlich des Kartenausschnittes in Abb. 2.17 auf das Profil projiziert.

2.18 h zeigt einen Metapelit, der ebenfalls fein rekristallisiert ist (im linken Bereich über dem Maßstabsbalken eine Domäne von rekristallisiertem Qtz). Der Prophroblast ist Andalusit, er zeigt eine zweifache Entwicklung: das erste, klare Korn ist deformiert und in die Schieferung eingeregelt (erkennbar die Einschluss-Spuren des Chiastoliths parallel und senkrecht zur Schieferung). Darüber ist achsenparallel ein idiomorphes Korn gewachsen, das auch die Schieferung überwächst. Probe 167, Lokation in der Karte Abb. 2.17.

Die Hangenden Tonalite/Granodiorite sind ähnlich deformiert wie die Liegenden (Bild 2.18 e). Hier wurden kataklastische kleine Abschiebungen beobachtet, das Gestein ist zerbrochen, Bruchzonen sind fein mit Chlorit mineralisiert.

Insgesamt ergibt sich ein Bild einer breiten Schwächezone, innerhalb der Mylonite in mehreren Bahnen ausgebildet sind. Die im Profil El Triunfo als ,Liegend' bezeichneten Tonalite sind nicht die strukturell niedrigste Einheit dieser Zone, starke Deformation wird auch im strukturell darunter liegenden Profil El Novillo und in den Gneisen von Punta Lobos beobachtet. Es werden verschiedene Gesteinseinheiten hochtemperiert deformiert (Rekristallisation der Feldspäte). Der Zusammenhang mit metamorphen Ereignissen wird an der Zonierung der Porphyroklasten deutlich (erster Andalusit in Schieferung eingeregelt, zweite Generation überwächst Schieferung). Dass Andalusit statt Sillimanit gebildet wird, weist auf hohe thermische Gradienten hin (vgl. Rekristallisation der Feldspäte).



Abbildung 2.18 (vorherige Seite): Strukturmerkmale der Scherzone an Beispielen, relative Positionen schematisch eingetragen im W – E Profil El Triunfo. Erläuterung im Text.

Zur Verdeutlichung des strukturellen Baues wurden in Abbildung 2.19 stereographische Projektionen so angeordnet, dass der generelle Trend – steiler werdende Haupt-Schieferung von Süden nach Norden, umbiegen der Schieferungsrichtung im Norden des Gebietes leicht nach Osten, konsistente Kinematik Top nach NW, aufschiebend und sinistral – gut erkennbar wird. Dazu wurden Orientierungen der penetrativen Hauptschieferung, Minerallineationen, Faltenachsen von Kleinfalten und kinematische Indikatoren zusammen in vier unterschiedlichen Bereichen von Süd nach Nord parallel zum Streichen der Struktur angeordnet dargestellt.

Im Profil Todos Santos liegt die penetrative Hauptschieferung flach bis leicht nach SE einfallend, Lineationen sind flach nach NW orientiert, kinematische Indikatoren zeigen Top nach NW und aufschiebend an (s. Abb. 2.18 a).

Im Bereich La Muela / Las Palomas beobachtet man generell ein etwas steileres Einfallen der Schieferung nach SE, Faltenachsen von Kleinfalten fallen flach bis mittelsteil nach SSE oder flach nach NE ein, Lineationen auf Schieferungsflächen sind meist etwas steiler. Die geringe Streuung des Einfallens der Hauptschieferung spricht für eine sehr enge bis isoklinale Verfaltung, für die die Schieferung die Achsenschieferung darstellt. Schersinne von Kleinfalten-Achsen wurden als kinematische Indikatoren benutzt (siehe Abb. 2.18 b, c, d und 2.19 b).

Im Profil El Triunfo steht die Schieferung von Glimmerschiefern und mylonitisches s von Orthomyloniten parallel und fällt wieder etwas steiler ein, ca. 60° nach ESE. Lineationen sind hier allgemein steil.

Im Bereich El Novillo steht die Schieferung steil und ist um ca. 20° Richtung Osten rotiert. Lineationen sind entweder flach oder steil, wenn ein Schersinn z. B. durch s-c Gefüge oder rotierte Porphyroklasten beobachtet wird, wird immer aufschiebend (für steile Lineationen) oder links-lateral (für flache Lineationen) gemessen.



Abbildung 2.19: Zusammenstellung von Strukturdaten für den westlichen Arbeitsbereich. Erläuterung im Text.

2.3.3 Metamorphe Merkmale: der Übergang von Glimmerschiefern zu Migmatiten

Verfolgt man den metasedimentären Komplex parallel zum Streichen der Schieferung von Süd (Profil La Muela / Las Palomas) nach Nord (Profil El Triunfo), so kann man zunächst kaum Veränderung beobachten (einige Horizonte mit günstiger Bulk-Chemie enthalten Granat, ansonsten herrscht Andalusit als Indexmineral vor). Im Bereich der Karte El Triunfo lassen sich aber engständige metamorphe Isograden und das Einsetzen der partiellen Anatexis kartieren.

Nachdem Andalusit als Alumosilikat fast überall in den Metapeliten vorhanden ist, kann nach den Indexmineralen (Mineralparagenesen) Sillimanit und (Cordierit+) Kalifeldspat unterschieden werden. Im Aufschluss wurde das Vorhandensein von Qtz+Fsp - Leukosom als Anzeichen für teilweises Aufschmelzen aufgenommen.

Eine genauere Besprechung der zugehörigen Reaktionen und Einordnung im petrogenetischen Netz folgt in Kapitel vier. In der Karte El Triunfo (Abb. 2.17) sind die Isograden And=Sil, der Beginn der Anatexis und einzelne Lokationen mit Crd+Kfs abgebildet.

Die kartierbaren Isograden sind sehr engständig und unregelmässig. Die Isograde And = Sil und das Einsetzen der Anatexis können praktisch nicht unterschieden werden. Im südlichen Bereich der Karte findet man Zonen der Anatexis, die anscheinend strukturell kontrolliert sind. Hier werden verfaltete Leukosome in Metapeliten in einem Sattelkern beobachtet, geht man senkrecht zum Streichen über den Faltenschenkel nach Osten, folgen sofort Glimmerschiefer mit Andalusit, ohne dass ein Störungshorizont kartiert werden konnte (s. Abb. 2.20, Ausschnitt aus Karte El Triunfo). Hangende und Liegende Einheit dieser Migmatite sind lagenparallel intrudierte, deformierte Granodiorite.



Abbildung 2.20: Ausschnitt aus der Karte El Triunfo 1:50.000; kleinräumige, strukturell kontrollierte Zone der partiellen Anatexis in Metapeliten.

In den sehr feinkrönig rekristallisierten Glimmerschiefern (graue Signatur) beobachtet man etwa in der Kartenmitte (Lokationen 167, 168 und 170 in Abb. 2.17), dass Andalusit in zwei Generationen wächst (siehe Diskussion in 2.3.2), zwischen denen intensive Verformung stattfand.

Ein Versatz der Isograden durch die Bewegung an der Scherzone konnte nur in einem Fall herausgearbeitet werden. Das Einsetzen der Anatexis in der Einheit der "Phyllonite" ist gegenüber den westlicheren Metapelit-Einheiten um ca. 2 km nach Norden verschoben – dieser Versatz stimmt mit dem Bewegungssinn der Scherzone in den "Phylloniten" in etwa überein (aufschiebend und linkshändig, s. Abb. 2.17, gestrichelte Isograde And=Sil und Übersignatur partielle Anatexis).

2.3.4 Orthogneise w. El Triunfo

Eine Besonderheit sind die westlich der Ortschaft auftauchenden Orthogneise. Sie weisen ein verfaltetes mylonitisches s auf (s. Abb. 2.21 und 2.22) und werden deshalb als ältere Einheit

eingestuft, die nicht zum bisher besprochenen Metasediment-Komplex gehören, sondern durch Aufschiebung diesem hier gegenübergestellt sind.

In den Orthogneisen definiert die Ebene der Faltenachsen, die s_1 verfalten, eine weitständige Schieferung s_2 . Die konstriuerte Faltenachse (158/11) und die Schieferungen s_1 und s_2 stehen anscheinend in keiner Beziehung zur jüngeren Verfaltung in den Metasedimenten von La Muela / Las Palomas / El Triunfo. Eine eventuell langwelligere Verfaltung in dieser Orientierung konnte jedoch nicht nachgewiesen werden.



Abbildung 2.21: verfaltetes mylonitisches s in Orthogneisen SW El Triunfo



Abbildung 2.22: Stereographische Projektion von Strukturdaten der Orthogneise

2.4 Profil El Novillo

Ein mächtiger Gabbronorit-Körper als Rampe für die duktile Aufschiebung.

Im Profil El Novillo kommt eine neue lithologische Einheit vor – ein mächtiger Gabbronorit-Körper von ca. 15 x 5 km wird an seinem südlichen Ende erfasst (s. Übersichtskarte Abb 2.1). Das Gebiet wurde von Riewe (1998) im Rahmen einer Diplomarbeit bearbeitet.

Der Gabbronorit hat eine hellere, differenzierte Randfazies und wird intrudiert von Dioriten, Tonaliten und Quarzdioriten, die im Kern der Intrusion einen Körper von alterierten ultramafischen Kumulaten (Hornblende-Pyroxenite, Hornblendite) aufweisen. Für dieses Intrusiv konnte eine Zonierung und Differenzierung nachgeweisen werden (s. Profil Abb. 2.23, Abfolge Kumulate – Diorite - Qtz-Diorite – Tonalite) – "El Salto' Intrusiv von Riewe (1998). In den Tonaliten kommen als wenige Meter breite Nebengesteinsschollen Metapelite, Amphibolite und Marmore vor, letztere bilden am Kontakt zum Intrusiv kontaktmetamorphe Kalksilikatfelse aus. Diese Tonalite werden mit denen der Profile Las Palomas/La Muela und Todos Santos parallelisiert (siehe Übersichtskarte Abb. 2.1) Mit dem "Los Divisaderos' – Intrusiv beschreibt Riewe (1998) den jüngsten, undeformierten Intrusivkomplex von Granodioriten und Quarz-Monzodioriten. Pegmatite dieses Intrusivs durchschlagen sowohl die El Novillo Gabbronorite als auch die El Salto Tonalite.

Das El Salto Intrusiv weist eine Schieferung auf, die abhängig vom modalen Qtz-Gehalt der verformten Gesteine stärker ausgeprägt ist – in den Hornblende-Pyroxeniten kann noch das magmatische Layering beobachtet werden, Tonalite dagegen weisen eine penetratvie Schieferung im cm-Bereich auf. Die Schieferung ist meist steil nach SE einfallend und gegenüber dem Profil El Triunfo um ca. 20° nach Osten rotiert. Riewe erkennt anhand von Plagiaklas-Gefügen eine anhaltende Deformation bei unterschiedlichen Temperaturen – Plagioklase zeigen unter höhergradigen Bedingungen Subkornbau mit lobaten Korngrenzen, Hornblenden zeigen Rekristallisate; unter mittelgradigen Bedingungen werden Mikroscherzonen mit rekristallisierten Plagioklasen, Kern-Mantel-Strukturen und Knickbänder beobachtet (Abschnitt 2.2.2.2 in Riewe 1998).

Die El Novillo Gabbronorite sind nur in diskreten hochtemperierten duktilen Scherzonen von wenigen cm Mächtigkiet deformiert. Die jungen Granodiorite von Los Divisaderos sind post-tektonisch (Kapitel 3 in Riewe 1998).

Aus Mineralparagenesen der Kalksilikatfelse schätzte Riewe (1998) Temperaturen von 600° - max. 700° C für die Kontaktmetamorphose der karbonatischen Linsen ab.

Im Streichen der Schieferung nach Norden parallel zum Ostrand des El Novillo Gabbronorit Intrusivs tauchen immer wieder Schollen von stark deformiertem Nebengestein im Tonalit auf – ca. 10 km weiter nördlich sind sie an der Strasse La Paz – Los Planes als "Scherzone La Huerta" von Aranda-Gómez und Pérez-Venzor (1995) beschrieben (Lokation siehe Übersichtskarte Abb. 2.1). Hier sind Metapelite, Kalksilikat-Felse und Intrusiva zusammen auf Bereiche von jeweils wenigen Metern Mächtigkeit intensiv miteinander deformiert (s. Abb. 2.25). In dieser Scherzone konnten Schlingen von wenigen dm Wellenlänge mit sehr steil stehenden Faltenachsen subparallel zur Minerallineation beobachtet werden (s. Aufschlussskizze Abb. 2.24; Schierfung ca. 100/80, b-Achsen und l ca. 290/85).





Abbildung 2.24: Aufschlussskizze der Scherzone La Huerta an der Straße La Paz – Los Planes. Faltenachsen stehen steil und fast parallel zur Lineation.



Abbildung 2.25: Deformierte Kalksilikate in der Scherzone La Huerta

2.5 Profil Sierra de La Gata

Szenen einer Aufschmelzung: partielle Anatexis von Metapeliten vom schmalen, stromatischen Leukosom über Nebulite bis zum km³ mächtigen Diatexit.

Von den Profilen El Triunfo und El Novillo aus folgen senkrecht zum generellen Streichen nach Osten eine Zone von jungen, undeformierten Granitoiden ("Sierra La Trinchera", "Sierra Los Chiles" in Abb. 2.1), die von Ost-fallenden spröden Brüchen mit Kataklasiten und (?)Pseudotachyliten gegen die Ebene von Los Planes mit quartärer Talfüllung begrenzt werden. Im Bereich San Antonio finden sich zwar Metasedimente als Einschlüsse in den Intrusivkörpern, sie sind jedoch sehr stark retrograd überprägt. Geländeaufnahmen zu Metamorphose und Strukturen sind erst wieder weiter östlich in der Sierra de La Gata und in Profilen weiter südlich (Boca de la Sierra) möglich. Hier fällt auf, dass das Einfallen der Schieferung nun steil nach NW gerichtet ist, mit kinematischen Indikatoren, die generell nach SE aufschiebenden Schersinn anzeigen. Metasedimente haben einen höheren psammitischen Anteil. In der Sierra de La Gata können metamorphe Gradienten und imposante Merkmale der partiellen Anatexis dieser Einheiten beobachtet werden.

2.5.1 Strukturelle Merkmale

Die Metasedimente sind eng bis isoklinal verfaltet, eine Achsenschieferung ist als penetrative Hauptschieferung ausgebildet und generell parallel zur noch beobachtbaren Schichtung. Es werden sowohl flache als auch steile Lineationen beobachtet, bei steilen Lineationen konnten Schersinne bestimmt werden. An Schichtgrenzen mit merklichem Kompetenz-Unterschied sind wieder asymmetrische Kleinfalten ausgebildet. Intrusiva zeigen die gleiche Schieferung, hier können an S-C- Gefügen ebenfalls aufschiebende Schersinne festgestellt werden (s. Abb. 2.26).

Im Profil (s. Abb. 2.27) sind das Einfallen der Schieferung und als Übersignatur die Bildung von nebulitischen Strukturen in Migmatiten durch partielle Anatexis ausgehalten.



Abbildung 2.26: stereographische Projektion von Daten der Schieferung, Lineation und Schersinn in der Sierra de La Gata



Abbildung 2.27 (vorherige Seite): Profile Sierra La Gata, M. 1:25.000. Lokationen siehe Übersichtskarte Abb. 2.1

2.5.2 Merkmale der Metamorphose

Merkmale der partiellen Anatexis können im Profil ,Bahia Los Muertos' dargestellt werden. Im Osten, am Golf von Kalifornien kommen zunächst verfaltete psammitische Metasedimente vor, in deren wenigen pelitischen Lagen wieder Andalusit das charakteristische metamorphe Mineral ist. Intrudiert werden die Metasedimente im Kern der Sierra von granitoiden Intrusiva, die an der Bahia de Los Muertos ultramafische Kumulate aufweisen (in die Profilebene in Abb. 2.27 und 2.28 projiziert). Bewegt man sich von Osten auf die Intrusiva zu, so kann man die fortschreitende Teilschmelzung an den Merkmalen der Migmatite beobachten.

In Abb. 2.28 a ist das erste Einsetzen von Leukosomen zu sehen – die Struktur ist "phlebitisch" (Mehnert 1968), einzelne Leukosome sind mit der Schieferung verfaltet.

Abb. 2.28 b zeigt die weiter fortschreitende Mobilisierung, ein granitisches Leukosom durchschlägt hier die Schieferung.

In Abb. 2.28 c ist das Volumen des Mobilisats weiter gestiegen, eine nebulitische Struktur beginnt sich auszubilden.

Das "Ergebnis' der Aufschmelzung sind einzelne Schollen des Restits in einem granitischen Diatexit (Abb. 2.28 d) – die als massiver Diatexit im Profil dargestellte Einheit ist granatführend und enthält selten solche als Restit erkennbaren Schollen.

An diesem Diatexit unternahmen Schaaf et al. (2000) isotopische Untersuchungen, die belegen, dass die Aufschmelzung fast zeitgleich mit der Intrusion der Granitoide in der Sierra La Gata ist – Intrusiv und Migmatit-Körper haben eine gemeinsame Abkühlungsgeschichte.

Die Beziehung von Strukturen und Metamorphose kann wieder Anhand der bis einige mm großen Andalusit-Körner gezeigt werden. Anders als im westlichen Profil El Triunfo kann hier nur beobachtet werden, dass idiomorphe Andalusite eine Schieferung überwachsen. Abbildung 2.29 lässt die Schieferung anhand von feinen Erz-Körnern im Andalusit erkennen. Die Andalusit-Bildung wäre somit post-tektonisch.

Andererseits können auch verfaltete frühe Leukosome wie in Abbildung 2.28 a beobachtet werden – damit wäre die Deformation auch synmetamorph noch weiter gegangen.



Abbildung 2.28: Szenen einer Aufschmelzung: Merkmale der partiellen Anatexis im Profil Bahia Los Muertos



Abbildung 2.29: Andalusit überwächst eine durch feine Erz-Körner erkennbare Schieferung. And-Korn füllt das ganze Bild. Breite des Bildes ca. 4 mm.

2.6 Arbeitsgebiet Boca de la Sierra

Das Arbeitsgebiet Boca de la Sierra liegt etwas entfernt und isoliert von den zuvor beschriebenen Profilen, ca. 30 km weiter südlich und östlich (siehe Abbildung 2.1). Die dazwischen liegende bis 2000 m hohe und schwer zugängliche Sierra La Laguna wird nach Übersichtskartierungen und Luftbildauswertungen als überwiegend aus jungen, undeformierten Graniten aufgebaut beschrieben (Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989, in Abb. 2.1 teilweise durch die Legende verdeckt). Deshalb wurden im Rahmen dieser Arbeit die östlich der hohen Sierra gelegenen Aufschlüsse von Migmatiten im Gebiet Boca de la Sierra bevorzugt bearbeitet, mit der Folge, dass keine kontinuierlichen strukturellen Aussagen über den Zusammenhang mit den anderen Profilen mehr gemacht werden können. Eine eigene Profilaufnahme erfolgte deswegen nicht.

Die Gesteine im Arbeitsgebiet sind hochgradig metamorphe Sedimente (metapelitische Migmatite, unreine Marmore), die intensiv von Magmatiten intrudiert werden, wobei mehrere Generationen magmatischer Gänge gegenseitige Intrusionsbeziehungen aufweisen. Alle Gesteine bis auf wenige Pegmatite und untergeordnet späte Lamprophyre sind stark deformiert.

2.6.1 Merkmale der Metamorphose

Metapelite

In migmatischen Metapeliten aus dem Arbeitsgebiet (Probe 191) wurden bis 2 mm große, hypidiomorphe Granate (Alm/Prp) beobachtet, die zahlreiche Einschlüsse von Biotit, Plagioklas, Quarz und Ilmenit aufweisen. Die Matrix besteht aus Qtz+Bt+Sil. Andalusit wird nicht beobachtet. Abbildung 2.30 zeigt ein mit der Mikrosonde aufgenommenes BSE-Bild (Identifizierung der Phasen erfolgte mit dem Polarisationsmikroskop und der Mikrosonde).



Abbildung 2.30: Granate mit Einschlüssen von PI, Bt, Ilm, Qtz, Matrix Qtz+Bt+Sil. Probe 191, Boca de la Sierra. BSE-Bild, Maßstabsbalken 0,5 mm

Thermobarometrische Auswertungen dieser Paragenesen sind in Abschnitt 5.2.4 detailliert beschrieben.

Kalksilikat - Gesteine

Es werden in den Metapeliten einige Einschaltungen von bis 2 m mächtigen Lagen von unreinem Marmor beobachtet. Interessante Mineralparagenesen sind Cpx+Wo+Qtz+Grs, Cpx+Wo+Cal+Grs sowie Einschlüsse von Pl in Grs ohne Kontakt von Pl zu Cpx, Qtz, Wol oder Cal. Abbildung 2.31 zeigt ein BSE-Bild mit diesen Paragenesen.



Abbildung 2.31: Kalksilikat-Paragenesen in unreinen Marmoren, Probe 192, Boca de la Sierra. BSE-Bild, Maßstabsbalken 50 µm.

2.7 Zusammenfassung, Interpretation der aufgenommenen Profile

Aus den aufgenommenen und in den Abschnitten 2.2 bis 2.5 vorgestellten Detailprofilen konnte in der Zusammenschau ein interpretiertes Gesamtprofil erstellt werden (Abbildung 2.32). Es zeigt von Westen nach Osten und in dieser Richtung vom Liegenden zum Hangenden:

- den Komplex der Gneise von Punta Lobos (Signatur ,β'),
- die Rahmengesteine des El Novillo Intrusivs und den El Novillo Intrusivkomplex (Signatur, Γ') selbst,
- die auf den Gneisen von Punta Lobos auflagernden Marmore von Todos Santos, die nach oben hin als Einschaltungen in die siliziklastische Sedimentation abnehmen. Sie werden mit den Nebengesteins-Schollen in der Peripherie des El Novillo-Intrusivs parallelisiert (siehe Karte, Abb. 2.1).

Aus der Parallelisierung folgt, dass die Gneise von Punta Lobos und das Intrusiv von El Novillo zur selben strukturellen (liegenden) Einheit gehören. Wenn die Gneise von Punta Lobos als alterierter, metamorph überprägter ehemaliger Boden eines ozeanischen Beckens (tw. umgelagerte basische Vulkanite, Abschnitt 2.2.1) interpretiert werden, sind die unmittelbar auflagernden Marmore mit durch kalkige Sedimentation entstandenen Protolithen gut erklärt. Dazu passt die isotopische Signatur der Intrusiva um den El Novillo-Komplex (Schaaf et al. 2000). Diese sind, wie in Abbildung 1.4 dargstellt, im Unterschied zu den östlicheren Intrusiva, durch positive ϵ Nd-Werte und junge Nd-Modellalter (um 0,5 – 0,3 Ga) gekennzeichnet, was geringe krustale Kontamination und damit als Interpretation eine Intrusion in Rahmengesteine ozeanischer Provenienz unterstützt.

• Die Protolithen der stark deformierten, lagenparallel intrudierten Metasedimente (Glimmerschiefer El Cardonozo, La Muela, El Triunfo, Abschnitte 2.2.2, 2.2.3, 2.3) werden als Beckensedimente interpretiert (Abschnitt 2.2.2, ,sedimentäre Eigenschaften').

In diesem Bereich ist die Deformation konzentiert, Orthomylonite (nach lagenparallel intrudierten Granitoiden, Signatur ,+') und feinkörnig rekristallisierte Schiefer zeigen konsistent aufschiebende und linkshändige Bewegung des östlichen Bereichs gegen die westlichen Komplexe an (Abschnitt 2.3, Abbildung 2.17, 2.19).

• Unmittelbar östlich dieser Zone tauchen im Bereich El Triunfo erstmals Orthogneise auf, die mit einem gefalteten mylonitischen s eine zweifache duktile Deformation anzeigen.

Diese Orthogneise werden als die im Arbeitsgebiet am weitesten westlich vorkommenden Einheiten, die auf kontinentale Kruste hinweisen, gedeutet (Abschnitt 2.3.4).

• Weiter östlich folgen in der Sierra La Gata und im Bereich Boca de la Sierra belegt metasedimentäre Einheiten, die andere strukturelle und metamorphe Merkmale aufweisen.

Die Metapelite und Metapsammite zeigen steil nach Westen einfallende penetrative Hauptschieferung, metamorphe Indexminerale (Andalusit) überwachsen hier eine alte Schieferung (siehe Abbildung 2.29). Sie stellen wahrscheinlich sedimentäre Einheiten des ursprünglichen Kontinentalrandes dar (nach Analogieschluss mit Schmidt & Paterson 2002, Johnson et al. 1999, siehe Abschnitt 1.2.1); sie können jedenfalls nicht mit den Metasedimenten von El Cardonozo, La Muela und El Triunfo gleichgestellt werden.

Mit diesen Erkenntnissen der geologischen Kartierung würde die duktile Aufschiebungszone, die hier im Gebiet La Muela / El Triunfo (siehe Abb 2.1) belegt ist (und als ,La Paz Fault' bekannt, aber kontrovers interpretiert wird, siehe Abschnitt 1.2.3), die Grenze zwischen einer ozeanischen und einer kontinantalen Domäne markieren (dicke gestrichelte Linie im Profil). Diese Grenze sollte sich auch mit Daten zur Metamorphose und mit isotopischen Daten belegen lassen. Die detaillierten Untersuchungen in den Abschnitten 4, 5 und 6 widmen sich diesem Thema.



Abbildung 2.32: interpretiertes W – E Gesamtprofil durch den La Paz Kristallinkomplex. Erläuterung siehe Text.

3 Grundlagen der petrologischen Bearbeitung

Methoden der Analyse sowie der rechnergestützten Auswertung werden kurz beschrieben und mit einem Abriss der thermodynamischen Grundlagen hinterlegt. Dies erscheint wichtig, damit die Umsetzung der thermodynamischen Berechnungen zu pT – Werten, kalibrierten petrogenetischen Netzen und Gleichgewichts-Modellierungen leichter nachvollziehbar ist.

3.1 Analytische Methoden

3.1.1 Geländebeobachtungen

Im Gelände wurden bei der geologischen Kartierung die Proben speziell nach dem Vorkommen von Index-Mineralen (wie Chlorit, Granat, Andalusit oder Sillimanit, Cordierit), sowie einer möglichst geringen Alteration ausgesucht. Speziell für Cordierit war dies schwierig, im Dünnschliff zeigte sich dann auch, dass praktisch alle im Gelände als Cordierit angesprochenen Phasen ,nur' noch als Pinite vorliegen.

3.1.2 Mikroskopische Analysen

Mit dem Durchlicht Polarisations-Mikroskop wurden ca. 150 Proben qualitativ analysiert, sowie Abschätzungen der modalen Verteilung der einzelnen Phasen vorgenommen.

3.1.3 Mineralchemische Analysen

Chemische Analysen der einzelnen Phasen wurden mit einer Cameca SX50 Elektronenstrahl-Mikrosonde durchgeführt. Dazu wurden weitere Scheiben von den zuvor mikroskopierten Proben auf Glasträgern auf ca. 30 – 50 μ m Dicke angeschliffen, mit Diamant-Polierpaste sukzessive feinerer Körnung (15, 9, 3, 1 μ m) poliert und mit Kohlenstoff bedampft.

Das Messprogramm für neun Elemente (Standardabweichungen siehe folgende Tabelle nach Fehr 1992) wurde mit den fünf zur Verfügung stehenden Spektrometern in zwei Durchläufen absolviert, wobei für Fe die doppelte Messzeit (20 sec Peak, 10 sec Background) benutzt wurde. Die Beschleunigungsspannung war 15 kV, der Strahlstrom 15 nA, es wurde jeweils die K_{α} – Linie gemessen. Matrixkorrekturen erfolgten nach Pouchou & Pichoir (1984) automatisch mit dem Programm ,PAP'.

Element	Kristall	Standard	2 σ [gew%]
K	TAP	Kalifeldspat	0,20
Fe	LIF	Olivin	0,06
Mg	TAP	Olivin	0,17
Al	TAP	Korund	0,18
Si	TAP	Wollastonit	0,21
Na	TAP	Albit	0,02
Ca	PET	Wollastonit	0,03
Ti	PET	Mangan-Titanat	0,01
Mn	PET	Mangan-Titanat	0,03

Tabelle 3.1: Mikrosonden – Spekrometerkristalle, Standards und Standardabweichungen nach Fehr (1992) und eigenen Messungen.

Folgende Analysen wurden angewandt:

- **Bildanalyse**: die Probe wird unter dem Elektronenstrahl bewegt, die relative Verteilung von bis zu fünf chemischen Elementen innerhalb einer bestimmten Fläche wird als Rasterbild in Falschfarben dargestellt.
- Element Profile: Über ein Korn werden Punkte in einem bestimmten Abstand auf einem Profil gemessen, die Zusammensetzung wird in einem Diagramm dargestellt. Bildanalyse und Profile geben schnell Aufschluss über eine mögliche Zonierung eines Korns.
- Einzelpunkte bilden die Grundlage für thermodynamische Berechnungen.

Die Punkt - Analysen wurden auf Gew. % der Oxide und mit dem am Institut vorhandenen Programm ,Analysis' sowie mit Excel Tabellen nach Deer et al. (1992) auf die Anzahl Kationen pro Formeleinheit (pfu) umgerechnet. Fe^{3+} wurde in der Berechnung über Ladungsausgleich ermittelt (für Amphibole nach Schumacher 1997).

3.2 Methoden der Auswertung

3.2.1 Qualitative petrogenetische Netze

Mit dem Polarisationsmikroskop wurden Mineralphasen und Gefügemerkmale bestimmt und Abschätzungen der modalen Zusammensetzung gemacht. Aus den festgestellten kritischen Mineralparagenesen wurden Modellreaktionen abgeleitet. Diese Modellreaktionen wurden zunächst mit konstruierten Schreinemakers-Projektionen für das entsprechende System (Pelite, Karbonate, etc.) verglichen, die Projektionen so sukzessive verfeinert.

Die Reaktionen wurden anschliessend in petrogenetischen Netzen für die jeweiligen chemischen Systeme (,Chemographien') aufgetragen und mit publizierten Netzen für Metapelite mit ähnlichen pT-Bedingungen verglichen (z. B. Pattison et al. 2002, Pattison & Harte 1991, Evans & Speer 1984, Thompson 1982, Grant 1985, Spear et al. 1999 für das Pelit-System).

Im zweiten Schritt wurden die Analysen mit thermodynamisch ,vorwärts' modellierten Phasendiagrammen (Theorie in den Abschnitten 3.2.2, 3.2.3, 3.2.4 erläutert) verglichen. Einzelne Punkte in pT wurden durch petrologische Thermobarometer verifiziert (Theorie in Abschnitt 3.2.5).

Alle Ergebnisse sind in den Kapiteln 4 (petrogenetische Netze) und 5 (Mineralchemie und Thermobarometrie) dargestellt.

3.2.2 Thermodynamische Grundlagen der Gleichgewichts-Berechnungen

Die Grundlage bildet die Untersuchung der Gleichgewichte von metamorphen Phasen. Die Einbeziehung von ,solid solution' macht eine Betrachtung auf Basis der Komponenten eines chemischen Systems nötig – als Bedingung für das Gleichgewicht kann wie in Spear (1997) formuliert werden:

$$0 = \sum_{j=1}^{m} \upsilon_{j} \mu_{j} \tag{3-1}$$

Wobei v_j den stöchiometrischen Koeffizienten und μ_j das chemische Potential der j-ten Komponente darstellen.

Diese Gleichung kann erweitert werden, um die Gleichgewichtskonstante K_{eq} als Funktion von Druck und Temperatur darzustellen:

$$\Delta G(P,T,X) = 0 = \Delta H(298,1) + \int_{298}^{T} \Delta Cp dT + \int_{1}^{P} \Delta V dP - T \left(\Delta S(298,1) + \int_{298}^{T} \frac{\Delta Cp}{T} dT \right) + RT \ln Keq$$

(3-2)

wobei ΔG die freie Gibbs'sche Energie,

 ΔH die Enthalpie,

 ΔS die Entropie,

 ΔV das Volumen und

 ΔC_p die Wärmekapazität der Reaktion darstellen.

Das thermodynamische Gleichgewicht einer Reaktion ist dabei so definiert, dass die freie Gibbs'sche Energie gleich Null wird.

Die Gleichung 3-2 findet praktisch in der Petrologie zwei unterschiedliche Anwendungen:

- *Multi-Equilibrium* Berechnungen, die einen ganzen Satz von Gleichungen der Form 3-2 nutzen, die alle Phasen-Gleichgewichte eines Systems beschreiben, siehe 3.2.3,
- Berechnungen, die *ein* Gleichgewicht benutzen, um für eine Phasenbeziehung nach T oder paufzulösen, also petrologische Thermo- oder Barometer, siehe 3.2.5.

Eine grundsätzliche Hürde in diesen Betrachtungen stellt die Möglichkeit der nicht-idealen Mischung dar. Prinzipiell muss dafür ein ,chemisches exzess Potential' bzw. eine ,freie Exzess-Mischungsenthalpie' eingeführt werden:

$$\Delta G^{\text{mix}} = \Delta G^{\text{ideal}} + \Delta G^{\text{ex}}$$
(3.3)

In ΔG^{ex} stecken dabei (über die Beziehung $\Delta G^{ex} = -RTlnK_{\gamma}$) die Aktivitätskoeffizienten der einzelnen Phasen. Nach dem Mischungsverhalten (nicht-ideale symmetrische oder asymmetrische Mischung) werden die Aktivitätskoeffizienten über Wechselwirkungsparameter (Margules 1895) bzw. eine Reihenentwicklung (Redlich-Kister 1948) angenähert. Diese Größen bzw. Gleichungen müssen für das zu untersuchende System bekannt sein (Spear 1997).

Als wichtige Erkenntnis aus dieser theoretischen Betrachtung kann für die praktische Anwendung abgeleitet werden:

- Es ist wichtig, die Annahme des chemischen Gleichgewichts zu testen (vorsichtige Kontrolle der Reaktionsgefüge, systematische Tests z. B. der K_D Werte),
- Mischungsmodelle müssen kritisch betrachtet werden. Für die verwendeten Programme müssen wenn gefordert als Eingabe berechnete Aktivitäten unbedingt den verwendeten Mischungsmodellen entsprechen.

3.2.3 Multi-Equilibrium Berechnungen

Ziel der verwendeten Multi-Equilibrium Berechnungen war, durch ,Vorwärts-Modellieren' von Phasendiagramm-Projektionen auf die pT - Ebene Aussagen über die Gültigkeit der zuvor nach Modellreaktionen aufgestellten petrogenetischen Netze zu erhalten und diese nach Möglichkeit zu quantifizieren.

Die Berechnungen sind über verschiedene Algorithmen - immer rechnergestützt - umgesetzt. Alle Programme sind relativ schwierig zu bedienen – dort, wo auf einfache Bedienung Wert gelegt wurde (z. B. beim Internet-Service ,WEBINVEQ', s. u.), ist allerdigs auch die Gefahr am größten, die Bedingungen falsch zu formulieren, und damit zweifelhafte Ergebnisse zu erhalten, ohne sich die grundlegenden Schwierigkeiten (etwa Verwendung von unpassenden Mischungsmodellen) bewusst zu machen. Es folgt eine kurze, nicht vollständige Übersicht, gegliedert nach den verwendeten Algorithmen:

- Geo-Calc, TWQ, TWEEQU: Phasendiagramm-Projektionen auf Basis • eines mitgelieferten intern konsistenten thermodynamischen Datensatzes. Der Algorithmus erzeugt zunächst alle möglichen Kombinationen von eingegebenen (Misch-) Phasen. Darauf wird die Stabilität jeder möglichen Phasenkombination getestet. In Abbildung 3.1b sähe das Vorgehen so aus: es wird die Kombination a+c ausgesucht, die Gleichgewichtszusammensetzung wird bestimmt (die Tangente zu den G-X Kurven der beiden Phasen), die Stabilität wird getestet: in diesem Fall ist a+c metastabil im Bezug zu den Phasen b und d. Dies wird für alle Kombinationen wiederholt (Connolly 1992). Implementiert ist dieser Algorithmus in verschiedenen Programmen (Geo-Calc, Perkins et al. 1986, Berman et al. 1987; ,TWQ', ,TWEEQU', Berman 1988, 1990, 1991). Die pT Bestimmung mit dieser Methode ist sogar als Internet-Service bereitgestellt (Gordon 1992, Gordon et al. 1994; http://ichor.geo.ucalgary.ca/~tmg/Webinveq/rgb95.html). Aufgrund des hohen Rechenaufwandes für den verwendeten Algorithmus sind nur eine begrenzte Zahl von Mischphasen erlaubt, für die feste Aktivitäts-Korrekturen angesetzt werden. Es werden neben voneinander unabhängigen auch eine Reihe voneinander abhängiger Gleichgewichte berechnet, die sich immer in einem pT - Punkt schneiden, auch wenn die Paragenese nicht im Gleichgewicht war. Andererseits können durch falsche Aktivitätskorrekturen verschiedene pT - Schnittpunkte entstehen, die als unterschiedliche Punkte eines pT – Pfades missinterpretiert werden könnten.
- Einen etwas anderen Algorithmus ebenfalls auf dem kombinatorischen Prinzip bieten die Programme ,Thermocalc' (Powell & Holland 1988) und ,Gibbs' (Spear 1988). Hier werden zunächst divariante Felder auf Ihre Stabilität geprüft und evtl. ausgeschlossen, was den Rechenaufwand verringert. Durch die kombinatorische Ermittlung der Stabilitätskriterien entstehen für Systeme mit mehreren Komponenten große Rechenaufwände. Weil als Eingabe immer die Aktivitäten der einzelnen Phasen benötigt werden, ist zudem die Abbildung von nicht-linearen Mischungsmodellen nicht möglich.
- Das Programm ,PERPLE_X' (Connolly 1990, Connolly & Kerrick 1987) hat ein unterschiedliches Prinzip: für jede Mischphase wird ein Satz von stöchiometrischen ,pseudo-compounds' eingeführt, die Verteilungen der freien Gibbs'sche Energien eines Systems können dann als Polygonzüge dargestellt und damit über die Lösung von linearen Gleichungen mit einem sehr stabilen Algorithmus minimiert werden. Dieses Programm hat sich nach eingehenden Eignungstests als das mächtigste, weil am vielseitigsten einsetzbare, erwiesen. Die Funktionsweise wird deshalb in einem eigenen Abschnitt (3.2.4) erläutert.

Die Ergebnise der Modellierungen der verschiedenen Systeme sind im Abschnitt 5 dargestellt.

3.2.4 Das Programm PERPLE_X

PERPLE_X ist eine Sammlung von fortran77 Programmen zur Berechnung und Darstellung von Phasengleichgewichten, Phasendiagrammen und allgemeiner thermodynamischer Daten (Connolly 1990, Connolly & Kerrick 1987). Es ist sowohl als ausführbares Programm für verschiedene Plattformen kompiliert (UNIX, Apple, PC), als auch im Quellcode verfügbar (http://www.perplex.ethz.ch).

Der große Vorteil des Programms liegt in der Offenheit bezüglich der zugrunde liegenden thermodynamischen Datensätze und Mischungsmodelle und besonders in der Art der Gleichgewichtsberechnungen durch Minimierung der freien Gibbs'schen Energie. Illustriert wird diese Methode im G-X – Diagramm in Abbildung 3.1. Während die kombinatorische Ermittlung iterativ die Stabilität aller im System möglichen Phasen-Kombinationen testet (Abb. 3.1 b, a+b,

a+c, a+d, b+c, b+d, etc.), baut PERPLE_X einen Satz von ,pseudo-compounds' der einzelnen Phasen a, b, c, d auf und leistet so die Minimierung der freien Gibbs'schen Energie im System (Abb. 3.1 a). Grundsätzlich werden bei PERPLE_X zunächst die Komponenten des betrachteten thermodynamischen Systems festgelegt, die möglichen Phasen – Stabilitäten ermittelt das Programm (im Unterschied zu den kombinatorischen Algorithmen, bei denen man mit den beobachteten Phasen startet) selbst.



Abbildung 3.1: Stabilitätskriterium minimale freie Gibbs'sche Energie im G-X Diagramm, schematisch. a) ,pseudo-compounds' der Phasen a, b, c und d. b) kombinatorisch (Thermocalc, Geo-Calc, TWQ); Abbildung aus Connolly 1992, Erläuterung im Text.

Arbeitsweise, Vorgehen:

Die Betrachtung eines petrologischen Problems erfolgt in drei Schritten: zunächst wird eine Datei mit den Rahmenbedingungen der Berechnung aufgebaut - darin fliesst ein, welche Art der Berechnung gemacht werden soll (Zusammensetzungs-Diagramm, Schreinemakers-Projektion, freies Diagramm mit ausgewählten Variablen), welches thermodynamische System betrachtet werden soll (wie etwa SiO₂ – CaO – MgO), evtl. mit Einschränkung der Gesamtgesteins-Chemie, für welchen p - T - X - Bereich gerechnet werden soll, welcher thermodynamische Datensatz zugrunde liegen soll, welche Mischungsmodelle betrachtet werden, etc. Diese Datei wird über interaktive Eingabe am Bildschirm mit dem Programm ,BUILD' erstellt. Beispieldialoge für **BUILD** sind sehr zahlreich auf der PERPLE X Internet-Seite abgelegt (http://www.perplex.ethz.ch/perplex examples.html). Die eigentliche Berechnung erfolgt dann mit dem Aufruf des Programms , VERTEX'. VERTEX braucht genau eine Eingabe – die Datei, die mit BUILD zuvor erstellt wurde, und generiert wiederum eine Datei, die das berechnete System mit den festgelegten Bedingungen enthält. Diese Datei kann dann im dritten Schritt ausgewertet werden. Dabei können beispielsweise Phasendiagramm-Projektionen auf die pT-Ebene als Grafik erzeugt oder die Zusammensetzung einer Phase an einem bestimmten Punkt ausgegeben werden. Das beschriebene Vorgehen ist in Abbildung 3.2 dargestellt.



Abbildung 3.2: Vorgehen der Berechnungen mit PERPLE_X

Der rechnerisch und damit zeitlich aufwändigste Teil ist die Berechnung des Systems mit VERTEX. Abhängig von der Dimension des betrachteten Systems und vor allem von der Komplexität der Mischungsmodelle für berechnete Mischphasen kann dieser Schritt einige Minuten bis mehrere Stunden dauern. Für die meisten petrologischen Fragestellungen ist das aber nicht von Bedeutung – selbst wenn eine Berechnung über Nacht laufen muss, wird der Schwerpunkt der Auswertung in der Fomulierung unterschiedlicher Darstellungen als "Schnitte" durch das einmal berechnete System liegen (etwa "Wie ändert sich die Zusammensetzung von Plagioklas in einem isobaren Schnitt von 400° bis 800° bei der progressiven Metamorphose eines Basits?', "Welche Zusammensetzung haben koexistierende Klinopyroxene?', "Bei welchen pT-Bedingungen ist An₄₀ stabil?'). Antworten auf diese Fragen sind als grafische Auswertungen relativ schnell zu haben und lassen sich in Standard-Software zur Darstellung exportieren.

Eine besondere Fragestellung: Metasomatose

Aus der oben besprochenen Standard-Arbeitsweise und dem Vorgehen zur Modellierung eines Systems wird deutlich, warum für VERTEX – den Rechen-Kern des Systems – keine Stapelverarbeitung vorgesehen ist: typischerweise wird ein System einmal modelliert, danach werden viele sehr unterschiedliche Fragen am selben Modell durch grafische Darstellung erklärt.

Ein grundsätzlich anderes Vorgehen fordert die Betrachtung von Metasomatose. Hier sind ,pseudosections' interssant, also Phasendiagramm-Projektionen auf die pT-Ebene für eine bestimmte Gesamtgesteins-Chemie (Connolly & Petrini 2002, Tinkham et al. 2001). Wenn beispielsweise die Rodingit-Bildung erklärt werden soll, müsste man für thermodynamische Systeme mit unterschiedlicher Gesamtgesteins-Chemie (Ultrabasit mit sukzessive höherem CaO-Gehalt bei unterschiedlichem XCO₂ der fluiden Phase) immer die gleiche Auswertung (z. B. ,Bei welchen pT-Bedingungen wird modal wie viel Grossular gebildet?') machen.

Man könnte mit PERPLE_X auch CaO als variable Komponente einführen, und dann Schnitte in Abhängigkeit vom bulk - CaO-Gehalt betrachten, sobald man aber einen weiteren Parameter (in diesem Fall ist XCO₂ kritisch) betrachten will, werden die Darstellungen schwer interpretierbar. Es ist also einfacher, n (Anzahl der Schritte für variables CaO) * m (Anzahl der Schritte für variables

XCO₂) Gesamtgesteinschemien zu betrachten und jeweils die gleichen pT-Projektionen zu generieren.

Dieses Vorgehen wird von PERPLE_X nicht optimal unterstützt – man müsste immer ein System mit BUILD definieren, dann manuell VERTEX anstossen, auf die fertige Berechnung warten und abschliessend genau eine Auswertung erstellen.

Der Programmcode von VERTEX wurde deswegen im Rahmen dieser Arbeit so abgeändert, dass man in einem Schritt die Definitionen für die n*m verschieden eingschränkten Systeme erstellt und diese im Stapelverarbeitungsmodus automatisch nacheinander von VERTEX abarbeiten lässt, ohne manuell eingreifen zu müssen. Dabei wurden nur die Einlese-Routinen von VERTEX angepasst, die Funktionen zur Berechnung wurden nicht abgeändert. Das Vorgehen ist in Abbildung 3.3 schematisch dargrestellt.



Abbildung 3.3: geändertes Vorgehen – Arbeitsweise mit PERPLE_X zur automatischen Berechnung von n thermodynamischen Systemen.

Dieses Vorgehen hat sich für die Modellierung als sehr effizient erwiesen (ausführliche Diskussion in Abschnitt 5).

3.2.5 Thermobarometrie

Nachdem die petrogenetischen Netze durch die thermodynamischen Modelle bestätigt, bzw. quantifiziert waren, wurden spezielle Geothermobarometer berechnet.

	Thermometrie	Barometrie	
Metasedimente	 Granat-Biotit nach Ferry & Spear (1978), Perchuk & Lavrent'eva (1983), Thoenen (1989), Kleemann & Reinhardt (1994) und Holdaway (2000) Granat - Chlorit nach Grambling (1990), Dickenson & Hewitt (1986) 	 GASP (Granat-Alumosilikat- Plagioklas-Quarz) nach Ghent (1976), Koziol & Newton (1988), Koziol (1989), Holdaway (2001) 	
Metabasite	 Granat - Epidot nach Heuss-Aßbichler & Fehr (1997) 	 Aluminium in Hornblende für Magmatite nach Hammarström & Zen (1986), Schmidt (1992) 	

Tabelle 3.2: verwendete Geothermo- und Geobarometer.

Die Ergebnisse sind im Abschnitt 5.2 dargestellt.

Diskussion der Entwicklung des Granat – Biotit Geothermometers

Eines der wichtigsten Thermometer für Metapelite bildet die Austauschreaktion Ann + Prp = Phl + Alm, also der Fe²⁺ - Mg Austausch zwischen Granat und Biotit. Erste Kalibrationen dieser Reaktion kamen von Ferry & Spear (1978) und Perchuk & Lavrent'eva (1983). Beide nahmen ideale Mischung für Granat und Biotit an. Nachfolgende Verbesserungen beruhten auf experimentellen Bestimmungen und Kalibration an natürlichen Proben unter Einbeziehung von nicht idealer Mischung in sowohl Granat als auch Biotit mit der Betrachtung von Al^{VI}, Ti, Fe³⁺ in Bt und Ca und Mn in Grt (Ganguly & Saxena 1984, Indares & Martignole 1985, Berman 1990, Dasgupta et al. 1991, Kleemann & Reinhardt 1994, Mukhopadhyay et al. 1997, Holdaway et al. 1997). Publikationen der letzten Jahre sind praktisch immer mit ,Garnet – Biotite thermometry revised' überschrieben, was die Unklarheit in der Interpretation einer Fülle von Daten spiegelt.

Die letzte Revision ist eine vergleichende Studie von Holdaway (2000), die sieben Thermometer vergleicht. Im Ergebnis werden zwei Kalibrierungen als beinahe gleichwertig angesehen:

- die Kombination des Granat-Mischungsmodelles von Berman (1990) mit dem Biotit-Modell von Kleemann & Reinhardt (1994) oder
- die Kombination des Granat-Mischungsmodelles von Mukhopadyay et al. (1997) mit dem Biotit-Modell von Holdaway et al. (1997).

In beiden Fällen ergibt sich für die Margules-Wechselwirkungsparameter der asymmetrischen Mischung von Granat eine Temperatur- und eine geringe Druck-Abhängigkeit, für die Parameter des (nicht-ideal symmetrischen) Biotit-Modells eine Temperatur-Abhängigkeit. Daraus folgt, dass das Thermometer neben einer Annahme zum Druck nur iterativ nach der Temperatur aufgelöst werden kann, weil die Temperatur als Parameter in G und B (s. u.) steckt:

Die Formulierung des Thermometers sieht nach Holdaway (2000) dann so aus:

$$T(K) = \frac{40198 + 0.295P + G + B}{7.802 - 3R \ln K_p}$$
(3.4)

wobei

$$G = 3RT \ln\left(\frac{\gamma_{Mg}^{Grt}}{\gamma_{Fe}^{Grt}}\right) = 2X_{Mg}X_{Fe}(W_{FeMg}^{Grt} - W_{MgFe}^{Grt}) + X_{Fe}^{2}W_{MgFe}^{Grt} - X_{Mg}^{2}W_{FeMg}^{Grt} \quad \text{(asymm. Granat)}$$
$$B = 3RT \ln\left(\frac{\gamma_{Fe}^{Bt}}{\gamma_{Mg}^{Bt}}\right) = W_{MgFe}^{Bt}(X_{Fe} - X_{Mg}) \quad \text{(symm. Biotit)}$$

Fe-Mg – Granat Margules-Wechselwirkungsparameter nach Mukhopadyay et al. (1997):

$$\begin{split} W^{Grt}_{FeMg} &= -24166 + 22,09T - 0,034P \\ W^{Grt}_{MgFe} &= 22265 - 12,40T + 0,050P \end{split}$$

Fe-Mg – Biotit Wechselwirkungsparameter nach Holdaway et al. (1997):

$$W_{MgFe}^{Bt} = 22998 - 17,4T \qquad (jeweils in J/mol, K, bar).$$

Fe-Mg – Verteilungskoeffizient K_D ist:
$$K_D = \frac{X_{Mg}^{Grt} / X_{Fe}^{Grt}}{X_{Mg}^{Bt} / X_{Fe}^{Bt}}$$

Holdaway (2000) weist ausdrücklich darauf hin, dass die von ihm und Mukhopadyay et al. (1997) bestimmten ,durchschnittlichen' Modelle und Wechselwirkungsparameter nur für die Fe-Mg - Austauschreaktion zwischen Grt und Bt gelten, er geht davon aus, dass sich Fehler in dieser Bestimmung gegenseitig aufheben, während sie für ein Gleichgewicht mit einer anderen Phase starken Einfluss haben könnten. Die Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit erfolgten mit dem mir von M. Holdaway freundlicherweise zur Verfügung gestellten Programm ,GB'.

Berechnet wurden auch die ,ursprünglichen' Thermometer nach Ferry & Spear (1978) und Perchuk & Lavrent'eva (1983). Nach Holdaway (2000) sind die beobachteten Abweichungen meist nicht systematisch bei 30-40°C für einen Temperatur-Bereich 500-650°C, berechnet an Metapeliten aus Maine.

Granat-Biotit (Ferry & Spear 1978):

$$T[^{\circ}K] = \frac{2089 + 9,56P}{0,782 - \ln K_{p}}$$
(3.5)

Granat-Biotit (Perchuk & Lavrent'eva 1983, korrigiert nach Thoenen 1989):

$$T[^{\circ}K] = \frac{3890 + 9,56P}{2,868 - \ln K_D}$$
 (P jeweils in kbar). (3.6)

Ferry & Spear (1978) schlagen vor, wegen des Einflusses der Lösung von Mn und Ca in Granat nur solche mit (Ca+Mn) / (Ca+Mn+Mg+Fe) < 0,2 und wegen Al^{VI} und Ti in Biotit nur Biotite mit

 $(Al^{VI}+Ti) / (Al^{VI}+Ti+Fe+Mg) < 0,15$ zu benutzen. Dieser Test wurde für die hier analysierten Minerale routinemässig gemacht, meistens entsprachen die Granate in der Zusammensetzung relativ genau denen von Ferry & Spear, die Biotite zeigten meist etwas höheres (Al^{VI}+Ti).

Diskussion des GASP Geobarometers

Ähnlich wie das Granat-Biotit Geothermometer ist das GASP (Granat-Alumosilikat-Quarz-Plagioklas) Geobarometer (Ghent 1976, Berman 1988, Koziol & Newton 1988, Koziol 1989) weit verbreitet. Holdaway (2001) hat eine Re-Kalibrierung des Barometers durch Vergleich von neuen Granat-und Plagioklas-Aktivitätsmodellen im Bezug auf GASP vorgenommen.

Im Ergebnis empfiehlt Holdaway (2001) zunächst eine möglichst genaue Temperatur-Bestimmung (praktischerweise mit Grt/Bt nach Holdaway 2000) vorzunehmen. Die Kalibrierung für GASP basiert dann auf dem ,durchschnittlichen' Granat- und Biotit-Aktivitätsmodell von Holdaway (2000), dem Plagioklas- Aktivitätsmodell von Fuhrmann & Lindsley (1988) und

 H_{Grs} = -6628521 und S_{Grs} = 258,76 mit den übrigen Phasen des Barometers nach dem konsistenten Datensatz von Berman (1988 und Revisionen).

Als Lösung empfiehlt Holdaway (2001) folgendes Vorgehen:

- das Grt/Bt-Geothermometer wird mit einer Annahme der Druck-Bedingungen ausgeführt (Programm ,GB'),
- das GASP Barometer wird mit einer Annahme der T-Bedingungen ausgeführt (Programm ,GASP'),
- das Programm ,GBGASP' verschneidet die beiden Ergebnisse.

Die Programmsuite wurde mir von M. Holdaway freundlicherweise zur Verfügung gestellt, die Berechnungen finden sich in Abschnitt 5.2.

4 Petrogenetische Netze für Metapelite

Petrogenetische Netze (Bowen 1940) sind ein wichtiges, allgemein benutztes und seit vielen Jahren für viele chemische Systeme weiter verfeinertes Werkzeug der Petrologie. Erzeugt werden sie durch Projektion eines (multidimensionalen) Phasendiagramms meist auf die pT – Ebene nach den Regeln von Schreinemakers (Bucher & Frey 1995, S. 28ff). Die Lage der dabei entstehenden invarianten Punkte und univarianten und divarianten Reaktionskurven, die die Stabilitätsfelder von Phasen bzw. Paragenesen begrenzen, ist der Gegenstand vieler experimenteller wie theoretischer Untersuchungen.

In diesem Abschnitt sollen für das thermodynamische System der Pelite die beobachteten Paragenesen und Reaktionen mit publizierten petrogenetischen Netzen verglichen werden, um Aussagen über die pT – Entwicklung der Gesteine zu erhalten. Einige Metabasite wurden mit ACF-Diagrammen im Rahmen der Gesteinsbeschreibung (Abschnitt 2.2.1) schon kurz diskutiert.

Die Geländebeobachtungen zeigen, dass nur wenige Metapelite Granat führend sind. Besonders deutlich wurde dies an den Metapeliten und –psammiten im Profil La Muela / Las Palomas, wo Granat in wenigen, einige Zentimeter mächtigen Horizonten vorkommt, während direkt benachbarte Horizonte keinen Granat aufweisen. Daraus ergibt sich eine starke Abhängigkeit der gebildeten Paragenesen von der Ausgangszusammensetzung des Gesamtgesteins bei gleichem metamorphen Grad. Um die Modellreaktionen im pelitischen petrogenetischen Netz aufstellen zu können, wurde eine Trennung in Granat führende Paragenesen und solche ohne Granat vorgenommen. In keiner der Proben wurden Staurolith, Disthen oder Chloritoid beobachtet.

Zudem ist es sinnvoll, die Betrachtungen im recht komplexen thermodynamischen System für Pelite sukzessive von weniger zu mehr Komponenten des Systems aufzubauen. Man startet zunächst im System KFASH bzw. KMASH, um die Topologie des petrogenetischen Netzes festzulegen und erst mit der Erweiterung zu KFMASH die wichtigen Fe – Mg - Mischphasen (Chlorit, Biotit, Cordierit, Granat) mit zu betrachten (Pattison & Harte 1991 und Pattison et al. 2002). Ein weiterer Schritt ist die Einbeziehung der partiellen Anatexis und der möglichen Reaktionen im Zusammenhang mit der Schmelze (Thompson 1982, Pattison & Harte 1991, Grant 1985, Spear et al. 1999).

Reaktionskurven für die Fe – Mg – Austauschreaktionen zwischen Biotit und Granat bzw. Chlorit und Granat haben eine starke Steigung – eignen sich also als Geothermometer, während die für Cordierit – Granat und Cordierit – Biotit in pT ,flach liegen', also Geobarometer darstellen.

Die zunächst getroffene Vereinfachung ist, dass Na₂O und CaO als Komponenten ausgeschlossen werden. Dies ist für Pelite gängig, bedeutet aber, dass die teilweise modal wichtigen Na- und Ca-Mischphasen (Muskovit - Paragonit, Albit - Anorthit, Zoisit, etc.) nicht mit betrachtet werden. Die mit dieser Erweiterung möglichen Austauschreaktionen sind oft gute Geobarometer (z. B. Anorthit – Grossular im ,GASP' Thermobarometer) und werden im Rahmen des Abschnittes 5.2 (Geothermobarometrie) mit eingebracht. Zudem sind Elemente wie Mn oft wichtig, weil sie beispielsweise Granat bei niedrigeren pT – Bedingungen stabilisieren (Tinkham et al. 2001). Die Betrachtung des kompletten Systems MnNCKFMASH wird mit der rechnergestützten thermodynamischen Modellierung (Abschnitt 5.1) erreicht.

4.1 Metapelite ohne Granat

Im Fünf-Komponenten – System KFASH lassen sich durch die Betrachtung der sechs gesteinsbildenden Mineralphasen Ms, Chl, Bt, Als, Kfs und Crd und der zwei gesättigten Phasen Qtz und H_2O in der pT – Ebene univariante Reaktionen rund um petrologisch interessante invariante Punkte rigoros nach den Schreinemakers - Regeln konstruieren. Diese Paragenesen kommen häufig in pelitischen Kontaktaureolen und niederdruck-metamorphen Gebieten vor (Pattison & Tracy 1991).

Da die hier untersuchten Gesteine immer Bt und Alumosilikat (And oder Sil), manchmal auch pinitisierten Cordierit enthalten, sind die interessanten invarianten Punkte die Punkte ohne die Phasen [Kfs], [Chl] bzw. [Ms]. Die Konstruktion ist in Abbildung 4.1 dargestellt (erweitert nach Pattison et al. 2002).



Abbildung 4.1: Konstruktion der invarianten Punkte und univarianten Reaktionen in KFASH/KMASH (erweitert nach Pattison et al. 2002).

Erweitert man das System zu KFMASH, so werden die invarianten Punkte in KFASH zu univarianten Reaktionen, die univarianten Reaktionen in KFASH/KMASH werden zu divarianten Reaktionsbändern, die jeweils von der Reaktion der Fe- bzw. Mg-reichen Endglieder der beteiligten Fe-Mg-Phasen begrenzt werden (siehe Abbildung 4.2).



Abbildung 4.2: Erweiterung des KFASH/KMASH Systems zu KFMASH.

Zwei aus den beobachteten Gesteinen abgeleitete zusätzliche Informationen, die nicht vom Fe/Mg-Verhältnis abhängig sind, helfen dabei, dieses zunächst theoretisch konstruierte Netz im Bezug auf Druck und Temperatur zu kalibrieren:

- Die Beobachtung, ob als beteiligte Alumosilikat-Phase Andalusit oder Sillimanit gebildet wird (Einordnung mit verschiedenen Lagen des Alumosilikat Tripelpunktes nach Holdaway 1971, Pattison 1992 oder berechnet nach Holland & Powell 1998)
- Die Beobachtung, ob die Paragenese Ms+Qtz bei beginnender Anatexis im Gestein stabil ist (abhängig von aH₂O schneiden sich die Kurven für die Reaktionen Ms + Qtz => Als + Kfs + H₂O mit steiler positiver Steigung und Ms + Qtz => Als + L mit steiler negativer Steigung bei unterschiedlichen Drucken).

Dieses Vorgehen entspricht der Gliederung in "Bathozonen" nach Carmichael (1969, 1978), der aus der Betrachtung der Stabilität von Ms+Qtz (und Ms+Qtz+St) zusammen mit dem beobachteten Alumosilikat-Polymorph invariante Punkte abgeleitet hat – die jeweils kritische Druckbedingungen gegeneinander abgrenzen.

Abbildung 4.3 zeigt das um die Alumosilikat-Phasengrenzen und Schmelz-Bildung erweiterte petrogenetische Netz. An ihm können die in den nicht Granat führenden Peliten beobachteten Reaktionen diskutiert werden.



Abbildung 4.3: pelitisches petrogenetisches Netz in KFMASH mit Alumosilikat-Phasengrenzen nach Pattison et al. 2002. Beobachtete Reaktionen sind eingezeichnet.

Folgende, für dieses System und die pT – Einordnung kritische Beobachtungen wurden gemacht:

- Chlorit ist nur retrograd im Gestein vorhanden.
- Wenn beginnende Aufschmelzung beobachtet wird, ist immer Sillimanit das stabile Alumosilikat-Polymorph.
- Die Reaktion And = Sil kann beobachtet werden Sillimanit überwächst Andalusit achsenparallel (Abbildung 4.4, Reaktion 5 in Abb. 4.3).
- In Proben mit beginnender Anatexis ist die Reaktion Ms + Qtz out immer abgelaufen.
- Crd war nicht zu messen, er liegt immer pinitisiert vor. Es finden sich Reaktionsprodukte von Crd out Reaktionen in Qtz (Abbildungen 4.5 und 4.6).
- Staurolith oder Disthen werden in keiner Probe beoachtet.


Abbildung 4.4: Sillimanit ersetzt Andalusit randlich an einem ca. 1 mm messenden And-Korn – deutlich erkennbar am Winkel Spaltbarkeit (45° - 90°). Probe 014, Profil El Triunfo. Pfeile: Sillimanit

Chlorit-out Reaktionen, minimale Temperatur:

Die Stabilität der Paragenese Ms + Chl (+Qtz) reicht in Peliten bei Drucken unterhalb des Als – Tripelpunktes bis ca. 550°C (Bucher & Frey 1995, Pattison et al. 2002). Abhängig davon, ob der Druck über oder unter dem in KFASH invarianten Punkt [Kfs] liegt, wird Crd + Als + Bt oder nur Bt + Als gebildet (Qtz + H₂O Sättigung angenommen). In den Proben aus dem Profil El Triunfo (Lokation 014, siehe Abbildung 2.17) wird oft Bt + Als (And oder Sil) als reliktische Einschlussparagenese in Qtz beobachtet. Dies können die Produkte der Chl – out Reaktionen sein:

 $4 \text{ Ms} + 2 \text{ Chl} \qquad \Rightarrow 4 \text{ Bt} + 2 \text{ Als} + 10 \text{ Qtz} + 8 \text{ H}_2\text{O} \tag{1}$

oder nacheinander:

3 Ms + 2 Chl + 13 Qtz	→ 2 Als + 3 Crd + 3 Bt + n H_2O	(2)
2 Ms + 3 Crd	\rightarrow 2 Bt + 8 Als + 7 Qtz + 3 H ₂ O	(3)

Aus der Stöchiometrie von Reaktion (1) wird die Einschlussparagenese von Bt+Als in Qtz plausibel – es wird viel Qtz im Vergleich zu Bt und Als gebildet.

Cordierit-out Reaktionen, minimaler Druck:

Der invariante Punkt [Crd] wird nach der Konstruktion in Abbildung 4.1 zu höherem Druck hin gezeichnet. In KFMASH divariante Reaktionen, die Crd, Bt und Als beinhalten, sind druck-sensitiv.

Die Topologie der Reaktion 3 ist nach thermodynamischen Modellierungen (siehe Kap. 5.1) mit einer leicht positiven Steigung beschrieben. Wäre die Steigung leicht negativ (Pattison et al. 2002, Pattison & Harte 1991), so könnte man mit einem isobaren Aufheizungspfad sukzessive die Reaktionen 2 und 3 durchlaufen. Aus den hier beobachteten Paragenesen kann keine Entscheidung für eine positive oder negative Steigung der Reaktionskurve abgeleitet werden.

In Bereichen, in denen die Reaktion 4 (Ms + Qtz out, s. u.) abgelaufen ist, ist das Gleichgewicht mit Bt + Als zusammen mit Kfs bestimmt:

Kfs + Crd
$$\rightarrow$$
 Bt + Als + Qtz + H₂O (6)

In einigen Proben wird Aufschmelzung beobachtet, ohne dass Cordierit oder Pinit gefunden werden. Dies lässt sich dadurch erklären, dass bei für Crd ungünstiger Gesamtgesteins-Chemie (Fe/Mg – Verhältnis) das Feld der Crd – Stabilität weiter zu niederen Drucken und höheren Temperaturen ,gedrückt' wird.

Die allgegenwärtige Pinitisierung von Cordierit lässt auf den Einfluss fluider Phase bei der Abkühlung oder den eines separaten Events mit hoher Beteiligung von fluider Phase nach dem metamorphen Peak schliessen (Abbildung 4.6).



Abbildung 4.5: Biotit und Sillimanit-Nadeln als Einschlüsse in Quarz. Probe 014, Profil El Triunfo.



Abbildung 4.6: Pinitisierter Cordierit, relativ grobe Tafeln von Muskovit und Chlorit im Kern. Probe 128, Profil Santa Martha.

Ms + Qtz - out Reaktion

Die Paragenese Ms + Qtz ist in einigen Proben, die Aufschmelzung anzeigen, nicht stabil. Statt dessen beobachtet man Kalifeldspat im Kontakt mit Sillimanit und Biotit. Das Auftreten von Kfs erlaubt, eine eigene Temperatur-Zone zu kartieren. Die zugehörige Reaktion (in KFMASH degeneriert) ist:

$$Ms + Qtz \qquad \Rightarrow Kfs + Als + H_2O \tag{4}$$

Muskovit-Dehydratationsreaktionen und Reaktionen mit Schmelze werden im Rahmen der Anatexis im folgenden Abschnitt 4.1.2 mit diskutiert.

Folgerungen:

- Die Druck Entwicklung bleibt auf jeden Fall unterhalb des Alumosilikat-Tripelpunktes. Andalusit und Sillimanit sind die beobachteten Als-Polymorphe ($\otimes 1$ in Abb. 4.7).
- Die Chl out Reaktionen, die prograd in jeder analysierten Probe abgelaufen sind (Chl ist nur retrograd zu beobachten), bedeutet Mindest-Temperaturen von ca. 550°C bei Drücken um 0,3 Gpa ($\otimes 2$ in Abb. 4.7).
- Die relativ eintönige und oft beobachtete Paragenese Bt + Als + Qtz kann aus Chl + Ms gebildet sein, wird aber auch als Produkt von Ms + Crd (oder Kfs + Crd) beobachtet. Dies deutet zumindest für Kfs+Crd für den Bereich El Triunfo auf einen Druck Anstieg beim oder nach dem Temperatur-Peak der Metamorphose hin (⊗3 in Abb. 4.7). Die Reaktion Ms+Crd → Bt + Als + Qtz kann auch isobar prograd ablaufen, wenn die negative Steigung der Reaktionskurve nach Pattison et al. (2002) verwendet wird.
- Ms + Qtz → Kfs + Sil wird in einigen Proben beobachtet und setzt vor der Anatexis ein (⊗4 in Abb 4.7).

Die Entwicklung ist konsistent mit einem isobaren Aufheizungs-Pfad, der im Temperatur-Peak eine Druckerhöhung zeigt. Temperatur-Isograden können am Vorhandensein von Sil, Kfs bzw. Anatexis festgemacht werden und sind z. B. für den Bereich El Triunfo sehr engständig (siehe Abb. 2.17).



Abbildung 4.7: Zusammenfassung der kritischen Punkte für die pT-Einordnung in nicht Granat führenden Metapeliten (Punkte $\otimes 1 - 4$, Erläuterung im Text).

4.2 Granat führende Metapelite

Mehrere Reaktionen kommen für die Bildung von Granat in Frage – hier wurden zunächst die Bildungen aus Staurolith und Chloritoid ausgeschlossen, da diese Phasen auch reliktisch nicht beobachtet werden. Übrig bleiben Reaktionskurven mit (Ms,) Chl und Bt, die eine starke Steigung in pT haben (siehe die Verwendung dieser Gleichgewichte als Thermometer).

Höher temperierte kontinuierliche und diskontinuierliche Reaktionen mit Granat, Cordierit, Alumosilikat, Biotit, Kalifeldspat und Schmelze wurden von Spear et al. (1999) in einem petrogenetischen Netz für Granat führende anatektische Metapelite für das System NKFMASH beschrieben. Eine wichtige Annahme hierbei ist, dass die zur Verfügung stehende fluide Phase ausschliesslich aus prograden Entwässerungs-Reaktionen stammt und die Schmelze nicht aus dem System abgeführt wird, so dass retrograde Reaktionen auch wieder mit dem Wasser, das bei der Kristallisation der Schmelze bleibt, ablaufen können. Ob dies für Gesteine der Sierra La Gata gilt, ist nicht klar – jedenfalls würde externe Fluid-Zufuhr höchstens mehr Schmelzbildung erlauben, nicht weniger. Zumindest in einigen Aufschlüssen werden stromatische Leukosome beobachtet, die auf ein Verbleiben der Schmelze im Gesteinsverband hindeuten (siehe z. B. Abb. 2.28 a).

Spear et al. (1999) und Pattison et al. (2002) (diskutiert in Abschnitt 4.1.1) verwenden den gleichen Alumosilikat - Tripelpunkt bei ca. 0,45 GPa und 540°C, so dass die quantitative Einordnung leicht fällt (Abbildung 4.8).

Folgende Reaktionen konnten beobachtet werden:

Als + Bt + Qtz + Ab	→L	(7)
1 Ms + 3 Chl + 3 Qtz	→ 4 Grt + 1 Bt + 12 H_2O	(8)
Grt + Chl	\rightarrow Bt + Als	(9)
Crd	\Rightarrow Als + Grt + H ₂ O	(10)
Als + Bt	→ Crd + Kfs + L (cf. Rkt. 6 mit H_2O)	(11)
Als + Bt	\rightarrow Grt + Crd + L (H ₂ O)	(12)



Abbildung 4.8: (vorherige Seite) petrogenetisches Netz in NKFMASH für Granat führende Pelite nach Spear et al. 1999. Alumosilikat-Phasengrenzen nach Pattison et al. 2002. Beobachtete Reaktionen sind eingezeichnet.

Folgende Beobachtungen für die Pelite der Sierra La Gata sind konsistent mit einem isobaren Aufheizungs- und Abkühlungspfad oberhalb von Ip1 (nach Spear et al. 1999):

- Bt + Sil Verwachsungen in Säumen um Leukosome
- Grt + Crd reagieren zu Bt + Sil
- Später Ms im Kern von Leukosomen

Granat und Cordierit – Reaktionen

In den entsprechend hoch temperierten Gesteinen der Sierra La Gata werden vor allem retrograde Reaktionen – also die Bildung von Bt + Als nach Crd+Grt, Crd+Kfs oder Grt+Kfs beobachtet. Abbildungen 4.9 und 4.10 zeigen einen Granat in Kontakt mit pinitisiertem Cordiert, dessen Form deutlich die Resorption zeigt. In der Matrix und v. a. zwischen einzelnen Granat-Körnern entstehen Bt+Sil eng miteinander verwachsen als Produkte der retrograd durchlaufenen Reaktion 12.



Abbildung 4.9: Grt – Crd Reaktionen. Crd ist komplett pinitisiert, Grt + Crd reagieren zu Bt + Sil nach Reaktion 12. Probe 133, Profil Santa Martha.



Abbildung 4.10: Detail aus 4.9: Crd-Pinit, Grt, Sil und Bt. Probe 133, Profil Santa Martha.



Abbildung 4.11: a) Sil+Bt – Säume um ca. 1mm breites Leukosom (PI+Qtz). Im Kern des Leukosoms sind späte Ms erkennbar (Pfeil). b) bei gekreuzten Nickols sind die PI-Qtz Symplektite gut sichtbar.

Reaktionen mit Schmelze

In anatektischen Metapeliten der Sierra La Gata werden Phasen beobachtet, die anhand der Mikro-Strukturen auf Reaktion mit einer Schmelze bzw. Kristallisation aus der Schmelze schließen lassen. Symplektite von Plagioklas und Quarz und Biotit und Sillimanit sind hier charakteristisch für die Reaktionen 11 und 12, die retrograd durchlaufen werden. Bt + Sil bilden bevorzugt Säume um Leukosome (siehe Abbildung 4.11a). Die Bildung von spätem Muskovit, vor allem im Kern von Leukosomen, erfolgt dann durch die Kristallisation der Schmelze unter Freisetzung des restlichen H₂O. Es wird sehr wenig Kalifeldspat erwartet, wenn der retrograde Pfad oberhalb des invarianten Punktes Ip1 liegt (Spear et al. 1999).



Abbildung 4.12 (Ausschnitt aus 4.11 b): Plagioklas – Quarz (links unten, Pl in Auslöschung mit Qtz Myrmekiten) und Biotit – Sillimanit (mitte rechts oben) Symplektite in anatektischen Gesteinen. Probe 3.21, Sierra La Gata.

4.3 Zusammenfassung: Modellreaktionen, metamorphe Zonen

Die beobachteten Reaktionen aus 4.1.1 und 4.1.2 werden zusammengefasst, um ein komplettes Bild für die Metapelite zu erreichen.

Zone	Bezeichnung	Kritische Paragenese	Modellreaktion	Rkt Nr.
Ia	Andalusit-	And+Bt+Qtz	$Ms+Chl = Als + Bt + Qtz + H_2O$	1
Ib	Zone	Grt+And+Bt+Qtz	Ms + Chl = Grt + Bt	1b
			And + Qtz + K^+ + $H_2O = Ms + H^+$	
IIa		Bt+And+Fib+Qtz	$Bt + Na^{+} + H^{+} = Ab + K^{+} + (Mg,Fe)^{2+} + H_2O$	
	Sillimanit- Muscovit-Zone		$Ms + Ab + (Mg,Fe)^{2+} + H_2O = Bt + Sil + Qtz + K^+ + Na^+ + H^+$	
IIb		Bt+Sil+/-And+Qtz	And = Sil	5
Ш	Cordierit-	Bt+Als+Grt+Crd	$\Delta ls + Bt = Crd + Grt + H_2O(I)$	12
	Granat-Zone	Dt / Als + Oft + Ofd	$Crd = Als + Grt + H_2O(E)$	10
			$Ms + Crd = Bt + Als + Qtz + H_2O$	3
IV	Sillimanit- Kalifeldspat- Zone	Sil+Kfs	$M_{S} + Q_{tZ} = Sil + Kf_{S} + H_{2}O$	4
V	Cordierit- Kalifeldspat- Zone	Crd+Kfs	$Bt + Sil + Qtz = Crd + Kfs + H_2O (L)$	6, 11

Tabelle 4.1: Modellreaktionen, kritische Mineralparagenesen in Metapeliten

Aus den petrogenetischen Netzen und unterschiedlichen beobachteten Paragenesen und Reaktionen lassen sich metamorphe Zonen ableiten (Tabelle 4.1). Vor allem durch die Beziehung zum invarianten Punkt Ip1 (Abb. 4.8) lassen sich zwei unterschiedliche pT-Pfade herausarbeiten – einer für den Bereich El Triunfo, ein anderer für den Bereich Sierra La Gata.

pT-Pfad El Triunfo

Die für die Metapelite von El Triunfo und La Muela/Las Palomas beobachteten Mineralparagenesen sind konsistent mit einem isobaren Aufheizungspfad bei ca. 0,3 GPa (< Ip1), dem im Peak der Temperatur-Entwicklung ein leichter Druck-Anstieg folgt. Das Auftreten von Sillimanit und partieller Anatexis ist nur an wenigen Stellen zu beobachten. Die Verteilung deutet darauf hin, dass die erreichte Temperatur durch die Nähe, bzw. geometrische Stellung zu intrusiven Gesteinen bestimmt wird (s. Abb 2.17, 2.22, Abschnitt 2.3.3). Die Überprägung durch dynamometamorphe Ereignisse durch duktile Aufschiebung spiegelt sich konsistent in Mineralparagenesen, in der Deformation der lagenparallel intrudierten Magmatite und in Schersinn-Indikatoren in den Metapeliten wieder (siehe Abschnitt 2.3.2).

In Abbildung 4.13 ist deshalb für den pT-Pfad ,El Triunfo' im hoch temperierten Bereich eine Zweiteilung gezeichnet, einige Gesteine zeigen Sillimanit, Kalifeldspat und partielle Anatexis, andere werden auf Grund ihrer Entfernung von den Intrusiva nicht so stark aufgeheizt. Für seichte bis mittlere Krusten-Niveaus sind solche Temperatur-Gradienten gut möglich (De Yoreo et al. 1991).

Dem pT-Pfad progressiv folgend durchlaufen die Gesteine von El Triunfo folgende Reaktionen:

- Ms+Chl (+Qtz) out Bildung von Bt+Als bzw. Crd+Ms.
- Einige Horizonte mit günstiger Gesamtgesteins-Chemie bilden Almandin-reichen Granat.
- Werden höhere Temperaturen erreicht, bilden sich Crd+Kfs (Ms+Qtz out) und Sillimanit nach Andalusit.
- Cordierit (+Ms oder +Kfs) reagiert durch den Druck-Anstieg zu Bt+Als+Qtz.
- Einige Einheiten zeigen partielle Anatexis mit feinen, stromatischen Leukosomen.
- Retrograde Reaktionen geben keinen Aufschluss über Druck-Bedingungen, es wird lediglich die Pinitisierung von Crd und, wo vorhanden, Chloritisierung von Grt beobachtet.

pT-Pfad La Gata

Die Gesteine der Sierra La Gata zeigen im Unterschied zum Bereich El Triunfo kaum Kalifeldspat, dafür späten Muskovit in Qtz+Pl-Leukosomen und in der Matrix, sowie Bt+Sil-Säume um schmale Leukosome. Reaktionen mit Granat und Cordierit werden häufig beobachtet. Die Paragenesen sind konsistent mit einem isobaren Aufheizungs- und Abkühlungspfad oberhalb von Ip1 (Abb. 4.8) und unterhalb des Alumosilikat-Tripelpunktes (vgl. Spear et al. 1999). Grt+Crd-konsumierende Reaktionen passen zur isobaren Abkühlung. Die Entwicklung zeigt sich deutlich in Aufschlüssen, in denen keine Abfuhr der anatektischen Schmelze stattfand – das bei der Kristallisation entstehende Wasser steht für die retrograden Reaktionen zur Verfügung. Der Einfluss von extern zugeführtem Fluid kann nicht ausgeschlossen werden, ist aber für die Erklärung der retrograden Geschichte nicht nötig. Auf dem prograden Pfad bringt der Einfluss von externem Fluid eine Erhöhung des Schmelz-Anteils.

In der pT-Entwicklung werden folgende Reaktionen durchlaufen:

- Bildung von Granat aus Ms+Chl+Qtz
- Bildung von wenig Sillimanit und Fibrolith nach Analusit

- Bildung von wenig Schmelze mit der Minimum-Schmelz-Reaktion (wenn keine externe Fluid-Zufuhr)
- Bildung von Schmelze nach der Muskovit-Dehydratationsreaktion (bis 70% des Volumens von Ms im Gestein nach Spear et al. 1999).
- Granat (und Cordierit) Wachstum bei weiterer T-Erhöhung (nach Rkt. 11, 12).
- Bei der Abkühlung Bildung von Bt+Sil nach Rkt. 11, 12 in retrograder Richtung, Kristallisation von Qtz+Pl mit Symplektiten.

Druck-Änderungen könnten über in KFMASH oder NaKFMASH kontinuierliche Reaktionen (Fe/Fe+Mg-Verhältnisse in Crd und Grt) abgeleitet werden, jedoch sind Cordierite wieder komplett pinitisiert, so dass eine Messung nicht möglich war.

Ein pT-Pfad im Uhrzeigersinn kann aber ausgeschlossen werden. Die pT-Entwicklung sollte in diesem Fall späten Crd+Bt, Leukosome mit Kfs und keinen späten Ms produzieren (Spear et al. 1999).



Abbildung 4.13: pT-Pfade bestimmt aus petrogenetischen Netzen. Reaktionen und Stabilitätsbereiche vereinfacht nach Abb. 4.7 und 4.8. Erläuterung im Text

5 Mineralchemie und Thermobarometrie

Im Unterschied zur Geothermobarometrie, die in 5.2 behandelt wird, ist die Möglichkeit, thermobarometrische Aussagen aus modellierten Phasendiagrammen zu machen, relativ neu (Connolly & Petrini 2002, Holland & Powell 2001, Tinkham et al. 2001). Petrogenetische Netze sind ein Standard-Werkzeug der Petrologie, jedoch ist es nur unter hohem rechnerischen Aufwand und mit einer guten thermodynamischen Datenbasis möglich, (Misch-)Phasenzusammensetzungen und Modi abhängig von Gesamtgesteinschemie, Druck und Temperatur und evtl. weiteren Parametern wie der Zusammensetzung der fluiden Phase vorauszusagen. Die Anwendung solch moderner petrologischer Mittel soll in diesem Abschnitt – unter der gebotenen Vorsicht bezüglich der Tücken der Kompatibilität von Mischungsmodellen und Datensätzen – versuchsweise dem ,klassischen' Herangehen der Thermobarometrie gegenüber gestellt werden.

5.1 Vorwärts – Modellierung von Phasendiagramm – Projektionen

Die in Abschnitt 4 behandelten petrogenetischen Netze sind ein Spezialfall der allgemeinen Phasendiagramm-Projektionen – nämlich Projektionen der Phasenbeziehungen auf die pT – Ebene. Rechner gestützte Verfahren ermöglichen die Modellierung thermodynamischer Systeme (wie in 3.2 beschrieben) und bieten als Möglichkeiten der Auswertung grafische Darstellungen beispielsweise in Form von Phasendiagramm - Projektionen oder - Schnitten. Bei bekannter oder angenommener Gesamtgesteins-Chemie können pT-Schnitte (sog. ,pseudosections') als wertvolles Hilfsmittel für die Betrachtung von Phasen-Beziehungen erzeugt werden. Zusätzliche Ableitungen für bestimmte Bedingungen (p, T, XCO₂, etc.) wie etwa der modale Gehalt einer bestimmten Phase oder die modellierte Zusammensetzung einer Mischphase sind möglich. Mit diesen Daten kann über den Vergleich mit gemessenen Paragenesen auch Themobarometrie betrieben werden.

Ein Vergleich von Modell und Wirklichkeit kann damit wertvolle Hinweise auf die Genese des Gesteins und die Entwicklung der Phasenbeziehungen im Zuge der Metamorphose geben (Connolly 1990, Connolly & Petrini 2002, Tinkham et al. 2001).

Mehrere Faktoren sind kritisch für die korrekte Modellierung der Systeme.

- Rahmenbedingungen des Modells: Gesamtgesteinschemie, Auswahl der Komponenten des thermodynamischen Systems, Annahmen zum Verhalten von Fluid oder Schmelze, Annahmen zum isochemen Verlauf der metamorphen Entwicklung oder Metasomatose, Einflüsse von Deformation, Hinweise zur Reaktionskinetik (mikrostrukturelle Anzeichen für Dis-Equilibrium) müssen erkannt und geprüft werden. Diese Daten müssen in die Definition des Modells, zumindest aber in die Interpretation der Ergebnisse einfließen.
- Die zugrunde liegenden in sich konsistenten thermodynamischen Datensätze müssen diskutiert werden. In der Literatur stehen mehrere Datenbasen zu Verfügung, die kontinuierlich weiter gepflegt werden (Auswahl): Powell & Holland (1988), Holland & Powell (1990, 1998, 2001, Thermocalc), Gottschalk (1997), Berman (1988) und Berman & Aranovich (1996, TWQ). Das hier verwendete Programm PERPLE_X erlaubt, unterschiedliche Datensätze zugrunde zu legen.
- Thermodynamische Mischungsmodelle f
 ür Mischphasen sind in stetiger Entwicklung. Die Anwendung eines Mischungsmodells muss diskutiert und dokumentiert werden. PERPLE_X ist derzeit (Juni 2004) mit 101 verschiedenen publizierten Mischungsmodellen verf
 ügbar (davon beispielsweise f
 ünf f
 ür Granate). Mischungsmodell und der verwendete thermodynamische Datensatz m
 üssen unbedingt zueinander passen. F
 ür die hier gemachten Modellierungen wurden entweder die von Holland & Powell (2001) publizierten, oder die von Connolly in der Dokumentation zu PERPLE_X explizit

als passend vorgeschlagenen Mischungsmodelle verwendet. In jedem Fall wurden die verwendeten Parameter mit dokumentiert.

5.1.1 Granat führender Metapelit von La Muela / Las Palomas

Gesteine aus den Profilen La Muela / Las Palomas sind nur in wenigen Horizonten Granat führend. Für die Probe 076 aus dem Profil La Muela (Lage siehe Abbildung 2.14) wurde mit PERPLE_X ein Phasendiagramm-Schnitt für die per RFA bestimmte Gesamtgesteins-Chemie erstellt.

Rahmenbedingungen für die Modellierung, Parameter

Das thermodynamische System besteht aus den Komponenten SiO₂, Al₂O₃, MnO, FeO, MgO, CaO, Na₂O und K₂O (MnNKFMASH). SiO₂ wird als gesättigte Komponente spezifiziert (freier Qtz ist im Gestein immer zu beobachten), die fluide Phase $H_2O - CO_2$ wird ebenfalls als gesättigt angenommen (XCO₂ wird als Parameter bei der Berechnung verwendet, Fluid-Mischungsmodell nach Holland & Powell 1998 – ,CORK'). Sättigung mit Muskovit oder Kalifeldspat wird nicht angenommen. Der thermodynamische Datensatz von Holland & Powell (2001) wurde verwendet. Folgende Mischungsmodelle wurden - auf Empfehlung von Connolly in der Dokumentation zu PERPLE_X - benutzt:

,AbPl' – für albitreichen Plagioklas bei Temperaturen < 839° (Newton et al. 1980),

,Gt(HP)' - für Granat (PryAlSpit, Holland & Powell 1998),

,Bio(HP)' - für Biotit (Holland & Powell 1998),

,Chl(HP)` - für Chlorit (Holland & Powell 1998),

,hCrd' - für Cordierit (ideale Mischung) und

,St(HP)' – für Staurolith (Holland & Powell 1998).

Staurolith wurde explizit mit eingschlossen, um zu prüfen, was die Modellierung für die Staurolith-Stabilität aussagen würde.

Zunächst wurde ein vereinfachter Phasendiagramm-Schnitt in pT erstellt, um die Stabilität von Paragenesen mit Granat darstellen und untersuchen zu können. Er ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Darauf wurden die Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse der einzelnen Fe-Mg- Mischphasen (Chl, Bt, St, Crd, Grt) in Falschfarben-Darstellung ausgewertet (Abbildungen 5.2 – 5.6). Diese Werte können im Zusammenhang mit den petrognenetischen Netzen aus Abschnitt 4 und mit den Ergebnissen der mineralchemischen Analysen (Abschnitt 5.2) verglichen werden. Darstellung der modalen Ms-Gehalte (Abbildung 5.7) zeigt sehr schön die Lage der Ms-out Reaktionen an.

Gesamtgesteinschemie der Probe 076:

SiO2	68,73
TiO2	0,85
Al2O3	14,92
Fe2O3	6,32
MnO	0,06
MgO	1,43
CaO	1,08
Na2O	1,95
K2O	1,65

La Muela 076 constrained bulk

Component saturation hierarchy: SIO2 Reaction equations are written such that the high T(K)assemblage is on the right of the = sign



Abbildung 5.1: modelliertes Phasendiagramm für den Metapelit Probe 076 – vereinfacht, nur die Paragenesen mit Granat sind dargestellt.

Y(CO2) =0.100E-01



Abbildung 5.2: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Chlorit in der Probe 076. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.3: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Biotit in der Probe 076. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.4: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Granat in der Probe 076. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.5: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Cordierit in der Probe 076. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.6: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse Staurolith in der Probe 076. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.7: modellierte modale Anteile für Muskovit in der Probe 076. p in bar, T in °K.

Diskussion der Modellierung

Die Modellierungen der Fe/(Fe+Mg) – Verhältnisse der einzelnen Phasen müssen mit Vorsicht interpretiert werden, weil – besonders im niedriger temperierten Teil der Darstellung bis ca. 500°C – mehrere Gleichgewichte in kontinuierlichen Reaktionen in Operation sind (Chl – Bt, Chl – Ctd, Chl – St, etc.), die die Fe-Mg-Verhältnisse einzelner Phasen und damit die Geometrie der Isoplethen unterschiedlich beeinflussen. Speziell überlappen sich "steile" Austauschreaktionen (wie Fe-Mg von Grt-Bt) mit "flacheren" (wie Bt-Crd).

Plausibilitätsprüfung

Im folgenden soll als Plausibilitätsprüfung ein isobarer Aufheizungspfad bei 0,3 GPa für das simulierte Gestein diskutiert werden, wie er als "Buchan-Type' beschrieben ist.

Die Entwicklung des Chlorites in Abb. 5.2 passt gut zu prograden "Buchan-Type' pT-Pfaden (z. B. Spear 1999). Bei 0,3 GPa beobachtet man im Modell zunächst einen Chlorit-Mischkristall, dessen Fe/(Fe+Mg) von 0,25 über eine Differenz von etwa 100°C bis 0,7 steigt. Zur Chl-out Reaktion bei ca. 570°C hin nimmt Fe-Mg wieder leicht ab.

Die sehr späte Bildung von Biotit (Abb. 5.3) spiegelt wohl den sehr niedrigen K₂O-Gehalt des Gesamtgesteins von nur 1,65 gew% wieder. Dadurch ergibt sich nur ein sehr schmaler Streifen (530°C bis 560°C bei 0,3 GPa), in dem Bt und Chl in Paragenese stabil sind. Spear (1999) errechnet in seinem Modell einen Stabilitätsbereich von ca. 540°C bis 570°C (bei p=0,35 GPa) für Bt+Chl für diesen Abschnitt eines pT-Pfades. Für den höher temperierten Bereich ab ca. 600°C zeigt Biotit für niedrigeren Druck (< 0,35 GPa) relativ flach liegende Fe-Mg-Isoplethen, die die kontinuierliche Austauschreaktion mit Cordierit (nach Reaktion 3 bzw. 6) spiegeln. Für den Bereich mit höherem Druck stellen die steil stehenden Isoplethen die Fe-Mg Austauschreaktion mit Granat dar.

Die Lage der Muskovit-out Reaktion scheint etwas zu niedrig bei 0,3 GPa schon bei 550°C (Abbildung 5.7 – hier ist der modale Anteil des Ms dargestellt).

Das zu niedrigem Druck und Temperatur etwas ,ausgefranst' dargestellte Feld für Granat (Abb. 5.4) wird bedingt durch verschiedene sich schneidende divariante Reaktionen, die die Stabilität von Grt begrenzen (divariante Reaktionen beispielsweise im Bezug auf Fe-Mg werden von PERPLE_X mit diskreten ,pseudo-compounds', also Alm₉₅, Alm₉₀, Alm₈₅, etc. modelliert, weswegen sich die einzelnen Kurven schneiden können). Die minimale pT-Bedingung wird mit ca. 580°C bei 0,3 GPa modelliert. Dies erscheint etwas zu hoch, allerdings hat das Gestein auch mit relativ wenig MnO (0,06 gew%) wenig Möglichkeit, den Granat zu niedrigen Temperaturen zu stabilisieren (Tinkham et al. 2001).

Das Feld der Crd - Stabilität, beginnend bei ca. 550°C, ist wieder in gutem Einklang mit Spear (1999, 540°C bei 0,35 GPa), auch die Bildung von zunächst Mg-reichem Crd mit Verschiebung zu höherem Fe/(Fe+Mg) bei höheren Temperaturen durch kontinuierliche Reaktionen mit Chl, Grt und Bt steht im Einklang mit der "Buchan-Type" Entwicklung. In der Probe 076 wurde allerdings modal kein Crd oder Pinit-Nester, wie in der Probe 133 (siehe folgender Abschnitt), beobachtet.

Die errechnete Stabilität von Staurolith für diese Gesamtgesteins-Chemie passt nicht zur Beobachtung – der Stabilitätsbereich von St wird, wie modelliert nur über einen Temperatur-Bereich von ca. 520°C bis 550°C, zu gerinem Druck hin wohl etwas überschätzt (bei Spear 1999 ist St von ca. 520°C bis 600°C bei p=0,35 GPa stabil, im petrogenetischen Netz von Spear et al. 1999 verengt sich der Bereich der St-Stabilität zu geringem Druck aber stark).

Vergleich mit gemessenen Fe-Mg - Verteilungen

Das Modell macht bezüglich der tatsächlich gemessenen Fe-Mg – Verteilungen offenbar sehr gute Aussagen: gemessen wurden an der Probe 076 für eine Grt-Bt Gleichgewichtsparagenese Alm₉₁ (Fe/Fe+Mg) und Ann₆₅ – wenn man diese Werte auf den Abbildungen 5.3 und 5.4 aufträgt, kommt man auf einen pT Bereich von minimal 0,3 GPa (untere Grenze der Granat-Stabilität) und etwa 580°C (=853°K). Nur die ,rechte untere' Ecke der Grt-Stabilität zeigt Werte über Alm₉₀, der Bereich mit Alm_{>90} bei 813°K und > 0,5 GPa wäre nicht mit Ann₆₅ im Gleichgewicht, weil dort auch noch Chl an Austauschreaktionen beteiligt ist. Die 580°C sind in gutem Einklang mit den Messungen mit Grt-Bt – Thermometern, der Druck wurde mit TWQ unter Einbeziehung von Pl auf maximal 0,35 GPa bestimmt (siehe Abschitt 5.2 – für die Thermometrie wurde allerdings $X_{Fe}(Grt)$ als Fe/(Fe+Mg+Mn+Ca) berechnet, deshalb weichen die Werte etwas ab).

Zusammenfassend ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung von Modell und Wirklichkeit, sowohl der gemessenen Probe 076 (mehr Daten dazu in Abschnitt 5.2), als auch der Literaturwerte (Spear 1999, Spear et al. 1999). Insbesondere die Möglichkeit, Granat für die gegebene Gesamtgesteinschemie für eine Abschätzung des minimalen Druckes verwenden zu können, ist erfreulich – zumal in den Gesteinen der Profile El Triunfo / La Muela / Las Palomas durch das fehlen von Crd die Druckbestimmung notorisch schwierig ist. Nachteilig ist, dass die Stabilität für St überschätzt, die für Ms unterschätzt wird.

5.1.2 Granat führender Metapelit der Sierra La Gata

Gesteine aus den Profilen Sierra La Gata sind in einigen Horizonten Granat führend. Für die Probe 133 aus dem Profil Santa Martha (Lage siehe Abbildung 2.27) wurde mit PERPLE_X ein Phasendiagramm-Schnitt für die per RFA bestimmte Gesamtgesteins-Chemie erstellt.

Rahmenbedingungen für die Modellierung, Parameter

Das thermodynamische System besteht aus den Komponenten SiO₂, Al₂O₃, MnO, FeO, MgO, CaO, Na₂O und K₂O (MnNKFMASH). SiO₂ wird als gesättigte Komponente spezifiziert (freier Qtz ist im Gestein immer zu beobachten), die fluide Phase $H_2O - CO_2$ wird ebenfalls als gesättigt angenommen (XCO₂ wird als Parameter bei der Berechnung verwendet, Fluid-Mischungsmodell nach Holland & Powell 1998 – ,CORK'). Sättigung mit Muskovit oder Kalifeldspat wird nicht angenommen. Der thermodynamische Datensatz von Holland & Powell (2001) wurde verwendet. Folgende Mischungsmodelle wurden - auf Empfehlung von Connolly in der Dokumentation zu PERPLE_X - benutzt:

,AbPl' – für albitreichen Plagioklas bei Temperaturen < 839° (Newton et al. 1980),

,Gt(HP)' - für Granat (PryAlSpit, Holland & Powell 1998),

,Bio(HP)' - für Biotit (Holland & Powell 1998),

,Chl(HP)` - für Chlorit (Holland & Powell 1998) und

,hCrd' – für Cordierit (ideale Mischung).

Zunächst wurde ein vereinfachter Phasendiagramm-Schnitt in pT erstellt, um die Stabilität einzelner Paragenesen darstellen und untersuchen zu können. Er ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Darauf wurden die Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse der einzelnen Fe-Mg- Mischphasen (Chl, Bt, Crd, Grt) in Falschfarben-Darstellung ausgewertet (Abbildungen 5.9 - 5.13). Diese Werte können im Zusammenhang mit den petrognenetischen Netzen aus Abschnitt 4 und mit den Ergebnissen der mineralchemischen Analysen (Abschnitt 5.2) verglichen werden.

Gesamtgesteinschemie der Probe 133:

SiO2	61,79
TiO2	0,85
AI2O3	16,10
Fe2O3	8,06
MnO	0,11
MgO	2,20
CaO	3,00
Na2O	2,46
K2O	2,91

La Gata constrained

Component saturation hierarchy: SIO2 Reaction equations are written such that the high T(K)assemblage is on the right of the = sign





Abbildung 5.8: modelliertes Phasendiagramm für den Metapelit Probe 133 - vereinfacht.



Abbildung 5.9: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Chlorit in der Probe 133. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.10: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Biotit in der Probe 133. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.11: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse für Granat in der Probe 133. p in bar, T in °K.



Abbildung 5.12: modellierte Fe/(Fe+Mg)-Verhältnisse Cordierit in der Probe 133. p in bar, T in °K.





Diskussion der Modellierung

Im Unterschied zur Probe 076 sind die Stabilitätsbereiche für Bt, Chl, Grt, Ms entschieden größer. Das Gestein weist auch in der Analyse weniger SiO_2 auf (62 gegenüber 68 gew%). Im Dünnschliff wird auch modal relativ viel Granat und (pinitisierter) Cordierit beobachtet.

Insbesondere für Muskovit zeigt sich in Abbildung 5.13 ein interessanteres Bild – die breite Verteilung der Abnahme von modalem Ms-Anteil von 650° K bis 750° K zeigt, dass die kontinierlichen Reaktionen, in denen Ms verbraucht wird, über einen breiteren Bereich ablaufen. Auch die in KFMASH diskontinuierliche Reaktion (4) Ms+Qtz out bekommt in NaKFMASH einen ähnlich verlaufenden "Partner" mit der Bildung von Albit zur Seite gestellt – das Angebot an Na₂O und K₂O im Gestein ist wesentlich reicher verglichen mit Probe 076, deshalb gewinnen diese Reaktionen an Bedeutung.

Biotit erreicht im Vergleich zu Probe 076 wesentlich weniger Fe-reiche Zusammensetzung (max. Ann_{65} im Vergleich zu max. Ann_{85} in Probe 076). Hier zeigt sich die relativ Fe-ärmere Zusammensetzung des Gesteins – auch der Granat hat einen relativ höheren Pyrop-Anteil.

Das Stabilitätsfeld für Granat ist zu niedrigeren Drucken und zu etwas niedrigeren Temperaturen erweitert – das zeigt sich auch darin, dass Granat in den Gesteinen der Sierra La Gata relativ häufig zu beobachten ist.

Die Modellierung der Schmelzbildung war nicht erfolgreich – bis zum maximalen Bereich bei 973°K und 0,1 - 0,6 GPa zeigte das Modell keine Anatexis. Offensichtlich passen hier die verwendeten Modelle und die Datenbasis trotz Empfehlung (Connolly & Petrini 2002) nicht zusammen.

Die Ergebnisse der Modellierung stehen insgesamt in gutem Einklang mit der tatsächlichen Beobachtung, insbesondere die Überprüfung der - leider komplett pinitisierten – Cordierite wäre dazu interessant gewesen.

5.1.3 Gneise von Punta Lobos

Die Mineralogie der Gneise von Punta Lobos wurde in Abschnitt 2.2.1 kurz angesprochen. Man beobachtet ein Kalksilikat-Gestein, das in einigen Bereichen eher amphibolitischen Charakter hat, in anderen jedoch fast nur aus Kalksilikat-Mineralen besteht. Es war nicht möglich, diese Bereiche im Kartenmassstab auszuhalten – die räumlichen Beziehungen sind eng und unregelmässig.

Für die Kalksilikat-Gesteine wurden von Aranda-Gómez & Pérez-Venzor (1989) mergelige Metasedimente als Ausgangsgesteine vermutet. Da aber auch rein amphibolitische Bereiche mit Pl + Hbl + Qtz \pm Cpx \pm Ep beobachtet werden, sollte hier auch die Möglichkeit der Ca -Metasomatose eines Basites betrachtet werden. Wie in Abschnitt 2.2.1 besprochen ist dabei aus den Phasenbeziehungen im ACF-Diagramm zu ersehen, dass eine basische Gesamtgesteinschemie für die Bildung von Grandit zum C-Apex des Diagramms hin über die Konode Ep – Cpx verschoben werden muss. Der Grandit ist zudem nur bei sehr niedrigem XCO₂ der fluiden Phase stabil (Bucher & Frey 1995, p. 241), was auf die Beteiligung eines extern zugeführten Fluids schliessen lässt.

In jedem Fall muss aber die auffällige Fe-reiche Zusammensetzung des Grandit-Mischkristalls mit Gr₂₀₋₃₀ erklärt werden. Grossular - reiche Paragenesen wurden in Hochdruck-Metamorphen Metabasiten eingehend untersucht (Grs-Hydrogrossular, Huckenholz & Fehr 1982, Fehr 1992), während Andradite (und Hydroandradite) oft aus Skarnen beschrieben werden (Deer et al. 1992).

Rahmenbedingungen für die Modellierung, Parameter

PERPLE_X (siehe Abschnitt 3.2.4) wurde benutzt, um für verschiedene Gesamtgesteins-Chemien Projektionen der Phasenbeziehungen auf die pT-Ebene zu erstellen und mit den beobachteten Phasenbeziehungen zu vergleichen.

Dazu wurde ein hypothetischer MOR - Basalt (Bucher & Frey 1995, p. 17) mit schrittweise mit höherer CaO-Konzentration unter drei verschiedenen Bedingungen für XCO₂ (0,001, 0,01, 0,1) und für einen Bereich von 0,1 bis 0,6 Gpa und 200° bis 700°C modelliert. Die Gesamtgesteinschemien sind in Tabelle 5.1 gelistet. Dabei wurde ausgehend von der MORB-Chemie CaO sukzessive erhöht und jeweils wieder auf 100% normiert, so dass alle anderen Komponenten die gleiche relative Minderung erfahren. Es wird also keine selektive Abfuhr von z. B. SiO₂ angenommen. Die Bezeichungen für die Modelle ("M20", etc.) richten sich nach den molaren Verhältnissen (also ca 20 mol% CaO für "M20").

Bulk wt%	М	M12	M14	M16	M18	M20	M22
SIO2	49,44	48,43	47,44	46,44	45,61	44,88	44,13
TIO2	2,04	2	1,96	1,92	1,88	1,85	1,82
AL2O3	16,18	15,84	15,52	15,19	14,92	14,68	14,44
FEO	10,53	10,32	10,11	9,89	9,72	9,56	9,4
MNO	0,50	0,49	0,48	0,47	0,46	0,46	0,45
MGO	6,47	6,33	6,21	6,07	5,97	5,87	5,77
CAO	10,51	12,27	13,95	15,54	17,12	18,67	20,15
NA2O	3,03	2,96	2,9	2,84	2,79	2,75	2,7
H2O	0,81	0,88	0,96	1,17	1,09	0,85	0,71

Tabelle 5.1: (vorherige Seite) Gesamtgesteinschemien für die Modellierung der Gneise Punta Lobos, CaO-Anstieg nach rechts.

Das thermodynamische System besteht aus den Komponenten SiO₂, TiO₂, Al₂O₃, MnO, FeO, MgO, CaO, Na₂O und O₂. SiO₂ wird als gesättigte Komponente spezifiziert (freier Qtz ist im Gestein zu beobachten), die fluide Phase $H_2O - CO_2$ wird ebenfalls als gesättigt angenommen (XCO₂ wird als Parameter bei der Berechnung verwendet, Fluid-Mischungsmodell nach Holland & Powell 1998 - CORK). O₂ muss als Komponente des Systems spezifiziert werden (PERPLE_X erlaubt nur FeO (nicht Fe₂O₃) als Komponente, Grandit, Epidot/Klinozoisit und Hornblenden benötigen für die Mischungsmodelle aber drei-wertiges Eisen). Eisen wurde komplett in FeO umgerechnet. Folgende Mischungsmodelle wurden spezifiziert:

,AnPl' – für anorthitreichen Plagioklas bei Temperaturen < 839° (Newton et al. 1980),

,GrAd' - für Grandit zunächst unter Annahme idealer Mischung (!),

,Cpx(l)' - für Klinopyroxen (Gasparik 1984, 1985) und

,TsTrPg(HP)' - für Amphibole nach Wei & Powell (2003) und White et al. (2003).

Chlorit wurde nicht als Mischphase mit einbezogen, weil er nicht in den beobachteten Paragenesen, sondern nur retrograd vorkommt. Berechnung des Chlorit Mischungsmodells nach Holland et al. (1998) treibt die Rechenzeiten um ein Vielfaches in die Höhe. Für Grandit haben Engi & Wersin (1987) und Fehr (1992) nicht-ideale Mischung erkannt und 2-Paremeter Margules, bzw. 3-Parameter Redlich-Kister Gleichungen beschrieben. Modellierung mit nicht-idealer Mischung wird weiter unten behandelt.

Zunächst wurde ein isobarer TX_{CO2} – Schnitt zur Verdeutlichung der Abhängigkeit der Grandit-Bildung von der Zusammensetzung der fluiden Phase modelliert. Es zeigt sich, dass für den mit CaO angereicherten Metabasit M18 zwei Stabilitätsfelder errechnet werden: eines, das ab niedrigen Temperaturen nur bei niedrigem XCO₂ dargestellt wird (in Paragenese mit Ep), sowie ein zweites ab ca. 550°C, das von XCO₂ fast unabhängig ist (in Paragenese mit Cpx).

Die im Modell vorhergesagte Reaktion Cc+An+Hem \rightarrow Ab + Grs, also Bildung des Grs aus der Anorthit-Komponente des Plagioklas ist fragwürdig, die minimale Bildung könnte einfacher aus Cc, Qtz, Hem erklärt werden.

Die vorgergesagten Paragenesen sind jedoch interessant und werden auch so beobachtet – im zweiten Schritt wurde ein isobarer Schnitt modelliert, mit gew% CaO des Gesamtsystems als variabler Größe (Abbildungen 5.15 und 5.16 bei unterschiedlichem XCO_2).

Ein guter, anschaulicher und leicht nachvollziehbarer Test für die Richtigkeit der vorhergesagten Paragenesen ist die Betrachtung eines (isobaren) Aufheizungspfades in Abbildung 5.3 für eine normale basische Gesamtgesteinschemie, also am linken Rand des Diagramms. Dadurch, dass beispielsweise Chlorit_{SS} und Aktinolith als (Misch-)Phasen ausgeschlossen wurden, ergbit sich für die Grünschiefer-Fazies ein ,schiefes' Bild, weil andere Phasen über-repräsentiert sind, dennoch kann man folgende Darstellung konsistent mit allgemeinen Darstellungen der Basit-Metamorphose (z. B. Bucher & Frey 1995) erreichen:

T [°K, °C]	Modellierte Paragenese, Erklärung					
~560°K, ~290 °C	Auftreten von Albit (und Aktinolith, Chlorit); Epidot, Albit (+Aktinolith):					
~650°K, ~380°C	TrTsPg(HP): spiegelt die Bildung von Tschermaks-Komponente als Änderung innerhalb der Grünschiefer-Fazies wieder					
~730°K, ~460°C	Auftreten von Anorthit, mit Hbl (dargestellt durch ,TrTsPg') charakteristisch für den Übergang zur Amphibolit-Fazies					
~820°K, ~550°C	Auftreten von Cpx, Änderung innerhalb der Amphibolit-Fazies					

Tabelle 5.2: modellierte Paragenesen für einen Metabasit nach Abbildung 5.16.

M18 vs. XCO2

Component saturation hierarchy: SIO2 Reaction equations are written such that the high T(K)assemblage is on the right of the = sign



P(bar) = 0.300E+04

Abbildung 5.14: isobarer TX_{CO2} – Schnitt für die fixierte bulk-Zusammensetzung M18. Der Übersicht halber sind die Beschriftungen der pseudo-invarianten Punkte entfernt. Grandit-Stabilität links bzw. oberhalb der Kurven.

Meta-Basit 10,5 - 17,1 wt% CaO

Component saturation hierarchy: SIO2 O2 Reaction equations are written such that the high T(K) assemblage is on the right of the = sign





Meta-Basit 10,5 - 17,1 wt% CaO

Component saturation hierarchy: SIO2 O2 Reaction equations are written such that the high T(K)assemblage is on the right of the = sign

P(bar) = 0.300E+04



Abbildung 5.16: alterierter Metabasit: isobarer TX_{CaO} – Schnitt für X_{CO2} = 0,01. Pfeil: Aufheizungspfad für Tabelle 5.2.

Die Berechnung der Phasenbeziehungen auf der pT-Ebene zeigen dann drei Stabilitätsbereiche für Grandit:

einen niedrigen um ca. 300°C und bis ca. 0,15 GPa bei $XCO_2 \ll$,

einen mittleren um ca. 310°C bei 0,25 bis 0,3 GPa bei $XCO_2 \ll$,

sowie einen hohen ab ca. 550°C bei 0,3 GPa unabhängig von XCO2.

Für die Modelle M12 bis M16 konnte Grandit-Bildung zunächst nur im niedrigen Bereich, ab M18 beginnend auch im mittleren Bereich festgestellt werden. Modellierte Paragenesen sind Grs_{SS} , Ep/Cz, Ab, Hem, Qtz, Grandite haben die Zusammensetzung Grs_{42} -Adr₃₈ (niedriger Bereich) und Grs_{60} -Adr₄₀ (mittlerer Bereich). Schon ein $XCO_2 > 0,001$ destabilisiert den Grandit. Die modalen Verhältnisse sind in Abbildung 5.17 dargestellt, maximal werden bis 12% Grandit erwartet.



Abbildung 5.17: Falschfarben-Darstellung der modellierten modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M12, M14 und M18. $Xco_2 = 0,001$, p in bar, T in^oK.

Führt man dem System weiter CaO zu, so wird unabhängig von XCO_2 ab M20 das dritte Stabilitätsfeld erreicht. Hier ist die modellierte Paragenese Cpx+Pl+Grandit+Ab+Hem+Qtz (vgl. Abb. 5.16). Die modellierte Grandit-Zusammensetzung ist Grs₂₅ – Adr₇₅. Modal werden allerdings nur maximal 5 vol% Grandit erwartet.



Abbildung 5.18: Falschfarben-Darstellung der modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M20, M21, M22 bei $Xco_2=0,001$ und $Xco_2 > 0,01$, p in bar, T in^oK.

Diskussion der Modellierung

Die Aussagen des Modells sind offensichtlich mit Vorsicht zu betrachten. Zwar wird die Aussage des ACF-Diagramms, wonach die Bildung von Grandit möglich ist, wenn sich die Gesamtgesteinschemie in Richtung des C-Apexes bewegt (Abbildung 2.10), durch die isobaren TX_{CaO} -Schnitte gestützt (Abb. 5.15 und 5.16), jedoch ist die im Modell vorhergesagte Reaktion Cc+An+Hem \rightarrow Ab + Grs fragwürdig.

Auffällig ist aber die gute Vorhersage des beobachteten Grandit-Mischkristalls der ,oberen Stabilität' in Paragenes mit Cpx (Grs₂₅ – Adr₇₅). Tatsächlich wurden in der Probe 080a Werte um

Adr₇₀₋₈₀ gemessen. Die modalen Gehalte (vorhergesagt 5%) stimmen jedoch nicht mit den wirklichen überein (in Lagen tw. >20% Grandit).

Die ,mittleren' und ,niedrigen' Stabililtätsbereiche sind als Skarn-Bildungen mit Grs₄₀₋₆₀ bekannt (Deer et al. 1992).

Eine vorsichtige These zur Erklärung der modellierten und beobachteten Werte könnte wie folgt lauten: die beobachtete Paragenese mit Cpx-Adr hat sich reliktisch vom Temperatur-Peak erhalten (>550°C bei 0,3 GPa), Abbildung 5.16. Auf dem retrograden Pfad kam es zu einer Überprägung mit einer CO₂-armem fluiden Phase, bedingt dadruch Re-Equiibrierung, das fleckige Aussehen und die irreguläre Zonierung, sowie die Stabilität zusammen mit Ep.

Bedeutung des verwendeten Mischungsmodells

Probehalber wurde das Mischmodell von Engi & Wersin (1987) für Grandit verwendet. Es ist zu erwarten, dass dieses Modell, obschon es die nicht-ideale Mischbarkeit der Grandite beschreibt, nicht zu optimalen Ergebnissen führen wird, weil gerade für hohe Andradit-Anteile die Mischbarkeit falsch beschrieben wird (Fehr 1992, Heuss-Aßbichler & Fehr 1997). Es war leider nicht möglich, das Mischungsmodell von Fehr (1992) in PERPLE_X einzubauen.

Der Unterschied durch das verwendete Mischmodell zeigt sich im Vergleich von Abbildung 5.18 (ideale Mischung) mit Abbildung 5.19 (Engi & Wersin). Auffallend ist die stark erhöhte Stabilität von Grandit – selbst bei geringeren gew% CaO Werten entsprechend M16 wären modal bis 25% Grandit bei ca. 300°C zu beobachten. Dies erscheint unrealistisch, deswegen wird das Modell der idealen Mischung vorgezogen, obwohl es die realen Bedingungen ebenfalls nicht richtig wiedergeben wird.



Abbildung 5.19: Falschfarben-Darstellung der modalen Grandit-Gehalte in den Modellen M12 – M16 bei $Xco_2=0,001$ und $Xco_2 > 0,01$, p in bar, T in°K. Modellierung unter Verwendung des Mischungsmodells von Engi & Wersin (1987) für Grandit. Merklich erweiterte Stabilität und vorhergesagte modale Gehalte für Grandit.

5.2 Thermobarometrie

Für thermobarometrische Bestimmungen wurden jeweils Punktpaare einer Paragenese gemessen, die zuvor mikroskopisch identifiziert und mit der Mikrosonde mit einem BSE (back-scattered electron) – Bild abgebildet wurde. In diesem Abschnitt sind jeweils die zur Berechnung nötigen Werte in tabellarischer Form mit den Ergebnissen nach verschiedenen Kalibrierungen dargestellt. Die vollständigen Analysen finden sich im Anhang.

5.2.1 Metapelite El Triunfo

Probe 076, Granat-Biotit Thermometer

Es wurden an drei Granaten 14 verschiedene Granat-Biotit Punktpaare gemessen, drei Punktpaare mussten als Mischanalysen ausgeschlossen werden (Messwerte in Anhang 8.2.1). Berechnung erfolgte für einen Druck von 0,3 GPa mit den publizierten Thermometern von Ferry & Spear (1978), Perchuck & Lavrent'eva (1983) und Holdaway (2000). Abkürzungen in den Tabellen entsprechend. Das Thermometer von Holdaway (2000) berechnet lnKD intern im bereitgestellten Programm ,GB', so dass die hier eingegebenen Werte die rohen berechneten Kationen-Werte sind, und nicht die in der Tabelle gelisteten X bzw. lnKD.

Granat- Biotit Paar	XFe(Grt)	XMg(Grt)	XFe(Bt)	XMg(Bt)	InKD	T[°C] F+S 1978	T[°C] P+L 1983	T[°C] H 2000
1_6	0,7386	0,0660	0,6530	0,3470	-1,78344038	552	569	589
3_2	0,7412	0,0716	0,6395	0,3605	-1,76442248	559	573	582
2_1	0,7359	0,0698	0,6538	0,3462	-1,71978387	573	581	594
3_1	0,7470	0,0707	0,6548	0,3452	-1,71695389	574	582	595
3_3	0,7329	0,0763	0,6397	0,3603	-1,68796946	584	587	595
3_5	0,7408	0,0709	0,6616	0,3384	-1,67639058	588	589	596
1_9	0,7319	0,0802	0,6427	0,3573	-1,6235428	607	599	606
3_4	0,7313	0,0802	0,6460	0,3540	-1,60951579	612	602	602
3_6	0,7263	0,0808	0,6540	0,3460	-1,56004396	631	612	629
1_10	0,7382	0,0734	0,6770	0,3230	-1,56881958	628	610	613
1_1	0,7348	0,0781	0,6786	0,3214	-1,49478581	657	625	630

Daraus ergeben sich folgende Mittelwerte:

	T[°C]	T[°C]	T[°C]
	F+S 1978	P+L 1983	H 2000
Mittelwert	597	594	603
Standardabw.	31	17	15

Tabelle 5.3 a, b: Ergebnisse und Mittelwerte der Grt-Bt Thermometer für Probe 076.

Die ca. 600°C stehen in gutem Einklang mit Modellen (Abschnitt 5.1.1) und petrogenetischem Netz (Abschnitt 4.1.1).

Abbildung 5.20 zeigt einen Plot der KD-Werte der Analysen der Probe 076 – die Tatsache, dass Punktpaare von drei verschiedenen gemessenen Granaten der Probe eine gute Regression erlauben, lässt auf eine gute Equilibrierung der Probe schliessen. Dies zeigt sich auch in den Standardabweichungen der berechneten Thermometer (Tabelle 5.3 b).



Abbildung 5.20: Plot der KD-Werte der Grt-Bt Punktpaare für Probe 076.

Probe 076, GASP-Barometer

Das GASP-Barometer konnte zu einer Druck-Abschätzung verwendet werden. Berechnung erfolgte für den Granat 3 (Tabelle 5.5) in Koexistenz mit Plagioklas. Als Temperatur wurde die am gleichen Granat mit Grt-Bt bestimmte eingesetzt, Berechnung wurde für And als Alumosilikat-Polymorph druchgeführt. Verwendete Kalibrierungen für GASP sind Koziol & Newton (1988), Koziol (1989), Holdaway (2001). Abkürzungen in den Tabellen entsprechend. Berechnungen wurden mit GPT (Reche & Martinez 1996) für K+N (1988) und K (1989) durchgeführt, für H (2001) wurde das von Holdaway bereitgestellte Programm GBGASP benutzt. Für Holdaway (2001) ist der für das Punktpaar 3_5 aus dem Grt-Bt Thermometer errechnete Temperatur-Wert nach Holdaway (2000) aus Tabelle 5.3 a zugrunde gelegt (dies entspricht dem von Holdaway empfohlenen Vorgehen (siehe Abschnitt 3.2.5).

Granat-							
Plagioklas					p[GPa]	p[GPa]	p[GPa]
Paar	XGrs(Grt)	Xan(Pl)	Xab(PI)	Xk(Pl)	K+N 1988	K 1989	H 2001
3_5	0,0330	0,2800	0,7090	0,0020	0,365	0,247	0,238

Tabelle 5.4: Ergebnisse der berechneten GASP-Barometer für Probe 076.

Probe 076, Berechnung mit WebInvEq auf Basis TWEEQU 1.02

Mit dem im Internet veröffentlichten Service von Gordon (1992), Gordon et al. (1994) wurden die mittleren Werte der obigen Tabellen (Grt-Bt – Paar 3_5) für Grt, Bt, Pl (+And+Qtz) berechnet. Das Ergebnis und die Schnittpunkte der voneinander unabhängigen Gleichgewichte sind in Abbildung 5.21 dargestellt.

Ergebnisse der berechneten Thermobarometer und des hier benutzten Web-Service, der einen Satz unabhängiger Gleichgewichte löst, zeigen eine sehr gute Übereinstimmung.





Abbildung 5.21: Grafische Darstellung der Ergebnisse der WebInvEq - Web-Berechnung für Probe 076 (Gordon 1992, Gordon et al. 1994).

5.2.2 Metapelite Sierra La Gata

Probe 128, Elementverteilungsbilder

Probe 128 aus dem Profil Santa Martha enthält die Paragenese Grt+(pinit.)Crd+Bt+Sil+Pl+Qtz. Biotit ist chloritisiert. Im Elementverteilungsbild (Abb. 5.22 b) erkennt man, dass die Pyrop-Komponente des Granats zum Rand hin Diffusionserscheinungen anzeigt, Grs zeigt eine leichte Erhöhung in einer diskreten Zone am Rand (Abb. 5.22 a). Bt und Chl sind eng verwachsen und zeigen unterschiedliche Fe-Mg – Verteilung. Diese Erkenntnis ist wichtig, weil man bei Punktmessungen sonst leicht eine "Mischung' aus Bt und Chl misst. Die Elementverteilungsbilder sind darum sehr wertvoll und notwendig für die Interpretation der Thermometer. Granat und Biotit sind deutlich gegeneinande re-equilibriert (Pfeil in Abb. 5.22 b). Rund um ein kleines Plagioklas-Korn ist links unten in Abb 5.22 a) ebenfalls Re-Equilibrierung im Granat zu sehen.



Abbildung 5.22: Elementverteilungsbilder Granat 3, Probe 128. a) links für Ca und b) rechts für Mg.

Probe 128, Granat-Biotit - Thermometer

Es wurden an zwei Granaten vier verschiedene Granat-Biotit Punktpaare gemessen (Messwerte in Anhang 8.2.2). Es standen nur wenige gute Bt-Messungen wegen der besprochenen Chloritisierung zur Verfügung. Berechnung erfolgte für einen Druck von 0,3 GPa mit den publizierten Thermometern von Ferry & Spear (1978), Perchuck & Lavrent'eva (1983) und Holdaway (2000). Abkürzungen in den Tabellen entsprechend. Das Thermometer von Holdaway (2000) berechnet lnKD intern im bereitgestellten Programm ,GB', so dass die hier eingegebenen Werte die rohen berechneten Kationen-Werte sind, und nicht die in der Tabelle gelisteten X bzw. lnKD.

Granat- Biotit Paar	XFe(Grt)	XMg(Grt)	XFe(Bt)	XMg(Bt)	lnKD	T[°C] F+S 1978	T[°C] P+L 1983	T[°C] H 2000
2_1_2_1	0,7765	0,0923	0,5625	0,4375	-1,87837977	527	555	567
2_2_2_2	0,7836	0,0943	0,5390	0,4610	-1,96162498	502	540	536
3_3_3_4	0,7797	0,0943	0,5656	0,4344	-1,84876833	536	560	570
3_5_1_3	0,7805	0,0855	0,5507	0,4493	-2,00838359	489	533	546

Daraus ergeben sich folgende Mittelwerte:

	T[°C]	T[°C]	T[°C]
	F+S 1978	P+L 1983	H 2000
Mittelwert	513	547	555
Standardabw.	18	11	14

Tabelle 5.5 a, b: Ergebnisse und Mittelwerte der Grt-Bt Thermometer für Probe 128.

Probe 128, Granat-Chlorit - Thermometer

Das Granat-Chlorit Thermometer (Grambling 1990) ergibt eine Temperatur von 482 °C – dies ist im Einklang mit der beobachteten Re-Equilibrierung und Chloritisierung bei der Abkühlung.

Granat- Chlorit					T[°C]
Paar	XFe(Grt)	XMg(Grt)	XFe(Chl)	XMg(Chl)	G 1990
3_3_3_6	0,780	0,094	0,498	0,502	482

Tabelle 5.6: Ergebnisse des Grt-Chl Thermometers für Probe 128.

Probe 128, GASP-Barometer

Das GASP-Barometer konnte wegen der Re-Equilibrierung bezüglich Ca nur zur Abschätzung eines minimalen Druckes benutzt werden. Gemessen wurde Granat3 und Plagioklas im Kontakt mit dem Grt und Sillimanit und Biotit (aus Abbildung 5.22). Berechnungen wurden mit GPT (Reche & Martinez 1996) für K+N (1988) und K (1989) durchgeführt, für H (2001) wurde das von Holdaway bereitgestellte Programm GBGASP benutzt. Für Holdaway (2001) ist die für das Punktpaar 3_3_3_4 aus dem Grt-Bt Thermometer errechnete Temperatur-Wert nach Holdaway (2000) aus Tabelle 5.5 a zugrunde gelegt (dies entspricht dem von Holdaway empfohlenen Vorgehen (siehe Abschnitt 3.2.5).

Granat-							
Plagioklas					p[GPa]	p[GPa]	p[GPa]
Paar	XGrs(Grt)	Xan(PI)	Xab(PI)	Xk(PI)	K+N 1988	K 1989	H 2001
3_3_3_8	0,056	0,414	0,582	0,004	0,31	0,19	0,27

Tabelle 5.7: Ergebnisse der berechneten GASP-Barometer für Probe 128.

5.2.3 Metapelite Boca de la Sierra

Probe 191, Elementverteilungsbilder

In der Probe 191 wurden in bis 2 mm großen Granaten Einschlussparagenesen von Qtz+Pl+Ilm+Bt±Sil beobachtet (Abschnitt 2.6.1). Minerale dieser Paragenesen wurden mit der Mikrosonde gemessen und ausgewertet. Granate wurden in Kern- und Rand-Bereiche gegliedert. Ein Beispiel zeigt die Abbildung 5.23 (Granat1, BSE-Bild, Maßstab 500 µm).



Abbildung 5.23: Messbereiche Granat1, Probe 191. BSE-Bild.

Elementverteilungsbilder zeigen die Abnahme der Prp-Komponente zum Rand und die Minerale der Einschlussparagenese. Abbildung 5.24 zeigt:

- a) Elementverteilung Mg Abnahme der Prp-Komponente zum Rand, Bt als Einschlüsse (hohe Intensität, gelb-rote Färbung)
- b) Elementverteilung Ca Plagioklase im Kern (hellblaue Färbung), Kalzit (hohe Intensität, gelb-rote Färbung)



Abbildung 5.24: a (links): Elementverteilung Mg, b (rechts): Elementverteilung Ca. Granat 1, Probe 191 (Ausschnitt wie in Abbildung 5.23)
Probe 191, Granat 2, Granat-Biotit Thermometer Kern/Rand

Es wurden am ,Granat2' 9 verschiedene Granat-Biotit Punktpaare gemessen (Messwerte in Anhang 8.2.3). Berechnung erfolgte für einen Druck von 0,3 GPa mit den publizierten Thermometern von Ferry & Spear (1978), Perchuck & Lavrent'eva (1983) und Holdaway (2000). Abkürzungen in den Tabellen entsprechend.

Granat- Biotit Paar	T[°C] F+S 1978	T[°C] P+L 1983	T[°C] H 2000
1_2	553	570	583
3_4	509	544	590
5_6	523	553	556
7_8	527	555	570
9_10	689	641	556
12_15	685	639	639
16_17	553	570	566
18_19	574	581	566
30_31	573	581	596

Tabelle 5.8: Grt-Bt Temperaturen Granat2, Probe 191: grau hinterlegte Spalten sind Messungen des Granat-Kerns.

Die beiden Paare aus dem Kern zeigen eine höhere Temperatur von >630 °C an, während die Rand - Paare Werte um ~560-580 °C anzeigen.

Probe 191, Granat 1, Granat-Biotit Thermometer, GASP-Barmometer Kern/Rand

Das GASP-Barometer konnte zu einer Druck-Abschätzung verwendet werden. Berechnung erfolgte für den Granat 1 (Tabelle 5.8) in Koexistenz mit Plagioklas-Einschlüssen. Als Temperatur wurde die im gleichen Bereich des Granats mit Grt-Bt bestimmte eingesetzt, Berechnung wurde für Sil als Alumosilikat-Polymorph druchgeführt. Verwendete Kalibrierung für GASP ist Holdaway (2001). Abkürzungen in den Tabellen entsprechend. Für die Berechnungen wurden die von Holdaway bereitgestellten Programme GB, GASP und GBGASP benutzt.

Es zeigt sich nicht sehr deutlich sichtbar eine leichte Druck- und Temperatur-Erhöhung vom Kern zum Rand (siehe Durchschnittswerte in Tabelle 5.9). Wichtig zu beachten ist, dass die gemessenen Pl- und Bt-Einschlüsse innerhalb der Zone liegen, für die im Granat 1 noch kein Abfallen der Prp-Komponente beobachtet wird – dies ist erst noch weiter zum Rand hin sichtbar, in dieser äußersten Zone sind jedoch keine Einschlüsse mehr vorhanden.

		P [GPa] H T	[°C] H
Grt/Bt/PI-Paar	Bereich	2001 200	0
2_7_10	Kern	0,198	592
3_8_11	Kern	0,200	576
5_9_12	Kern	0,218	600
17_22_26	Kern	0,243	601
18_23_27	Kern	0,201	586
20_24_29	Kern	0,251	560
32_34_36	Kern	0,212	601
33_35_37	Kern	0,243	606
41_43_47	Rand1	0,280	606
39_44_48	Rand1	0,273	611
51_52_54	Rand1	0,258	627
68_60_70	Rand1	0,243	583
76_78_81	Rand2	0,240	622
Durchschnitt Kern		0,221	590
Durchschnitt Rand		0,259	610

Tabelle 5.9: kombinierte Ergebnisse des GASP-Barometers und Grt/Bt-Thermometers an Granat1, Probe 191: Bereiche Kern, Rand1, Rand2.

5.2.4 Metabasite Punta Lobos

Probe 80a Grandit-Epidot Thermometer

Für die Probe 080a der Gneise von Punta Lobos, die in Abschnitt 2.2.1 und 5.1.3 schon diskutiert wurden, wurde versuchsweise das Granat-Epidot Thermometer von Heuss-Aßbichler & Fehr (1997) angewendet. Messdaten finden sich im Anhang 8.2.4.

Die Probe mit bis ca. 2mm großen Granaten ist stark alteriert. Poikiloblastische Granate (Grs_{20-30} - Adr₇₀₋₈₀) sind im Dünnschliff fast bräunlich und eng und unregelmäßig mit Klinopyroxen (ca. Di₅₀ – Hed₅₀), Skapolith (Me₆₆) und Epidot/Klinozoisit (Ep₂₅₋₃₀) verwachsen. Die Matrix besteht aus Quarz, Plagioklas (An₂₅₋₃₀) und Alkalifeldspat. Es wird wenig Kalzit beobachtet. Akzessorisch kommen Titanit, Turmalin und Zirkon vor.

Die unregelmässige Elementverteilung in den Granaten zeigt sich im BSE-Bild in einer fleckigen Darstellung (Abbildung 5.25). Die Werte X Adr und X Ep wurden gegen das in Heuss-Aßbichler & Fehr (1997) vorgeschlagene Diagramm geplottet (Abbildung 5.26).

Die ungewöhnlich hohen Adr-Werte um 0,7 - 0,8 würden auf Temperaturen von unter 400°C hindeuten, für die das Thermometer nicht kalibriert ist. Eine exaktere T-Bestimmung ist hier nicht möglich – die Werte müssten zu weit extrapoliert werden.

Wahrscheinlich sind, wie in Abschnitt 5.1.3 diskutiert, die Granate nicht mit Ep equlibiriert, evtl. bei höheren Bedingungen in Paragenese mit Cpx entstanden, obwohl, wie das BSE-Bild in Abb. 5.25 zeigt, eine Berührungsparagenese Grt/Ep besteht.



Abbildung 5.25: BSE-Bild der Probe 080a (Grt/Ep/Cpx).



Abbildung 5.26: Plot von X Adr/X Ep im Grt/Ep-Thermometer. Probe 080a.

5.2.5 Metabasite El Novillo

Proben 5, 224, 45 aus Riewe (1998) - Aluminium in Hornblende Barometer

Im Rahmen der Diplomarbeit von Riewe (1998) konnten an einigen Proben aus dem Bereich El Novillo (s. Abschnitt 2.4, Probenlokationen ersichtlich aus dem Profil Abb. 2.23) Druckabschätzungen mit dem Al in Hbl Geobarometer (Johnson & Rutherford 1989, Anderson & Smith 1995) gemacht werden.

Die Werte wurden für diese Arbeit von den Mikrosonden – Rohdaten ausgehend nochmals berechnet, um die Berechnung der Amphibole nach Schumacher 1997 nutzen zu können. Gegenüber den Ergebnissen von Riewe (1998) ergaben sich leichte Abweichungen (Drucke werden um ca. 0,02 GPa höher berechnet).

		P [GPa]
		J+R
Messpunkt	Al ^{tot}	1989
45 – ems128	1,2638	0,189
45 – ems134	1,3164	0,210
5 – maf24	1,791	0,412
5 – maf27	1,604	0,333
5 – maf212	1,877	0,448
224 – ems183	1,7511	0,395
224 – ems188	1,8051	0,418
224 – ems190	1,7526	0,395
224 – ems193	1,8050	0,417

Die Probe 45 repräsentiert die feinkörnigen Gabbro-Norit – Intrusiva des El Novillo Komplexes, die Proben 5 und 224 sind deformierte Hbl-Diorite und Tonalite des (späteren) Intrusivkomplexes El Salto (s. Abschnitt 2.4, Abb. 2.23). Auffällig ist der in den Al-in-Hornblende zu beobachtende Unterschied von ca. 0,2 GPa im El Novillo zu ca. 0,4 GPa im El Salto Intrusiv.

6 Isotopen - Geochemie

Detaillierte Isotopen-Untersuchungen an den im La Paz Kristallinkomplex vorhandenen Intrusiva wurden in Schaaf et al. (2000) publiziert. Im Rahmen dieser Arbeit wurden in den gleichen Laboren (IMPG, Universität München und LUGIS, UNAM, México City) und mit den gleichen Methoden (Isotopie im Rb-Sr System) Alter an ausgesuchten metamorphen, teilweise anatektischen Sedimenten erhoben. Ziel war es, die Abkühl- (Schließ-) Temperaturen für einzelne Minerale zu vergleichen.

6.1 Methodik

Bei der Probennahme wurde darauf geachtet, unalterierte Proben (Biotit nicht chloritisiert) zu nehmen. Diese Annahme wurde für jede Probe unter dem Mikroskop geprüft.

Aufbereitung und Analyse erfolgten wie in Schaaf et al. (2000) beschrieben. Das frische Probenmaterial wurde im Backenbrecher gebrochen, mit einer Scheibenmühle gemahlen, aliquotisiert, in verschiedene Fraktionen gesiebt, schliesslich mit einer Wolframkarbid – Scheibenschwingmühle pulverisiert. Um Kreuzkontamination der Proben zu verhindern wurden die Brecher und Mühlen mit reichlich Aceton gereinigt. Glimmer wurden aus der Fraktion 0,2 - 0,3 mm über einen Rütteltisch separiert, Biotit und Muskovit dann mittels eines Frantz Magnetseparators getrennt. Gesamtgesteins-Pulver und Mineralseparate wurden in Teflon-Behältern in HF und HCl gelöst, die Lösungen aliquotisiert und mit ⁸⁷Rb gespiked. Rb und Sr wurden über Dowex-Säulen mittels Kationen-Austausch separiert. Rb- und Sr-Isotopenverhältnisse wurden mit Massenspektrometern im Labor des IMPG und LUGIS, UNAM, México City von Dr. Peter Schaaf gemessen.

6.2 Ergebnisse

Ergebnisse der Datierungen werden hier tabellarisch dargestellt und in Bezug zu den bereits publizierten Daten gebracht. Die Zuordnung der zitierten Gesteinseinheiten in Abbildung 6.1 erfolgte durch Vergleich der Koordinaten (GPS-Daten).

Probe #	Gestein	Rb [ppm]	Sr [ppm]	87Rb/86Sr +- 2%	87Sr/86Sr +- 1s	87Sr/86Sri [x Ma]	Alter [Ma]
076a WR	Glimmerschiefer	72,46	185,37	1,132 +- 0,023	0,715287 +- 41	0,714306	
076a Bt		359,3	19,92	52,449 +- 1,05	0,759762 +- 146		61 +- 2,5
127a WR	anatekt. Metapelit	93,15	185,78		0,718813 +-38	0,716916	
127a Bt		632,6	1,37				90 +- 3,5
127a Ms		260,2	25,78				101 +- 4
133b WR	anatekt. Metapelit	153,7	129,49			0,71647	
133b Bt		482,95	1,98				87 +- 3,4
Tabelle 6	1: Ergebnisse d	ler Alterso	datierung	en			



Abbildung 6.1: Zuordnung der Ergebnisse zu publizierten Daten

Die Interpretation für das Sm-Nd Alter an Granaten aus einem Diatexit (Probe ,LCB-9') der Sierra La Gata von Schaaf et al. (2000) ist, dass der Aufschmelzungsprozess, der den Diatexit produziert hat, zeitgleich mit (und wahrscheinlich induziert von) den Intrusionen der Granitoide ist. Im östlichen und südlichen Bereich des La Paz Kristallinkomplexes sind die Intrusiva durch hohe Nd-Modellalter (~ 1.0 Ga) und niedrige initiale ϵ Nd-Werte (0 bis –2,5) gekennzeichnet (dargestellt in Abbildung 1.4). Die an der Probe LCB-9 ermittelten Rb-Sr Mineralalter für Ms und Bt wurden unter Annahmen für Schliesstemperaturen des Sr-Rb Isotopensystems in Ms und Bt (ca. 500°C für Ms und ca. 320°C für Bt) zur Berechnung einer Abkühlungsrate von 36°C / Ma herangezogen (Schaaf et al. 2000, Abschnitt 8.1).

Die in dieser Arbeit an benachbarten anatektischen Glimmerschiefern (Proben 127, 133, Sierra La Gata) ermittelten Mineralalter sind für Ms direkt vergleichbar mit dem Ms-Alter der Probe LCB-9 (siehe Abbildung 6.1). Eine erreichte Temperatur von >500°C, die nötig ist, um das Sr-Rb Isotopensystem für Ms zurückzusetzen (Schaaf et al. 2000) ist konsistent mit Mineralparagenesen und den Ergebnissen der Thermobarometrie (> ca. 550°C für Probe 128, s. Abschnitt 5.2.2).

Der metamorphe Peak kann damit wie in Schaaf (2000) für die Sierra La Gata in Bezug zur Intrusionstätigkeit gebracht werden.

Die ermittelten Rb-Sr Mineralalter für Biotite der Proben 127 und 133 sind dagegen mit $90\pm3,5$ und $87\pm3,4$ Ma deutlich jünger als die für LCB-9 berichteten 98 ± 2 Ma. Eine für die Probe 127 berechnete Abkühlungsrate für den Bereich ca. 500°C bis ca. 320°C liegt bei nur 16°C / Ma.

Es konnte zwischen den Lokationen 127 und LCB-9 keine Störungszone beobachtet werden, die evtl. für eine unterschiedliche Hebungs- und Abkühlungsgeschichte verantwortlich sein könnte. Die beobachtete längere Abkühlung könnte durch die Einwirkung der Kontaktaureole einer jüngeren Intrusion in der Sierra erklärt werden, die von der Lokation LCB-9 weiter entfernt ist als vom Punkt 127. Tatsächlich gibt es im Gebiet der Sierra La Gata – wie auch im ganzen La Paz Kristallinkomplex – mehrere Intrusionszentren mit gegenseitigen Intrusionsbeziehungen und leicht unterschiedlichen Altern. Jedoch ist für diesen Bereich keine weitere Datierung erhältlich, so dass ein Beleg für diese Theorie fehlt.

Das Abkühlalter der Probe 076a aus dem Bereich La Muela / Las Palomas mit $61\pm2,5$ Ma ist nicht in Einklang mit Altern von Intrusivgesteinen zu bringen. Auch, dass es jünger ist als die von Calmus et al. (1999) vor der Küste ermittelten Apatit-FT Alter ($68,4\pm3,6$ Ma) ist nicht erklärlich, wenn man für den kompletten La Paz Kristallinkomplex für den T-Bereich von < 300 °C eine gemeinsame Hebungsgeschichte annimmt. Es wird angenommen, dass die für die Grabenbildung verantwortlichen, relativ jungen kataklastischen Störungen, die den Komplex stark segmentieren, eine einfache Korrellation über weitere Strecken unmöglich machen und zu Bereichen stark unterschiedlicher Hebungsgeschichte führen. Eine genauere Einordnung ist aber derzeit nicht möglich.

7 Interpretation der Ergebnisse

7.1 Geodynamische Interpretation: der La Paz Kristallinkomplex als Teil der Peninsular Ranges

Die bisher strittige tektonische Einordnung des La Paz Kristallinkomplexes als fragliches eigenes Terrane (,Pericu-Terrane', Sedlock et al. 1993) lässt sich Dank neuerer isotopischer Bestimmungen (Schaaf et al. 2000), der Bearbeitung vergleichbarer Gebiete in Baja California Nord (Schmidt & Paterson 2002, Johnson et al. 1999, Ortega-Rivera 2003) und der Ergebnisse dieser Arbeit zugunsten einer Zuordnung zu den ,Peninsular Ranges' entscheiden.

Isotopen-Untersuchungen (Schaaf et al. 2000, Abbildung 1.4) an granitoiden Intrusiva des Komplexes haben eine Zweiteilung in einen nord-westlichen Bereich mit primitiven M-Typ Intrusiva (niedrige Nd-Modellalter um ~0,3 Ga, hohe initiale ϵ Nd-Werte von bis +7) und einen süd-östlichen Bereich mit Magmatiten mit höherer krustaler Kontamination (hohe Nd-Modellalter um ~ 1.0 Ga und niedrige initiale ϵ Nd-Werte von 0 bis -2,5). Diese Zweiteilung ist, zusammen mit anderen Merkmalen der Intrusiva (Gabbro-Zone, Magnetit-Grenze, initiale Sr-Isotopie, SEE-Fraktionierung, siehe Abschnitt 1.2.1), die hier noch nicht bearbeitet wurden, charakteristisch für die Intrusiva des Peninsular Ranges Batholith in Baja California (Gastil 1975, 1983, 1993; Ortega-Rivera 2003).

Für Arbeitsgebiete in Baja California Nord ist auch die Grenze zwischen einem Terrane ozeanischer Provenienz ("Alisitos-Terrane") und der vordersten Front des nordamerikanischen Kontinents als strukturelles Element erkannt. Schmidt & Paterson (2002) und Jonson et al. (1999) beschreiben in der Sierra San Pedro Martir eine nach Osten fallende Überschiebungsbahn ("Main Martir Thrust") der Serien des Kontinentalrandes über Vulkanite der Alisitos-Formation, die auch einen metamorphen Kontrast (grünschieferfazielle Gesteine werden von amphibolitfaziellen Gesteinen überschoben) zeigt.

Für den La Paz Kristallinkomplex sind das überschobene Vorland, ein metamorpher Kontrast und ein entsprechendes strukturelles Element bisher nicht erkannt worden.

Die ,La Paz Fault'

Die geologische Kartierung und strukturelle Interpretation von mehreren Einzelprofilen in dieser Arbeit (Abschnitt 2) zeigt, dass eine duktile Aufschiebung mit sinistraler Komponente im Bereich zwischen Todos Santos, El Triunfo und östlich der Sierra El Novillo (siehe Abbildung 2.1) viele der geforderten Bedingungen als Terrane-Grenze erfüllt.

Die liegenden Gneise von Punta Lobos, Glimmerschiefer und Marmore stellen ein Becken am Übergang von kontinentaler Kruste zu einem vulkanischen Bogen oder ozeanischen Bereich dar (Abschnitt 2.2). Metasedimente zeigen Strukturen, die auf eine hohe Dynamik der Ablagerung schliessen lassen (2.2.2).

Mit den mehrfach deformierten Orthogneisen w. El Triunfo (2.3.4) zeigen sich nach Osten erstmals Gesteine des nordamerikanischen Kontinentalrandes. Sie sind auch in der Deformation nicht mit den westlicheren Metasedimenten vergleichbar. Metasedimente der weiter östlich gelegenen Sierra La Gata zeigen metamorphe Indexminerale, die eine alte Schieferung überwachsen (2.6).

Die Scherzone weist eine sinistrale Komponente auf, es dominiert aber die aufschiebende Bewegung. Sie kommt nicht als Grenze in Frage, an der laterale Bewegungen von mehreren hundert oder tausend Kilometern kompensiert werden (Beck 1991, Gastil 1991, Sedlock et al. 1993).

Dieses strukturelle Element ist als ,Falla de La Paz' richtig beschrieben (Aranda-Gómez & Pérez-Venzor 1989), jedoch mehrfach falsch interpretiert worden (Abschnitt 1.2.3).

Metamorphe Merkmale

Ein metamorpher Kontrast (grünschieferfaziell - amphibolitfaziell), wie er in Baja California Nord über die "Main Martir Thrust' hinweg beobachtet wird, ist im La Paz Kristallinkomplex in der Tat nicht vorhanden. Auf beiden Seiten der Scherzone findet man amphibolitfazielle Gesteine einer Niederdruck-Metamorphose (Abschnitte 4, 5). Für die liegenden Einheiten der Scherzone (Bereich El Triunfo) konnte ein pT-Pfad im Gegenuhrzeigersinn herausgearbeitet werden (4.3). Dieser Pfad ist konsistent mit einer Krusten-Verdickung durch Überschiebung. Die Druck-Unterschiede sind allerdings gering (< 0,1 GPa, Abbbildung 4.13) und können nicht über barometrische Methoden (GASP-Barometer, etc.) erfasst werden (Abschnitt 5.2). Für den hangenden Block konnte keine detailliertere p-Entwicklung bestimmt werden. Berechnungen der Barometer bestätigen die Niederdruck-Natur der Metamorphose. Höhere Drucke als ca. 0,35 GPa wurden nicht ermittelt.

Die beschriebenen Merkmale und die Zuordnung der Gesteinseinheiten zu tektonischen Bereichen ist in Abbildung 7.1 schematisch dargestellt. a) stellt dabei die tektonische Aufteilung während der Beckensedimentation dar, b) (oben) die heutige Situation.



Abbildung 7.1: schematisches Profil und geodynamische Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes

Diese Interpretation unterstützt nicht die Einordnung des kompletten La Paz Kristallinkomplexes als ein eigenes Terrane (Sedlock et al. 1993), vielmehr stellt die "La Paz Fault" eine Grenze zwischen zwei tektonisch unterschiedlichen Einheiten dar. Es wird eine Zuordnung zu den "Peninsular Ranges" favorisiert, die sich, zusammengefasst, auf folgende Beobachtungen stützt:

- Die Gneise von Punta Lobos und deren metasedimentäre Auflage gehören nicht zu den weiter östlich anstehenden Gesteinen, sondern sind überschobenes Vorland.
- Die ,La Paz Fault' stellt zwar keine Einheiten mit grundlegend unterschiedlicher Metamorphose gegenüber, aber es kann in den liegenden Einheiten ein pT-Pfad im Gegenuhrzeigersinn beobachtet werden, der eine Überschiebung mit Krustenverdickung unterstützt.
- Aufschiebende Bewegung an der La Paz Fault erfolgte kurz nach dem metamorphen Temperatur-Peak. Die Bildung von Myloniten nach lagenparallelen Intrusiva, die Deformation von metamorphen Indexmineralen (Andalusit) und die an Mineralreaktionen beobachtete Druck-Erhöhung in liegenden Einheiten belegen dies.
- Östlich der La Paz Fault kommen Gesteine des Kontinentalrandes mit mehrfacher Schieferung vor, westlich davon nicht.
- Isotopische Untersuchungen zeigen Unterschiede der Intrusiva (Intrusion in Gesteine ozeanischer Provenienz gegenüber Intrusion mit höherer krustaler Kontamination), analog zu den Daten in Baja California Nord.

7.2 Verwendete Methoden der pT-Bestimmung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Druck-Temperatur Bestimmungen an Mineralen metamorpher Paragenesen mit verschiedenen Methoden vorgenommen:

- Ermittlung von metamorphen Mineralreaktionen mit "klassischen' petrogenetischen Netzen (Abschnitt 4),
- Thermobarometrie mit verschiedenen Geothermobarometern (Abschnitt 5.2),
- Ermittlung thermobarometrischer Aussagen aus "pseudosections' modellierter thermodynamischer Systeme (Abschnitt 5.1).

Petrogenetische Netze für Metapelite bieten ein unverzichtbares Mittel zum Verständnis der metamorphen Reaktionen. Moderne Publikationen (Pattison et al. 2002, Spear et al. 1999) spiegeln die Mühen wieder, die das bearbeiten solcher Netze im sehr umfangreichen thermodynamischen System für Pelite ("MnCKFMASH") bereitet.

Das Auffinden bestimmter Produktparagenesen im Dünnschliff und Zuordnung zu entsprechenden Reaktionen wird oft durch die Kenntnis der Modellreaktionen und Studium der Abbildungen der Paragenesen in den Publikationen erst ermöglicht. Ohne das Verständnis der pelitischen Modellreaktionen wäre die Interpretation des pT-Pfades im Gegenuhrzeigersinn des liegenden Blockes der La Paz Fault nicht möglich gewesen – ein wirklicher barometrischer Nachweis war im Rahmen der Genauigkeiten (z. B. des GASP-Barometers) nicht möglich.

Geothermobarometer existieren in großer Zahl für unterschiedliche Reaktionen mit unterschiedlichen Kalibrierungen und Aktivitätsmodellen. Für zwei "Klassiker", das Granat-Biotit Thermometer und das GASP Barometer, sind in letzter Zeit umfangreiche Re-Kalibrierungen vorgenommen worden (Holdaway 2000, 2001). Gerade Grt/Bt-Temperaturen haben sich in dieser Arbeit als sehr konsistent (auch mit den Ergebnissen der anderen Methoden) erwiesen. Während die Unterschiede bei der Berechnung der gleichen analytischen Daten für verschiedene Kalibrierungen wenige 10 °C betragen, sind die größten Fehlerquellen "geologische" und analytische Fehler (Holdaway 2001, Todd 1998). Sorgfältige Probennahme und die Wahl der Analyse-Punkte an mehreren Mineralen im Schliff sind die wichtigsten Aktionen, mit denen inkonsistente Ergebnisse weitgehend ausgeschlossen werden können.

Die **Modellierung thermodynamischer Systeme** und die Ableitung von thermodynamischen Aussagen aus diesen Modellen stellen eine neue, rechnerisch sehr aufwändige Methode dar. Ein Ergebnis dieser Arbeit ist, dass diese Modelle sehr gut funktionieren, wenn man über petrogenetische Netze und einzelne thermobarometrische Bestimmungen möglichst genau weiss, welche Rahmenbedingungen für das Modell gesetzt werden müssen. Es hat sich als besonders effektiv erwiesen, sog. ,pseudosections' (Connolly 2002, Tinkham et al. 2001) bei bekannter Bulk-Chemie des Gesteins zu berechnen. Für die Metapelite von La Muela – die in dieser Arbeit am detailliertsten untersuchten Gesteine – ergaben sich sehr gute Übereinstimmungen von berechneten Modellen und Daten, die mit petrogenetischen Netzen und Thermobarometrie bestimmt wurden (Abschnitt 4, 5.1, 5.2).

Die Modellierung hat Ihre Grenzen (und Gefahren) da, wo evtl. Aktivitätsmodelle benutzt werden, die nicht zur thermodynamischen Datenbasis passen – dies ist bei einer versuchten Lösung von möglichst vielen Gleichgewichten auf Basis eines Datensatzes für den Bediener der Programme oft nicht mehr transparent, auch wenn die Programme unfangreich dokumentiert sind. Die Modellierung von anatektischen Prozessen, also von Gleichgewichten mit Schmelze, war beispielsweise in dieser Arbeit nicht erfolgreich.

Die Kombination der verschiedenen Methoden – eingeschlossen der strukturgeologischen Daten – machte es aber möglich, eine für die Darstellung der Entwicklung des La Paz Kristallinkomplexes konsistente Interpretation zu erreichen.

8.1 Literaturverzeichnis

- Altamirano-R., F. J. (1972): Tectónica de la proción meridional de Baja California Sur -Sociedad Geológica Mexicana, II Convenció Nacional, Libro de Resúmenes: 113-114.
- Anderson, J. L. & Smith, D. R. (1995): The effect of temperature and oxygen fugacity on Al-in-hornblende barometry: Am. Mineral., 80: 549-559.
- Anovitz, L. M. & Essene, E. J. (1982): Phase relations in the system CaCO3-MgCO3-FeCO3. - EOS Trans. Am. Geophys. Union, 63:464.
- Anovitz, L. M. & Essene, E. J. (1987): Phase relations in the system CaCO3-MgCO3-FeCO3. - J. Petrol., 28: 389-414.
- Aranda-Gómez, J. J. & Pérez-Venzor, J. A. (1986): Reconocimiento geologico de las islas Espiritu Santo y La Partida, Baja California Sur. - Univ. Nal. Autón. Mexico, Inst. Geología, Revista, 6(2): 103-116.
- Aranda-Gómez, J. J. & Pérez-Venzor, J. A. (1988): Estudio geologico de Punta Coyotes, Baja California Sur. - Univ. Nal. Autón. Mexico, Inst. Geología, Revista, 7(1): 1-21.
- Aranda-Gómez, J. J. & Pérez-Venzor, J. A. (1989): Estratigrafía del complejo cristalino de la región de Todos Santos, estado de Baja California Sur. - Univ. Nal. Autón. Mexico, Inst. Geología, Revista, 8(2): 149-170.
- Aranda-Gómez, J. J. & Pérez-Venzor, J. A. (1995): Excursion Geológica al complejo migmatítico de la Sierra de la Gata, B. C. S. – 3rd International Meeting on the Geology of the Baja California Peninsula, 21. 04. 1995. 21pp, 7 Abb., La Paz, 1995.
- Aranovich, L. Y. & Podlesskii, K. K. (1983): The cordierite-garnet-sillimanite-quartz equilibrium: experiments and applications. – In: Saxena, K. (Hrsg.) Kinetics and Equilibrium in Mineral Reactions. New York (Springer), 173-198.
- Baldwin, S. L. (1996): Contrasting P-T-t Histories for Blueschists from the Western Baja Terrane and the Aegean: Effects of Synsubduction Exhumation and Backarc Extension.
 - In: Bebout, G. E., Scholl, D. W., Kirby, S. H. & Platt, J. P. (Hrsg.): Subduction: Top to Bottom, Geoph. Monogr., 96: 155-162. American Geophysical Union, Washington.
- Beck, M. (1986): Model for late Mesozoic and early Tertiary tectonics of coastal California and western Mexico and speculations on the origin of the San Andreas fault. Tectonics, 5:49-64.
- Beck, M. (1991): Case for northward Transport of Baja and coastal southern California: Paleomagnetic data, analysis and alternatives. Geology, 19: 506-509.
- Berman, R. G. (1988): Internally-consistent thermodynamic data for minerals in the system K₂O-Na₂O-MgO-FeO-Fe₂O₃-Al₂O₃-SiO₂-TiO₂-H₂O-CO₂. J. Petrol. 29:445-522.
- Berman, R. G. (1990): Mixing properties of Ca-Mg-Fe-Mn garnets. Am. Mineral., 75: 328-344.
- Berman, R. G. (1991): Thermobarometry using multi-equilibrium calculations: a new technique, with petrological applications. Can. Mineral. 29: 833-855.
- Blundy, J. D. & Holland, T. J. B (1990): Calcic amphibole equilibria and a new amphiboleplagioclase geothermometer. – Contr. Mineral. Petrol. 104: 208-224.
- Böhnel, H., Morán-Zenteno, D., Schaaf, P. & Urrutia-Fucugauchi, J. (1992): Paleomagnetic and isotope data from southern Mexico and the controversy over the pre-neogene position of Baja California. - Geofis. Intern., 31: 253-261.
- Bohlen, S. R., Wall, V. J. & Boettcher, A. L. (1983): Experimental investigations and geologic applications of equilibria in the system FeO-TiO₂-Al₂O₃-SiO₂-H₂O. – Am. Mineral., 68: 1049-1058.
- Bohlen, S. R. & Liotta J. J. (1986): A barometer for garnet amphibolites and garnet granulites. J. Pertol., 27: 1025-1034.

- Bowen, N. L. (1940): Progressive metamorphism of siliceous limestone and dolomites. J. Geol., 48: 225-274.
- Bucher-Nurminen, K. & Frey, M. (1987): A recalibration of the chlorite-biotite-muscovite barometer. Contirb. Mineral. Petrol., 96: 519-522.
- Bucher, K. & Frey, M. (1994): Petrogenesis of Metamorphic Rocks. 6th Edition. Complete Revision of Winklers Textbook. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 318 S.
- Busby, C., Smith, D., Morris, W. & Fackler-Adams, B. (1998): Evolutionary model for convergent margins facing large ocean basins: Mesozoic Baja California, Mexico. – Geology, 26/3: 227-230.
- Butler, R. F., Dickinson, W. R. & Gehrels, G. E (1991): Paleomagnetism of coastal California and Baja California: Alternatives to large-scale northward transport. -Tectonics, 10: 561-570.
- Campa, M. F. & Coney, P. J. (1983): Tectono-stratigraphic terranes and mineral resource distribution in Mexico. - Can. J. Earth. Sci., 20: 1040-1051.
- Calmus, T., Poupeau, G., Bourgois, J., Michaud, F., Mercier de Lépinay, B., Labrin, E. & Azdimousa, A. (1999): Late Mesozoic and Cenozoic thermotectonic history of the Mexican Pacific Margin (18 to 25°N): new insight from apatite and zircon fission-track analysis of coastal and offshore plutonic rocks. - Tectonophysics, 306: 163-182.
- Carmichael, D. M. (1969): On the mechanism of prograde metamorphic reactions in quartzbearing pelitic rocks. - Contrib. Mineral. Petrol., 20: 244-267.
- Carmichael, D. M. (1978): Metamorphic bathozones and bathograds: a measure of the depth of post-metamorphic uplift and erosionon a regional scale. Am. J. Sci., 278: 769-797.
- Carmichael, R. S. (1989): Practical Handbook of physical properties of rocks and minerals. - CRC Press, Boca Raton.
- Centeno-García, E., Ruíz, J., Coney, P. J., Patchett, P. J. & Ortega-Gutiérrez, F. (1993): Guerrero terrane of Mexico: Its role in the Southern Cordillera from new geochemical data. - Geology, 21: 419-422.
- Connolly, J. A. D. (1990): Multivariable phase diagrams: an algorithm based on generalized thermodynamics. Am. J. Sci., 290: 666-718.
- Connolly, J. A. D. & Kerrick, D. M. (1987): An algorithm and computer program for calculating composition phase diagrams. CALPHAD 11: 1-55.
- Connolly, J. A. D. & Petrini, K (2002): An automated strategy for calculation of phase diagram sections and retrieval of rock properties as a function of physical conditions. – J. Metamorphic Geol., 20: 697-708.
- Dasgupta, S., Sengupta, P., Guha, D. & Fukoka, M, (1991): A refinde garnet-biotite Fe-Mg exchange geothermometer and its application in amphibolites and granulites. – Contrib. Mineral. Petrol., 109: 130-137.
- Deer, W. A., Howie, R. A. & Zussmann, J. (1992): An introduction to the rock-forming minerals (2nd Ed.). Addison Wesley Longman, Harlow.
- De Yoreo, J. J., Lux, D. R. & Guidotti, C. V. (1991): Thermal modelling in low-pressure/high-temperature metamorphic belts. Tectonophysics, 188: 209-238.
- Dickenson, M. P. & Hewitt, D. (1986): A garnet-chlorite geothermometer. Geol. Soc. Am. Abstr., 18:584.
- Ellis, S., Beaumont, C., Jamieson, R.A., Quinland, G. (1998): Continental collision including a weak zone : the vise model and its application to the Newfoundland Applachians. Canadian journal of earth sciences, 35(11): 1323-1346.
- Engi, M. & Wersin, P. (1987): Derivation and application of a solution model for calcic garnet. Schweizer. Mineral. Petrogr. Mitt. 67: 53-73.

- Evans, N. H. & Speer, J. A. (1984): Low pressure metamorphism and anatexis of Carolina Slate Belt Phyllites in the contact aureole of the Lilesville Pluton, North Carolina, USA.
 - Contrib. Mineral. Petrol., 87: 297-309.
- Fehr, K. T. (1992): Petrogenetische Teil-Netze für Niedertemperatur-Hochdruck (LT-HP) Metamorphite im System Ca-Al-Fe³⁺-Ti-Si-O-H. – Habilitationsschrift, Fakultät für Geowissenschaften, Ludwig-Maximilians-Universität München, 211 S.
- Ferry, J. M. & Spear, F. S. (1978): Experimental calibration of the partitioning of Fe and Mg between biotite and garnet. – Contrib. Mineral. Petrol., 66: 113-117.
- Frizzell, V. A., Fox, L. K., Moser, F. C. & Ort, K. M. (1984): Late cretaceous granitoids, Cabo San Lucas block, Baja California Sur, Mexico. - EOS, 65(45): 1151.
- Furlong, K. P., Hanson, R. B. & Bowers, J. R. (1991): Modeling Thermal Regimes. In: Kerrick, D. M. (Hrsg.): Contact Metamorphism. – Reviews in Mineralogy, 26. Washington, MSA, 437-505.
- Ganguly, J. & Saxena, S. K. (1984): Mixing properties of alumino-silicate garnets: constraints from natural and experimental data, and application to geothermometry. Am. Mineral., 69: 88-97.
- Gastil, R. G. (1983): Mesozoic and Cenozoic granitic rocks of southern California and Western Mexico. Geolgical Society of America Memoir, 159: 265-275.
- Gastil, R. G. (1991): Is there a Oaxaca-California megashear? Conflict between paleomagnetic data and other elements of geology. Geology, 19: 502-505.
- Gastil, R. G., Phillips, R. P. & Allison, E. C. [Hrsg.] (1975): Reconnaissance Geology of the State of Baja California. – Geological Society of America Memoir 140. Boulder, 170 S.
- Gastil, R. G., Kimbrough, J., Shimizu, M. & Tainosho, Y. (1994): Origin of the Magnetite Boundary in the Peninsular Ranges Batholith, Southern California, U.S.A. and Baja California, Mexico. – Revista Mexicana de Ciencias Geológicas, 11/2: 157-167.
- Geiger, C. A. (1999): Thermodynamics of (Fe2+, Mn2+, Mg, Ca)3Al2Si3O12 garnet: a review and analysis. Mineralogy and Petrology, 66: 271-299.
- Ghent, E. D. (1976): Plagioclase-garnet-Al2SiO5-quartz: a potential geothermometergeobarometer. – Am. Miner., 61: 710-714.
- Gordon, T. M. (1992): Generalized thermobarometry; solution of the inverse chemical equilibrium problem using data for individual species. Geochim. et Cosmochim. Acta, 56: 1793-1800.
- Gordon, T. M., Aranovich, L. Y. & Fed'kin, V. V. (1994): Exploratory data analysis in thermobarometry: an example from the Kisseynew Sedimentary Gneiss Belt, Manitoba, Canada. Am. Miner., 79: 973-982.
- Gottschalk, M. (1997): Internally consistent thermodynamic data for minerals in the system SiO₂-TiO₂-Al₂O₃-Fe₂O₃-CaO-MgO-FeO-K₂O-Na₂O-H₂O-CO₂. European Journal of Mineralogy, 9: 175-223.
- Grambling, J. A. (1990): Internally-consistent geothermometry and H₂O barometry in metamorphic rocks: the example garnet-chlorite-quartz. Contr. Mineral. Petrol., 105: 617-628.
- Grant, J. A. (1985): Phase equilibria in partial melting of pelitic rocks. In: Ashworth, J. R. (Hrsg.): Migmatites. Blackie, Glasgow, London.
- Gromet, L. P. & Silver, L.T. (1987): REE Variations across the Peninsular Ranges Batholith: Implications for Batholithic Petrogenesis and Crustal Growth in Magmatic Arcs. – J. Petrol., 28/1: 75-125.
- Hanson, R. B. & Barton, M. D. (1989): Thermal Development of Low-Pressure Metamorphic Belts : Results from Two-Dimensional Numerical Models. – J. Geophys. Res., 94 B8: 10.363-10.377.

- Hausback, B. P. (1984): Cenozoic volcanic and tectonic evolution of Baja California Sur, Mexico. In: Frizzell, V. A. (Hrsg.): Geology of the Baja California peninsula. – Pacific Section, Society of Economic Paleontologists and Mineralogists, 39: 219-236.
- Hemingway, B. S., Krupka, K. M. & Robie, R. A. (1981): Heat capacities of the alkalifeldspars between 350 and 1000 K from differential scanning calorimetry, the thermodynamic functions of the alkali feldspars from 298.15 to 1400 K, and the reaction quartz+jadeite = analbite. – Am. Mineral., 66: 1202-1215.
- Herrmann, U. R. (1994): The origin of a terrane: U/Pb Zircon systematics, geochemistry and tectonics of the Xolapa complex (southern Mexico). - Tübinger geowissenschaftliche Arbeiten, Reihe A, Band 17, 92 S., Tübingen.
- Heuss-Aßbichler, S. & Fehr, K T. (1997): Intercrystalline exchange of Al and Fe3+ between grossular – andradite and clinozoisite – epidote solid solutions. – N. Jb. Miner. Abh., 172: 69-100.
- Holdaway, M. J. (1971): Stability of andalusite and the aluminium silicate phase diagram. Am. J. Sci., 271: 97-131.
- Holdaway, M. J. (2000): Application of new experimental and garnet Margules data to the garnet-biotite geothermometer. Am. Mineral., 85: 881-892.
- Holdaway, M. J. (2001): Recalibration of the GASP geobarometer in light of recent garnet and plagioclase activity models and versions of the garnet-biotite geothermometer. Am. Mineral., 86: 1117-1129.
- Holdaway, M. J., Mukhopadhyay, B., Dyar, M. D., Guidotti, C. V. & Dutrow, B. L. (1997): Garnet-biotite geothermometry revised: New Margules parameters and a natural specimen data set from Maine. – Am. Mineral., 82: 582-595.
- Holland, T. J. B. & Powell, R. (1990): An enlarged and updated internally consistent thermodynamic dataset with uncertainties and correlations: the system K₂O-Na₂O-CaO-MgO-MnO-FeO-Fe₂O₃-Al₂O₃-TiO₂-SiO₂-C-H₂-O₂. J. Metam. Geol., 8: 89-124.
- Holland, T. J. B. & Powell, R. (1998): An internally-consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. J. Metam. Geol., 16: 309-343.
- Holland, T. J. B. & Powell, R. (2001): Calculation of phase relations involving haplogranitic melts using an internally-consistent thermodynamic data set. J. Petrol., 42: 673-683.
- Holland, T. J. B. & Blundy, J. D. (1994): Non-ideal interactions in calcic amphiboles and their bearing on amphibole-plagioclase thermometry. – Contr. Mineral. Petrol., 116: 433-447.
- Indares, A. & Martignole, J. (1985): Biotite-garnet geothermometry in the granulite facies: the influence of Ti and Al in biotite. Am. Mineral., 70:272-278.
- Johnson, M. C. & Rutherford, M. J. (1989): Experimental calibration of the Aluminium-in-Hornblende geobarometer with application to the Long Valley Caldera (California) volcanic rocks. – Geology, 17/9: 837-841.
- Johnson, S. E., Tate, M. C. & Fanning, C. M. (1999): New geological and SHRIMP U-Pb zircon data in the Peninsular Ranges batholith, Baja California, México: Evidence for a suture? – Geology, 27: 743-746.
- Kimbrough, D. L., Smith, D. P., Mahoney, J. B., Moore, T. E., Grove, M., Gastil, R., G. & Fanning, C. M. (2001): Forearc-basin sedimentary response to rapid Late Cretaceous batholith emplacement in the Peninsular Ranges of southern and Baja California. – Geology, 29/6: 491-494.
- Kleemann, U. & Reinhardt, J. (1994): Garnet-biotit thermometry revisited: the effect of Al^{VI} and Ti in biotite. European Journal of mineralogy, 6: 925-941.
- Kopf, C. F., Whitney, D. L. & Schmidt, K. L. (2000): Distinct P-T domains across the Peninsular Ranges Batholith in northern Baja California, Mexico; evidence for a long lived inter-arc convergent zone. – GSA abstracts with programs, 2000, Abstract 52399.
- Kretz, R. (1983): Symbols for rock-forming minerals. Am. Mineral., 68: 277-279.

- Koziol, A. M. (1989): Recalibration of the garnet-plagioclase-Al₂SiO₅-quartz (GASP) geobarometer and application to natural parageneses. EOS, 70/15: 493.
- Koziol, A. M. & Newton R. C. (1988): Redetermination of the anorthite breakdown reaction and improvement of the plagioclase-garnet-Al₂SiO₅-quartz geobarometer. Am. Mineral., 73: 216-223.
- Masonne, H. & Schreyer, W. (1987): Phengite barometry based on the limiting assemblage with K-feldspar, phlogopite and quartz. Contrib. Mineral. Petrol., 96: 212-224.
- McKenna, L. W. & Hodges, K. V. (1988): Accuracy vs. precision in locating reaction boundaries: Implications for the garnet-plagioclase-aluminium silicate-quartz geobarometer. - Am. Mineral., 73: 1205-1208.
- Mitre-Salazar, L. M. & Roldan-Quintana, J. (1989): Transect H-1: La Paz to Saltillo, Northwestern and Northern Mexico. – North American Continent-Ocean Transects Program, GSA Transect #13. Geological Society of America, Boulder, 8 S., 2 Karten.
- Morán-Zenteno, D., Hrsg. (1985): Geología de la República Mexicana. Univ. Nal. Autón. Mexico, Facultad de Ingenieria und INEGI, 88 S., Mexico D. F.
- Mukhopadhyay, B., Holdaway, M. J. & Koziol, A. M. (1997): A statistical model of thermodynamic mixing properties of Ca-Mg-Fe²⁺ garnets. Am. Miner., 62: 165-181.
- Murillo-Munetón, G. (1991): Análisis petrológico y edades K-Ar de las rocas metamórficas e ígneas precenozoicas de la región de La Paz Los Cabos, B. C. S., Mexico: First international meeting on the geology of the Baja California Peninsula. S. 55-56.
- Ortega-Gutiérrez, F. (1982): Evolución magmática y metamórfica del complejo cristalino de La Paz, Baja California Sur. Soc. Geol. Mexicana, Convención Nacional, programa y resúmenes, p. 90, Mexico D. F.
- Ortega-Rivera, A. (2003): Geochronological Constraints on the Tectonic History of the Peninsular Ranges Batholith of Alta and Baja California : Tectonic Implications for Western México. – In Johnson, S. E., Paterson, S. R., Fletcher, J. M., Girty, G. R., Kimbrough, D. L., und Martin-Barajas, A. (Hrsg.): Tectonic Evolution of northwestern Mexico and southwestern United States. Geological Society of America, Special Paper 374: 297-336.
- Oxburgh, E. R. & Turcotte (1971): Origin of Paired Metamorphic Belts and Crustal Dilation on Island Arc Regions. J. Geophys. Res., 76/5: 1315-1327.
- Pattison, D. R. M. & Harte, B. (1991): Petrography and Mineral Chemistry of pelites. In: Voll, G., Töpel, J., Pattison, D. R. M. & Seifert, F. (Hrsg.): Equilibrium and Kinetics in Contact Metamorphism. Springer, Berlin, Heidelberg, New York. 484 S.
- Pattison, D. R. M. & Tracy, R. J. (1991): Phase equilibria and thermobarometry of metapelites. In: Contact Metamorphism. Reviews in Mineralogy, 26, S. 105-206. Mineralogical Society of America, Washington.
- Pattison, D. R. M., Spear, F. S., DeBuhr, C. L., Cheney, J. T. & Guidotti, C. V. (2002): Thermodynamic modelling of the reaction Muscovite + Cordierite = Al2SiO5 + Biotite + Quartz + H2O: constraints from natural assemblages and implications for the metapelitic petrogenetic grid. Journal of Metamorphic Geology, 20: 99-118.
- Perchuk, L. L. & Lavrent'eva, I. V. (1983): Experimental investigation of exchange equilibria in the system cordierite-garnet-biotite. In: Saxena, S. K. (Hrsg.) Kinetics and Equilibrium in Mineral Reactions, S. 199-240. Springer, New York.
- Pouchou, L. & Pichoir, F. (1984): A new model for quantitative X-ray microanalysis. Part I: Application to the analysis of homogenous samples. – Rech. Aerosp., 3: 13-38.
- Powell, R. & Holland T. J. B. (1988): An internally consistent thermodynamic dataset with uncertainties and correlations: 3. Applications to geobarometry, worked examples and a computer program. – J. Metam. Geol., 6: 173-204.
- Reche, J. & Martinez, F. J. (1996): GPT: an Excel spreadsheet for thermobarometric calculations in metapelitic rocks. Computers & Geosciences, 22/7: 775-784.

- Schaaf, P., Böhnel, H. & Pérez-Venzor, J. A. (2000): Pre-Miocene palaeogeography of the Los Cabos Block, Baja California Sur: geochronological and palaeomagnetic constraints. - Tectonophysics, 318: 53-69.
- Schaaf, P., Morán-Zenteno, D., del Sol Hernández-Bernal, M., Solís-Pichardo, G., Tolson, G. & Köhler, H. (1995): Paleogene continental margin truncation in southwestern Mexico: Geochronological evidence. Tectonics, 14(5): 1339-1350.
- Schaaf, P. (1990): Isotopengeochemische Untersuchungen an granitoiden Gesteinen eines aktiven Kontinentalrandes: Alter und Herkunft der Tiefengesteinskomplexe an der Pazifikküste Mexikos zwischen Puerto Vallarta und Acapulco. – Dissertation Ludwig-Maximilians-Universität München, 202 S.
- Schumacher, J. C. (1997): The estimation of ferric iron in electron microprobe analysis of amphiboles. European Journal of Mineralogy, 9: 643-651.
- Sedlock, R. L. (1988): Metamorphic Petrology of a high-pressure, low-temperature subduction complex in west-central Baja California, Mexico. - J. Metam. Geol., 5: 205-233.
- Sedlock, R. L. (1996): Syn-Subduction Forearc Extension and Blueschist Exhumation in Baja California, México. - In: Bebout, G. E., Scholl, D. W., Kirby, S. H. & Platt, J. P. (Hrsg.): Subduction: Top to Bottom, Geoph. Monogr., 96: 155-162. American Geophysical Union, Washington.
- Sedlock, R. L., Ortega-Gutiérrez, F. & Speed, R. (1993): Tectonostratigraphic Terranes and Tectonic Evolution of Mexico. – Geological Society of America, Special Paper 278. Boulder, 153 S.
- Spear, F. S. (1995): Metamorphic Phase Equilibria and Pressure-Temperature-Time Paths. Mineralogical Society of America Monograph. Washington, 501 S.
- Spear, F. S. (1999): Real-time AFM diagrams on your Macintosh. Geological Materials Research, v1n3: 1-19.
- Spear, F. S., Kohn, M. J. & Cheney, J. T. (1999): P-T paths from anatectic melts. Contr. Min. Petr., 134: 17-32.
- Thoenen, T. (1989): A comparative study of garnet-biotite geothermometers. Unpubl. Dissertation Universität Basel, 118 S. Zitiert in Bucher, K. & Frey, M. (1994): Petrogenesis of Metamorphic Rocks. – 6th Edition. Complete Revision of Winklers Textbook. Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 318 S.
- Thompson, A. B. (1982): Dehydration melting of pelitic rocks and the generation of H₂O undersaturated granitic liquids. Am. J. Sci., 282: 1567-1595.
- Thomson, C. N. & Girty, G. H. (1994): Early Cretaceous intra-arc ductile strain in Triassic-Jurassic and Cretaceous continental margin arc-rocks, Peninsular Ranges, California. – Tectonics, 13/5: 1108-1119.
- Todd, C. S. (1998): Limits on the precision of geothermometry at low grossular and anorthite content. Am. Miner., 83: 1161-1167.
- Tinkham, D. K., Zuluaga, C. A. & Stowell, H. H. (2001): Metapelite phase equilibria modeling in MnNCKFMASH: The effect of variable Al₂O₃ and MgO/(MgO+FeO) on mineral stability. – Geological Materials Research 3/1.
- Tracy, R. J., Robinson, P. & Thompson, A. B. (1976): Garnet composition and zoning in the determination of temperature and pressure of metamorphism, central Massachusetts.
 Am. Mineral., 61: 762-775.

8.2 Mikrosondendaten

8.2.1 Probe 076, Bereich La Muela

Biotit-Messpunkte

	076 bi1 1	076 bi1_6	076 bi1_8	076 bi1 9	076 bi1 10	076 bi2 1	076 bi2 2	076 bi3 1	076 bi3 2	076 bi3 3	076 bi3_4	076 bi3 5	076 bi3_6
	511_1	511_0	bii_o	511_5	511_10	012_1	012_2	010_1	010_2	00_0	010_4	00_0	010_0
SiO2	37.267	36.112	32.920	34.497	36.726	33.707	32.730	33.459	32.524	33.333	32.995	33.684	33.280
TiO2	1,647	′ 1,341	1,665	1,161	1,772	1,523	1,408	1,837	1,692	2 1,727	1,792	1,858	1,722
AI2O3	21,368	8 21,648	20,123	22,492	21,461	20,363	19,751	19,900	19,331	19,522	19,018	20,015	20,225
FeO	22,784	20,245	21,963	17,487	22,381	21,740	20,633	23,080	22,794	22,609	22,933	23,540	23,080
MnO	0,133	0,234	0,204	0,156	0,164	0,270	0,185	0,256	0,238	0,182	0,292	0,204	0,125
MgO	6,054	6,034	7,204	5,454	5,991	6,459	6,995	6,825	7,209	7,144	7,051	6,754	6,850
CaO	0,050	0,073	0,043	0,021	0,021	0,025	0,094	0,001	0,004	0,000	0,018	0,004	0,000
Na2O	0,303	0,388	0,538	0,286	0,357	0,456	0,414	0,182	0,220	0,181	0,360	0,189	0,225
K2O	7,773	6,678	7,330	5,515	8,036	7,140	7,076	8,050	8,052	8,108	7,702	8,091	8,232
Total	97,380	92,754	91,990	87,069	96,909	91,683	89,284	93,590	92,063	92,805	92,160	94,340	93,739
Si	5,529	5,542	5,231	5,531	5,484	5,344	5,320	5,263	5,218	5,282	5,278	5,262	5,230
AIIV	2,471	2,458	2,769	2,469	2,516	2,656	2,680	2,737	2,782	2,718	2,722	2,738	2,770
Summe	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000
AIVI	1,265	5 1,458	1,000	1,782	1,260	1,149	1,104	0,952	0,873	0,928	0,864	0,947	0,976
Ti	0,184	0,155	0,199	0,140	0,199	0,182	0,172	0,217	0,204	0,206	0,216	0,218	0,204
Fe	2,827	2,598	2,919	2,345	2,795	2,882	2,805	3,036	3,058	2,996	3,068	3,075	3,033
Mn	0,017	0,030	0,027	0,021	0,021	0,036	0,025	0,034	0,032	0,024	0,040	0,027	0,017
Mg	1,339	1,381	1,707	1,304	1,334	1,527	1,695	1,600	1,724	1,688	1,682	1,573	1,605
Summe	5,632	5,622	5,852	5,591	5,609	5,776	5,801	5,840	5,892	5,842	5,868	5,841	5,834
Са	0,008	0,012	0,007	0,004	0,003	0,004	0,016	0,000	0,001	0,000	0,003	0,001	0,000
Na	0,087	0,116	0,166	0,089	0,103	0,140	0,130	0,055	0,068	0,055	0,112	0,057	0,069
к	1,471	1,308	1,486	1,128	1,531	1,444	1,467	1,615	1,648	1,639	1,572	1,613	1,650
Summe	1,566	5 1,435	1,659	1,220	1,637	1,588	1,614	1,671	1,717	1,695	1,687	1,670	1,719
Total	15,198	15,057	15,511	14,812	15,246	15,364	15,415	15,511	15,609	15,537	15,555	15,512	15,553
Mg+Fe	4,166	3,979	4,625	3,649	4,128	4,409	4,500	4,636	4,782	4,684	4,750	4,648	4,638
Mg/Fe+ Ma	0.321	0.347	0.369	0.357	0 323	0 346	0.377	0.345	0.361	0.360	0.354	0.338	0 346
Fe/Fe+M	0,02	0,047	0,000	0,007	0,020	0,040	0,011	0,040	0,001	0,000	0,004	0,000	0,010
g	0,679	0,653	0,631	0,643	0,677	0,654	0,623	0,655	0,639	0,640	0,646	0,662	0,654

Granat-Messpunkte

(Kationen Ladungs-	076 grt1_1 g	076 grt1_6	076 grt1_8	076 grt1_9	076 grt1_10	076 grt2_1	076 grt2_2	076 grt3_1	076 grt3_2	076 grt3_3	076 grt3_4	076 grt3_5	076 grt3_6
Ausgleich)													
SiO2	35,776	36,362	35,956	34,997	35,293	35,267	7 35,365	5 36,429	34,976	34,942	2 35,102	35,573	35,913
TiO2	0,003	0,027	0,033	0,000	0,023	0,003	0,005	5 0,000	0,087	0,013	8 0,012	0,025	0,052
AI2O3	20,569	21,124	20,726	20,391	20,807	21,003	3 20,926	6 20,601	19,958	3 20,429	20,514	20,854	20,709
Fe2O3	2,544	1,793	1,728	3,508	3,297	2,251	1,819	9 1,783	3 2,822	2 2,978	4,130	2,923	1,196
FeO	31,356	32,012	31,656	30,629	31,168	30,946	31,170	32,499	30,981	30,627	30,610	31,486	31,215
MnO	6,299	6,927	6,995	6,228	6,527	6,773	3 7,137	6,366	6,478	6,525	6,277	6,519	6,414
MgO	1,869	1,604	1,492	1,884	1,738	3 1,647	7 1,383	3 1,726	5 1,678	3 1,789	9 1,882	1,690	1,947
CaO	1,255	1,136	1,124	1,213	1,051	1,024	i 1,101	1,156	0,989	9 1,063	3 1,199	1,093	1,401
Na2O	0,020	0,035	0,026	0,000	0,000	0,000	0,004	٥,008 t	0,012	2 0,000	0,022	0,005	0,000
K2O	0,005	0,000	0,022	0,000	0,000	0,040	0,000	0,006	6 0,014	0,002	0,008	0,011	0,005
Total (Fe2O3)	99,695	101,020	99,757	98,850	99,904	98,954	98,910) 100,574	97,996	98,368	99,756	100,180	98,850
Si4+	2,950	2,954	2,960	2,923	2,917	2,928	3 2,938	3 2,974	2,946	6 2,928	3 2,912	2,928	2,965
Ti4+	0,000	0,002	0,002	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,005	5 0,001	0,001	0,002	0,003
Al3+	1,999	2,022	2,011	2,007	2,027	2,055	5 2,049	9 1,982	2. 1,981	2,018	3 2,006	2,023	2,015
Fe2+	2,320	2,284	2,286	2,360	2,359	2,289	9 2,279	9 2,328	2,361	2,334	2,382	2,348	2,229
Mn2+	0,440	0,477	0,488	0,441	0,457	0,476	6 0,502	0,440	0,462	0,463	0,441	0,454	0,448
Mg2+	0,230	0,194	0,183	0,235	0,214	0,204	0,171	0,210	0,211	0,224	0,233	0,207	0,240
Ca2+	0,111	0,099	0,099	0,109	0,093	0,091	0,098	0,10 1	0,089	0,095	5 0,107	0,096	0,124
Na+	0,003	0,006	0,004	0,000	0,000	0,000	0,001	I 0,001	0,002	2 0,000	0,003	0,001	0,000
K+	0,001	0,000	0,002	0,000	0,000	0,004	l 0,000	0,001	0,002	2 0,000	0,001	0,001	0,001
Total	8,053	8,037	8,036	8,073	8,068	8,047	8,038	8,037	8,060	8,063	8,086	8,060	8,025

Plagioklas-Messpunkte

	076 PI 1
SiO2	61,204
TiO2	0,107
AI2O3	24,403
FeO	0,338
MnO	0,116
MgO	0,008
CaO	5,898
Na2O	8,248
K2O	0,039
Total	100,361
Si4+	2,714
Ti4+	0,004
Al3+	1,275
Fe2+	0,013
Mn2+	0,004
Mg2+	0,001
Ca2+	0,280
Na+	0,709
K+	0,002
Total	5,001
Ab	71,521
An	28,259
	•

or 0,220 Ergebnisse der Verschneidung von Grt/Bt und GASP (Holdaway 2000, 2001), vom Programm GBGASP ausgegebene Werte:

GARNET BIOTITE-GASP INTERSECTION, HOLDAWAY

ALPHA QUARTZ

GASP MARGULES FILE GASP.AVE

GB MARGULES FILE GBDE99.AVE

SG = 252.15, HG = -6638460.0

Ρ	P SAMPI KBAR =	LE 076 2.509	1_6 T	DEG	C =	587.89	Т	SAMPLE	076	1_6
P	P SAMPI KBAR =	LE 076 1.805	3_2 T	DEG	C =	578.18	Т	SAMPLE	076	3_2
P	P SAMPI KBAR =	LE 076 2.192	2_1 T	DEG	C =	592.17	Т	SAMPLE	076	2_1
P	P SAMPI KBAR =	LE 076 2.647	3_1 T	DEG	C =	593.58	Т	SAMPLE	076	3_1
P	P SAMPI KBAR =	LE 076 2.324	3_3 T	DEG	C =	592.87	Т	SAMPLE	076	3_3
P	P SAMPI KBAR =	LE 076 2.380	3_5 T	DEG	C =	593.95	Т	SAMPLE	076	3_5
P	P SAMPI	LE 076	19					SAMDI.F	076	19
	KBAR =	3.092	T	DEG	C =	605.86	1		078	
Ρ	KBAR = P SAMPI KBAR =	3.092 E 076 2.920		DEG DEG	C = C =	605.86	Т	SAMPLE	076	3_4
Р 	KBAR = P SAMPI KBAR = P SAMPI KBAR =	3.092 JE 076 2.920 JE 076 4.286	- T 3_4 T 3_6 T	DEG DEG DEG	C = C = C =	605.86 602.00 633.09	T T	SAMPLE SAMPLE	076	3_4 3_6
P P P	KBAR = P SAMPI KBAR = P SAMPI KBAR = P SAMPI KBAR =	3.092 JE 076 2.920 JE 076 4.286 JE 076 2.457	T 3_4 T 3_6 T 1_10 T	DEG DEG DEG DEG	C = C = C = C =	605.86 602.00 633.09 611.37	T T T	SAMPLE SAMPLE SAMPLE	076 076 076	3_4 3_6 1_10

8.2.2 Probe 128, Bereich La Gata

Biotit-Messpunkte

	128	128	128	128
	grt-bt2_1	grt-bt2_2	grt_bt_3_4	grt_bt_1_3
SiO2	30,428	26,179	32,454	33,622
TiO2	0,751	1,113	1,555	1,603
Al2O3	23,176	18,759	19,114	20,155
FeO	24,738	24,621	21,872	21,235
MnO	0,147	0,098	0,110	0,119
MgO	10,795	11,815	9,422	9,719
CaO	0,097	0,088	0,006	0,013
Na2O	0,139	0,190	0,152	0,104
К2О	2,089	3,162	7,075	6,989
Total (Fe2O3)	92,359	86,025	91,759	93,558
Si	4,733	4,507	5,169	5,201
AIIV	3,267	3,493	2,831	2,799
Summe	8,000	8,000	8,000	8,000
AIVI	0,982	0,314	0,757	0,876
Ti	0,088	0,144	0,186	0,187
Fe	3,218	3,545	2,913	2,747
Mn	0,019	0,014	0,015	0,016
Mg	2,503	3,033	2,237	2,242
Summe	6,810	7,050	6,108	6,067
Са	0,016	0,016	0,001	0,002
Na	0,042	0,063	0,047	0,031
К	0,414	0,695	1,437	1,379
Summe	0,472	0,774	1,485	1,413
Total	15,283	15,824	15,593	15,480
Mg/Fe+Mg	0,438	0,461	0,434	0,449
Fe/Fe+Mg	0,562	0,539	0,566	0,551
Granat-Mess	spunkte			
Kationen mit	128	128	3 128	128
Ladungsausgleich	n Grt2_1	Grt2_2	Grt3_3	Grt3_5
SiO2	37,526	37,644	4 37,141	37,759
TiO2	0,000	0,000	0,008	0,000
AI2O3	21,566	21,302	2 21,349	21,151
Fe2O3	0,000	0,966	6 0,622	0,000
FeO	34,684	35,261	1 34,549	34,987
MnO	3,311	3,216	6 3,251	3,334
MgO	2,313	2,380	2,343	2,149
CaO	1,955	1,748	3 1,791	2,054
Na2O	0,000	0,001	1 0,023	0,000
K2O	0,033	0,002	2 0,000	0,005
Total (Fe2O3)	101,388	102,520	0 101,078	101,439
Si4+	2,992	2,978	3 2,975	3,015
Ti4+	0,000	0,000	0,001	0,000
AI3+	2,027	1,986	6 2,015	1,991
Fe3+	0,000	0,057	7 0,037	0,000
Fe2+	2,313	2,333	3 2,314	2,337
Mn2+	0,224	0,216	6 0,221	0,226

Mg2+

Ca2+

Na+

K+

0,275

0,167

0,000

0,003

0,281

0,148

0,000

0,000

0,280

0,154

0,004

0,000

0,256

0,176 0,000

0,000

Chlorit-Messpunkte		Plagioklas-Messpunkte	
	128		
	Chl 3_6		128 plag3_8
SiO2	24,279		
TiO2	0,102	SiO2	58,350
AI2O3	23,137	TiO2	0,037
FeO	24,731	AI2O3	26,538
MnO	0,152	FeO	0,468
MgO	14,003	MnO	0,019
CaO	0,048	MgO	0,000
Na2O	0,044	CaO	8,629
K2O	0,000	Na2O	6,690
Total (Fe2O3)	86,496	K2O	0,071
		Total	100,802
Si	5,174	Si4+	2,595
AIIV	2,826	Ti4+	0,001
Summe	8,000	Al3+	1,391
AIVI	2,985	Fe2+	0,017
Ti	0,016	Mn2+	0,001
Fe	4,407	Mg2+	0,000
Mn	0,028	Ca2+	0,411
Mg	4,448	Na+	0,577
Са	0,011	K+	0,004
Na	0,018	Total	4,998
К	0,000		
Summe	11,914	Ab	58,148
Total	19,914	An	41,445
		Or	0,406
Mg+Fe	8,856		I
Mg/Fe+Mg	0,502		

Ergebnisse der Verschneidung von Grt/Bt und GASP (Holdaway 2000, 2001), vom Programm GBGASP ausgegebene Werte:

GARNET BIOTITE-GASP INTERSECTION, HOLDAWAY

ALPHA QUARTZ

GASP MARGULES FILE GASP.AVF GB MARGULES FILE GBDE99.AVE SG = 258.76, HG = -6628521.0

P S P KBAR	AMPLE : = 3.0	128 2_1 076 T	_2_1 DEG	C =	567.64	Т	SAMPLE	128	2_1_2_1
P S P KBAR	AMPLE :	128 2_2 878 T	_2_2 DEG	C =	532.16	Т	SAMPLE	128	2_2_2_2
P S P KBAR	AMPLE : = 2.'	128 3_3 711 T	_3_4 DEG	C =	569.22	Т	SAMPLE	128	3_3_3_4
P S P KBAR	AMPLE 2.8	128 3_5 886 T	_1_3 DEG	C =	546.07	Т	SAMPLE	128	3_5_1_3

8.2.3 Probe 191, Bereich Boca de la Sierra

Granat 2, Biotit-Messpunkte

	1	3	5	7	10	12	16	18	30
	191 Grt 2								
SiO2	35,744	37,011	35,864	33,810	31,179	33,962	34,332	34,587	34,965
TiO2	2,758	2,641	2,688	2,319	1,138	1,523	2,573	2,674	3,015
AI2O3	18,315	19,335	18,324	17,672	20,639	18,364	18,226	18,398	18,137
FeO	21,005	20,661	20,749	20,885	25,296	23,172	21,324	20,667	24,337
MnO	0,044	0,000	0,068	0,120	0,017	0,036	0,098	0,039	0,053
MgO	9,208	8,248	10,094	9,497	12,470	8,275	8,404	8,900	6,806
CaO	0,000	0,032	0,027	0,049	0,063	0,015	0,043	0,014	0,035
Na2O	0,554	0,557	0,532	0,663	0,070	0,167	0,500	0,399	0,549
K2O	8,046	8,041	8,020	8,036	2,286	7,647	8,243	8,521	8,420
Total	95,673	96,525	96,366	93,051	93,158	93,162	93,743	94,199	96,316
Si	5,423	5,522	5,394	5,317	4,834	5,357	5,357	5,353	5,379
AIIV	2,577	2,478	2,606	2,683	3,166	2,643	2,643	2,647	2,621
Summe	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000
AIVI	0,697	0,922	0,642	0,592	0,605	0,770	0,709	0,709	0,667
Ti	0,315	0,296	0,304	0,274	0,133	0,181	0,302	0,311	0,349
Fe	2,665	2,578	2,610	2,747	3,280	3,057	2,783	2,675	3,131
Mn	0,006	0,000	0,009	0,016	0,002	0,005	0,013	0,005	0,007
Mg	2,083	1,835	2,263	2,226	2,882	1,946	1,955	2,054	1,561
Summe	5,765	5,631	5,827	5,856	6,901	5,958	5,762	5,754	5,714
Са	0,000	0,005	0,004	0,008	0,010	0,003	0,007	0,002	0,006
Na	0,163	0,161	0,155	0,202	0,021	0,051	0,151	0,120	0,164
К	1,557	1,530	1,539	1,612	0,452	1,539	1,641	1,683	1,652
Summe	1,720	1,697	1,698	1,823	0,484	1,592	1,799	1,805	1,822
Total	15,485	15,327	15,525	15,678	15,385	15,551	15,561	15,559	15,536
Mg+Fe	4,748	4,413	4,873	4,973	6,162	5,002	4,738	4,729	4,692
Mg/Fe+Mg	0,439	0,416	0,464	0,448	0,468	0,389	0,413	0,434	0,333

Granat 2, Granat-Messpunkte

	2	4	6	8	9	15	17	19	31
	191 Grt 2								
SiO2	37,287	37,766	37,201	36,820	37,188	36,882	36,801	37,066	36,461
TiO2	0,035	0,000	0,000	0,012	0,152	0,163	0,058	0,000	0,047
AI2O3	20,746	21,338	21,009	20,505	20,676	20,584	20,618	20,639	20,174
FeO	36,589	36,372	37,010	35,991	35,709	35,645	36,262	36,343	35,171
MnO	1,596	1,695	1,623	1,880	1,566	1,512	2,226	2,226	3,624
MgO	2,701	2,534	2,602	2,549	2,605	2,814	2,191	2,388	1,786
CaO	2,029	1,980	2,051	2,124	1,836	1,955	1,714	1,739	1,679
Na2O	0,071	0,032	0,005	0,008	0,018	0,000	0,000	0,012	0,028
K2O	0,000	0,007	0,019	0,000	0,000	0,004	0,027	0,002	0,010
Total	101,055	101,724	101,521	99,888	99,750	99,559	99,897	100,416	98,980
Si4+	2,992	3,000	2,977	2,992	3,011	2,995	2,995	2,999	3,004
Ti4+	0,002	0,000	0,000	0,001	0,009	0,010	0,004	0,000	0,003
Al3+	1,962	1,998	1,981	1,964	1,973	1,970	1,977	1,968	1,959
Fe2+	2,456	2,417	2,477	2,446	2,418	2,421	2,468	2,459	2,424
Mn2+	0,108	0,114	0,110	0,129	0,107	0,104	0,153	0,153	0,253
Mg2+	0,323	0,300	0,310	0,309	0,314	0,341	0,266	0,288	0,219
Ca2+	0,174	0,169	0,176	0,185	0,159	0,170	0,149	0,151	0,148
Na+	0,011	0,005	0,001	0,001	0,003	0,000	0,000	0,002	0,005
K+	0,000	0,001	0,002	0,000	0,000	0,000	0,003	0,000	0,001
Total	8,030	8,003	8,034	8,026	7,995	8,010	8,015	8,019	8,016

	191/x7	191/x8	191/x9	191/x22	191/x23	191/x24	191/x34	191/x43	191/x44	191/x52	191/x60	191/x78
SiO2	34,304	33,794	35,321	34,975	35,109	35,178	33,876	35,278	34,256	36,911	35,096	35,315
TiO2	3,142	3,410	3,044	2,403	2,960	1,979	2,827	3,147	3,044	0,000	3,318	3,398
Al2O3	18,179	17,946	18,784	18,804	18,510	20,108	17,153	19,580	18,724	20,539	18,830	18,588
FeO	18,219	19,185	18,413	18,017	18,334	17,010	19,477	19,630	19,566	34,778	19,416	19,521
MnO	0,024	0,035	0,000	0,024	0,030	0,036	0,124	0,065	0,024	1,729	0,065	0,041
MgO	8,628	8,823	9,372	9,131	9,122	10,173	9,090	8,449	7,860	0,919	7,944	8,312
CaO	0,078	0,037	0,019	0,085	0,025	0,021	0,000	0,014	0,041	1,663	0,000	0,000
Na2O	0,260	0,250	0,209	0,391	0,257	0,327	0,220	0,185	0,225	0,130	0,235	0,247
K2O	8,834	8,787	8,958	8,756	8,943	8,745	8,764	9,291	9,118	0,010	9,134	9,255
Total (Fe2O3)	36,041	37,117	36,971	36,403	36,710	36,312	37,674	37,634	36,833	39,230	36,794	37,377
Si	5,408	5,327	5,406	5,435	5,427	5,366	5,398	5,349	5,369	5,640	5,412	5,414
AIIV	2,592	2,673	2,594	2,565	2,573	2,634	2,602	2,651	2,631	2,360	2,588	2,586
Summe	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000	8,000
AIVI	0,785	0,662	0,795	0,880	0,799	0,981	0,619	0,848	0,827	1,340	0,835	0,773
Ti	0,373	0,404	0,350	0,281	0,344	0,227	0,339	0,359	0,359	0,000	0,385	0,392
Fe	2,402	2,529	2,357	2,342	2,370	2,170	2,595	2,489	2,564	4,445	2,504	2,503
Mn	0,003	0,005	0,000	0,003	0,004	0,005	0,017	0,008	0,003	0,224	0,009	0,005
Mg	2,027	2,073	2,138	2,115	2,102	2,313	2,159	1,910	1,837	0,209	1,826	1,900
Summe	5,590	5,673	5,640	5,621	5,619	5,696	5,728	5,614	5,590	6,217	5,558	5,573
Са	0,013	0,006	0,003	0,014	0,004	0,003	0,000	0,002	0,007	0,272	0,000	0,000
Na	0,080	0,076	0,062	0,118	0,077	0,097	0,068	0,054	0,068	0,039	0,070	0,073
к	1,776	1,767	1,749	1,736	1,763	1,702	1,781	1,797	1,823	0,002	1,797	1,810
Summe	1,869	1,850	1,814	1,868	1,844	1,802	1,849	1,854	1,898	0,313	1,867	1,884
Total	15,459	15,523	15,455	15,489	15,463	15,498	15,578	15,468	15,489	14,530	15,425	15,456
Mg+Fe	4,429	4,603	4,495	4,457	4,472	4,483	4,754	4,399	4,401	4,654	4,330	4,403
Mg/Fe+Mg	0,458	0,450	0,476	0,475	0,470	0,516	0,454	0,434	0,417	0,045	0,422	0,432

Granat 1, Biotit-Messpunkte

Granat 1, Granat-Messpunkte

	191/x10	191/x11	191/x12	191/x26	191/x27	191/x29	191/x36	191/x37	191/x47	191/x48	191/x54	191/x70	191/x81
SiO2	38,237	37,751	37,762	37,430	36,718	37,235	37,406	37,896	37,311	37,590	36,779	37,470	36,969
TiO2	0,029	0,045	0,012	0,009	0,045	0,050	0,021	0,038	0,039	0,015	0,000	0,000	0,036
AI2O3	20,956	20,880	20,853	20,656	20,421	20,726	20,724	21,256	20,823	20,773	20,220	20,706	20,344
FeO	35,386	35,592	35,386	34,966	35,364	35,999	35,278	36,261	35,783	35,202	35,595	34,283	35,527
MnO	1,497	1,696	1,829	1,940	1,753	2,195	1,683	1,757	2,111	1,651	1,623	3,167	1,915
MgO	3,032	2,708	3,384	3,280	3,050	3,021	3,126	3,149	2,971	2,822	3,148	2,328	3,240
CaO	1,673	1,744	1,736	1,829	1,718	2,092	1,623	1,858	1,790	1,718	1,741	1,698	1,676
Na2O	0,000	0,008	0,027	0,022	0,011	0,008	0,016	0,000	0,005	0,000	0,068	0,000	0,005
K2O	0,000	0,012	0,000	0,012	0,000	0,000	0,000	0,053	0,023	0,039	0,000	0,010	0,001
Total	100,809	100,436	100,988	100,143	99,080	101,327	41,727	43,078	42,684	41,433	42,175	41,486	99,714
Si4+	3,044	3,028	3,011	3,011	2,996	2,981	3,016	2,993	2,993	3,031	3,001	3,034	2,999
Ti4+	0,002	0,003	0,001	0,001	0,003	0,003	0,001	0,002	0,002	0,001	0,000	0,000	0,002
Al3+	1,966	1,974	1,960	1,959	1,964	1,955	1,969	1,978	1,969	1,974	1,944	1,976	1,945
Fe2+	2,356	2,388	2,360	2,353	2,413	2,410	2,379	2,395	2,401	2,374	2,429	2,322	2,410
Mn2+	0,101	0,115	0,124	0,132	0,121	0,149	0,115	0,118	0,143	0,113	0,112	0,217	0,132
Mg2+	0,360	0,324	0,402	0,393	0,371	0,361	0,376	0,371	0,355	0,339	0,383	0,281	0,392
Ca2+	0,143	0,150	0,148	0,158	0,150	0,179	0,140	0,157	0,154	0,148	0,152	0,147	0,146
Na+	0,000	0,001	0,004	0,003	0,002	0,001	0,003	0,000	0,001	0,000	0,011	0,000	0,001
K+	0,000	0,001	0,000	0,001	0,000	0,000	0,000	0,005	0,002	0,004	0,000	0,001	0,000
Total	7,971	7,984	8,010	8,011	8,020	8,039	7,999	8,019	8,021	7,983	8,032	7,978	8,027

Granat 1, Plagioklas-Messpunkte

	191/x2	191/x3	191/x5	191/x17	191/x18	191/x20	191/x32	191/x33	191/x39	191/x41	191/x42	191/x51	191/x68	191/x76
SiO2	46,631	46,233	46,815	46,485	46,021	46,220	48,744	46,605	55,833	54,791	46,653	48,451	56,099	47,397
TiO2	0,000	0,000	0,010	0,040	0,035	0,000	0,000	0,015	0,000	0,033	0,090	0,000	0,000	0,000
AI2O3	33,069	33,705	33,788	33,516	33,116	32,973	31,617	33,703	27,624	27,319	33,827	34,613	27,030	32,338
FeO	0,190	0,308	0,519	0,304	0,797	0,391	0,644	0,608	0,522	0,506	0,558	1,012	1,390	0,913
MnO	0,000	0,000	0,086	0,000	0,086	0,000	0,025	0,092	0,000	0,000	0,012	0,000	0,062	0,006
MgO	0,002	0,019	0,000	0,000	0,055	0,000	0,000	0,000	0,000	0,034	0,000	0,123	0,000	0,062
CaO	18,222	17,854	18,036	18,078	17,503	18,069	16,175	17,764	10,974	10,723	18,426	14,724	9,969	15,475
Na2O	1,539	1,492	1,578	1,552	1,357	1,655	2,520	1,546	5,488	5,781	1,387	2,016	5,801	2,463
K2O	0,000	0,006	0,029	0,037	0,030	0,040	0,020	0,048	0,083	0,038	0,061	0,127	0,049	0,057
Total	99,654	99,619	100,860	100,012	98,999	99,350	99,745	100,381	100,525	99,227	101,014	101,067	100,400	98,712
Si4+	2,158	2,139	2,143	2,144	2,146	2,149	2,245	2,143	2,508	2,497	2,135	2,191	2,528	2,207
Ti4+	0,000	0,000	0,000	0,001	0,001	0,000	0,000	0,001	0,000	0,001	0,003	0,000	0,000	0,000
Al3+	1,803	1,838	1,823	1,822	1,820	1,807	1,716	1,827	1,463	1,468	1,824	1,844	1,436	1,774
Fe2+	0,007	0,012	0,020	0,012	0,031	0,015	0,025	0,023	0,020	0,019	0,021	0,038	0,052	0,036
Mn2+	0,000	0,000	0,003	0,000	0,003	0,000	0,001	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,000
Mg2+	0,000	0,001	0,000	0,000	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000	0,002	0,000	0,008	0,000	0,004
Ca2+	0,903	0,885	0,885	0,893	0,875	0,900	0,798	0,875	0,528	0,524	0,903	0,713	0,481	0,772
Na+	0,138	0,134	0,140	0,139	0,123	0,149	0,225	0,138	0,478	0,511	0,123	0,177	0,507	0,222
K+	0,000	0,000	0,002	0,002	0,002	0,002	0,001	0,003	0,005	0,002	0,004	0,007	0,003	0,003
Total	5,010	5,009	5,016	5,014	5,005	5,023	5,011	5,013	5,002	5,024	5,014	4,979	5,009	5,019
Ab	13,258	13,132	13,644	13,419	12,282	14,188	21,969	13,570	47,284	49,274	11,951	19,697	51,145	22,287
An	86,741	86,832	86,192	86,373	87,538	85,585	77,915	86,153	52,243	50,511	87,706	79,486	48,570	77,376
Or	0,001	0,036	0,164	0,208	0,180	0,227	0,116	0,277	0,472	0,215	0,343	0,817	0,284	0,338

Ergebnisse der Verschneidung von Grt/Bt und GASP (Holdaway 2000, 2001), vom Programm GBGASP ausgegebene Werte

GARNET BIOTITE-GASP INTERSECTION, HOLDAWAY

ALPHA QUARTZ GASP MARGULES FILE GASP.AVF GB MARGULES FILE GBDE99.AVE SG = 258.76, HG = -6628521.0P SAMPLE 191 1 2_7_10 T SAMPLE 191 1 2 7 10 P KBAR = 1.983 T DEG C = 591.70P SAMPLE 191 1 3_8_11 T SAMPLE 191 1 3_8_11 $P \text{ KBAR} = 2.004 \text{ T} \overline{DEG} \text{ C} = 575.95$ P SAMPLE 191 1 5_9_12 T SAMPLE 191 1 5_9_12 $P \text{ KBAR} = 2.183 \text{ T} \overline{DEG} \text{ C} = 600.48$ P SAMPLE 191 1 17_22_26 T SAMPLE 191 1 17_22_26 P KBAR = 2.437 T DEG C = 600.87P SAMPLE 191 1 18_23_27 T SAMPLE 191 1 18_23_27 P KBAR = 2.011 T DEG C = 586.24P SAMPLE 191 1 20_24_29 T SAMPLE 191 1 20 24 29 P KBAR = 2.507T DEG C = 560.62P SAMPLE 191 1 32 34 36 T SAMPLE 191 1 32 34 36 P KBAR = 2.115 T DEG C = 601.06P SAMPLE 191 1 33_35_37 T SAMPLE 191 1 33_35_37 P KBAR = 2.431 T DEG C = 606.48P SAMPLE 191 1 41 43 47 T SAMPLE 191 1 41_43_47 P KBAR = 2.798 T DEG C = 606.49P SAMPLE 191 1 39_44_48 T SAMPLE 191 1 39_44_48 T DEG C = 610.61P KBAR = 2.733P SAMPLE 191 1 51 52 54 T SAMPLE 191 1 51 52 54 $P \text{ KBAR} = 2.580 \text{ T} \overline{\text{DEG}} \text{ C} = 627.16$ P SAMPLE 191 1 68 60 70 T SAMPLE 191 1 68 60 70 $P \text{ KBAR} = 2.431 \text{ T} \overline{DEG C} = 582.88$ P SAMPLE 191 1 76_78_81 T SAMPLE 191 1 76_78_81 P KBAR = 2.404 T DEG C = 622.41

8.2.4 Probe 080a, Bereich Punta Lobos

Granat-Messpunkte

Kationen mit	080a	080a	080a	080a	080a	080a	080a
Ladungsausgleich	#16	#17	#18	#19	#24	#27	#28
SiO2	35,288	35,335	35,952	35,477	35,329	37,066	24,356
TiO2	0,462	0,579	0,699	0,434	0,706	0,365	0,472
AI2O3	7,150	6,262	7,985	6,179	7,855	6,345	5,702
Fe2O3	23,462	22,721	20,392	24,630	20,620	22,156	13,910
FeO	0,000	1,832	0,000	0,677	0,000	2,185	0,000
MnO	0,633	0,764	0,442	0,376	0,412	0,629	0,267
MgO	0,126	0,078	0,131	0,025	0,108	0,081	0,235
CaO	32,826	31,244	34,377	32,493	34,055	32,507	38,669
Na2O	0,036	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,262
K2O	0,000	0,000	0,002	0,027	0,000	0,012	0,160
Total (Fe2O3)	99,984	98,816	99,980	100,316	99,083	101,347	84,035
Si4+	2,890	2,944	2,916	2,914	2,895	3,001	2,303
Ti4+	0,028	0,036	0,043	0,027	0,043	0,022	0,034
Al3+	0,690	0,615	0,763	0,598	0,759	0,605	0,635
Fe3+	1,446	1,425	1,245	1,522	1,271	1,350	0,990
Fe2+	0,000	0,128	0,000	0,047	0,000	0,148	0,000
Mn2+	0,044	0,054	0,030	0,026	0,029	0,043	0,021
Mg2+	0,015	0,010	0,016	0,003	0,013	0,010	0,033
Ca2+	2,880	2,789	2,987	2,860	2,990	2,820	3,917
Na+	0,006	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,048
K+	0,000	0,000	0,000	0,003	0,000	0,001	0,019
Normierung auf 100%							
Ti-Andradit	2,926	3,652	4,324	2,739	4,441	0,000	4,311
Fe2+-Andradit	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	2,226	0,000
Andradit	71,388	68,045	58,777	75,058	60,463	67,525	59,225
Grossular	24,380	21,885	36,898	19,625	35,096	24,291	36,464
Pyrop	0,527	0,325	0,000	0,104	0,000	0,327	0,000
Spessartin	0,779	1,810	0,000	0,891	0,000	1,438	0,000
Almandin	0,000	4,283	0,000	1,584	0,000	4,193	0,000
	•						

Epidot-Messpunkte

Kationen mit	080a						
Ladungsausgleich	#31	#35	#39	#42	#46	#49	#51
SiO2	35,288	35,335	35,952	35,477	35,329	37,066	24,356
TiO2	0,462	0,579	0,699	0,434	0,706	0,365	0,472
AI2O3	7,150	6,262	7,985	6,179	7,855	6,345	5,702
Fe2O3	23,462	22,721	20,392	24,630	20,620	22,156	13,910
FeO	0,000	1,832	0,000	0,677	0,000	2,185	0,000
MnO	0,633	0,764	0,442	0,376	0,412	0,629	0,267
MgO	0,126	0,078	0,131	0,025	0,108	0,081	0,235
CaO	32,826	31,244	34,377	32,493	34,055	32,507	38,669
Na2O	0,036	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,262
K2O	0,000	0,000	0,002	0,027	0,000	0,012	0,160
Total (Fe2O3)	98,300	97,090	97,190	97,705	98,010	97,540	97,890
X Epidot	25,649	28,523	28,523	25,338	25,667	25,627	24,265

8.3 Parameter für Phasendiagramm-Modelle

Parameter sind im Text (Abschnitt 5.1) beschrieben, hier ist die Darstellung der Parameter im ,computational options file' für PERPLE X dokumentiert.

8.3.1 Granat führende Metapelite La Muela / Las Palomas

```
hp02ver.dat
                thermodynamic data file
                                        print file name, blank = no output
 lm2_01_plot
                plot file name, blank = no output
                            solution model file, blank = no solutions
newest format solut.dat
La Muela 076 constrained bulk
     5 calculation type, 0 - no independent potentials, 1 - two independent potentials 3 -
one independent potentials, 4 - swash 5 - gridded minimization, 7 - fractionation
     3 efficiency level, 0 - low, 5 - high
    1 print potentials, 0 - yes, 1 - no
    1 JTEST, debug flag
    0 reaction format, 0 - just names, 1 - sat. phases 2 - S and V, 3 - stoichiometry, 4
- everything
     0 console messages, 0 - yes, 1 - suppress most
    1 short print file, 0 - no, 1 - yes
    1 for gridded minimization grid refinement, 1 - true boundaries, 0 - all boundaries
    40 for gridded minimization JLOW, number of Y-nodes at lowest level
    5 for gridded minimization JLEV, number of grid levels
    0 number component transformations
    15 number of components
    1 component amounts, 0 - molar, 1 weight
    1 assemblage data 0 - print, 1 - suppress
    0 variance flag, 0 - calculate all, 1 - only true univariants
   1 IDBASE data base code
    5 ifug EoS for saturated phase
    40 for gridded minimization ILOW, number of X-nodes at lowest level
     0 special dependencies: 0 - P and T independent, 1 - P(T), 2 - T(P)
               0.00000
                            0.00000
                                           0.00000
  0.0000
                                                        0.00000
                                                                     Geothermal gradient
polynomial coeffs.
begin thermodynamic component list
NA2O 1 1.95000
                      0.00000
                                   0.00000
                                               weight amount
MGO 1 1.43000
                      0.00000
                                   0.00000
                                              weight amount
AL2O3 1 14.9200
                     0.00000
                                   0.00000
                                              weight amount
 K20
     1 1.65000
                      0.00000
                                   0.00000
                                               weight amount
 CAO 1 1.08000
                      0.00000
                                   0.00000
                                              weight amount
 FEO 1 6.32000
                                   0.00000
                      0.00000
                                              weight amount
 end thermodynamic component list
begin saturated component list
 SIO2 1 68.7300
                      0.00000
                                   0.00000
                                              weight amount
 end saturated component list
8.3.2 Granat führende Metapelite Sierra La Gata
 hp02ver.dat
                thermodynamic data file
```

print file name, blank = no output lg2_001_plot plot file name, blank = no output newest_format_solut.dat solution model file, blank = no solutions La Gata constrained

```
5 calculation type, 0 - no independent potentials, 1 - two independent potentials 3 -
one independent potentials, 4 - swash 5 - gridded minimization, 7 - fractionation
     3 efficiency level, 0 - low, 5 - high
     1 print potentials, 0 - yes, 1 - no
     1 JTEST, debug flag
     0 reaction format, 0 - just names, 1 - sat. phases 2 - S and V, 3 - stoichiometry, 4
- everything
     0 console messages, 0 - yes, 1 - suppress most
     1 short print file, 0 - no, 1 - yes
     0 for gridded minimization grid refinement, 1 - true boundaries, 0 - all boundaries
    40 for gridded minimization JLOW, number of Y-nodes at lowest level
     5 for gridded minimization JLEV, number of grid levels
     0 number component transformations
    15 number of components
     1 component amounts, 0 - molar, 1 weight
     1 assemblage data 0 - print, 1 - suppress
     0 variance flag, 0 - calculate all, 1 - only true univariants
     1 IDBASE data base code
     5 ifug EoS for saturated phase
    40 for gridded minimization ILOW, number of X-nodes at lowest level
     0 special dependencies: 0 - P and T independent, 1 - P(T), 2 - T(P)
  0.00000
               0.00000
                             0.00000
                                            0.00000
                                                         0.00000
                                                                     Geothermal gradient
polynomial coeffs.
 begin thermodynamic component list
 NA2O 1 2.46000
                     0.00000 0.00000
                                               weight amount
 MGO 1 2.20000
                      0.00000
                                  0.00000
                                               weight amount
 AL203 1 16.1000
                      0.00000
                                  0.00000
                                               weight amount
 K2O 1 2.91000
                     0.00000
                                 0.00000
                                               weight amount
 CAO 1 3.00000
                     0.00000
                                  0.00000
                                               weight amount
      1 8.06000
                      0.00000
                                   0.00000
                                               weight amount
 FEO
 end thermodynamic component list
 begin saturated component list
 SIO2 1 61.7900
                      0.00000
                                   0.00000
                                               weight amount
 end saturated component list
```

8.3.3 Alterierte Metabasite von Punta Lobos / Todos Santos

Die Gesamtgesteinschemie wurde ausgehend von einer MORB-Zusammensetzung in acht Schritten zu CaO-reicherer Chemie verändert. Diese Betrachtung wurde mit drei verschiedenen Werten von XCO_2 multipliziert (insgesamt 24 Modelle). Grundsätzlich sieht die Definitions-Datei für VERTEX wie folgt aus (Datei M10_001.txt, Definition für MORB-Chemie bei $XCO_2 = 0,001$):

```
0 reaction format, 0 - just names, 1 - sat. phases 2 - S and V, 3 - stoichiometry, 4
- everything
     0 console messages, 0 - yes, 1 - suppress most
    1 short print file, 0 - no, 1 - yes
    1 for gridded minimization grid refinement, 1 - true boundaries, 0 - all boundaries
    40 for gridded minimization JLOW, number of Y-nodes at lowest level
    5 for gridded minimization JLEV, number of grid levels
    0 number component transformations
    15 number of components
    1 component amounts, 0 - molar, 1 weight
    1 assemblage data 0 - print, 1 - suppress
    0 variance flag, 0 - calculate all, 1 - only true univariants
    1 IDBASE data base code
    5 ifug EoS for saturated phase
    40 for gridded minimization ILOW, number of X-nodes at lowest level
     0 special dependencies: 0 - P and T independent, 1 - P(T), 2 - T(P)
              0.00000
  0.00000
                            0.00000
                                          0.00000
                                                       0.00000
                                                                    Geothermal gradient
polynomial coeffs.
 begin thermodynamic component list
 NA2O 1 3.01000
                    0.00000
                                  0.00000
                                              weight amount
 MGO 1 6.44000
                    0.00000
                                 0.00000
                                              weight amount
                    0.00000
 AL203 1 16.0900
                                  0.00000
                                              weight amount
 CAO 1 10.4600
                    0.00000
                                 0.00000
                                             weight amount
 TIO2 1 2.03000
                    0.00000
                                 0.00000
                                              weight amount
 MNO
      1 0.50000
                     0.00000
                                  0.00000
                                              weight amount
 FEO 1 10.4900
                    0.00000
                                 0.00000 weight amount
     1 0.50000
 02
                     0.00000
                                  0.00000
                                              weight amount
 end thermodynamic component list
 begin saturated component list
 SIO2 1 49.20000
                     0.00000
                                  0.00000
                                               weight amount
 end saturated component list
 begin saturated phase component list
 Н2О
 C02
 end saturated phase component list
 begin mobile component list
 end mobile components
 begin excluded phase list
 end excluded phase list
 begin solution phase list
 AnPl
 GrAd
 Cpx(1)
 TrTsPg(HP)
 end solution phase list
  6000.0
           973.00
                      0.00100000 0.0000
                                               0.0000
                                                         max p, t, xco2, u1, u2
                       0.00100000 0.0000
  1000.0
            473.00
                                               0.0000
                                                         min p, t, xco2, u1, u2
  1.0000
             1.0000
                       1.00000000 1.0000
                                               1.0000
                                                          increment p, t, xco2, u1, u2
  2 1 3 4 5 iv1, iv2, iv3, iv4, iv5
```

8.4 Probenlokationen

UTM Koordinaten Zone 12Q

Profil	Probe	Schliff-Nr	Orientierung	UTM rechts	UTM hoch	Geländeansprache
La Gata	1201/016	29197, 29198	st 140/60	619367	645026	Metapelit, And-Porphyroblasten
	1201/017	29199	sf 270/62, I338/42	618362	646246	Phyllonit
	1201/018	29200, 29201		618185	646964	
	1201/019	29202		618197	647194	
	1201/020	29203		617797	648064	
	1201/021	29210, 29211		617397	648456	
	1201/022	29212		617221	648564	
	0402/124	29246	sf 294/36	614525	648818	Metasedimente
	0402/125	29214	sf 324/58	616515	649431	Meta-Psammit
	0402/126	29215		616480	649288	Migmatit
	0402/127	29242	sf 332/42	616961	649205	Migmatit
El Ranchito	0102/113	29213, 29225		618400	651066	Migmatit
	0102/114	29216		618249	651237	Restit-Knödel (?)
	0102/115	29206		618156	651745	Ultrabasit
	0102/117	29204		615226	652313	?Basalt-Gang
Santa Martha	0502/128	29207, 29208	sf 310/78	614503	639304	Migmatit
	0502/129	29209	ss 74/68	614163	639733	Pillow-Basalt
	0502/131	29205		613422	640350	Migmatit
	0502/133	29247		612488	641347	Migmatit
Todos-Marmol	1301/023			589768	583224	Marmor Metapelite
	1301/023 a			589768	583224	Marmor, Metapelite
	1301/026	29217		591430	588271	zerscherter Gabbro
	1301/027	29218		589644	589241	zerscherter Gabbro
San Pedrito	2401/080a	29233	sf 332/15	580191	586166	GrtEpGneis
	2401/080b	29219		580191	586166	Metabasit
Punta Lobos	0202/118a	29226		578531	589475	Intrudierte Gneise
	0202/118b	29227		578531	589475	Intrudierte Gneise
El Salado	2801/096	29220		583696	591972	Kataklasit (Gabbro)
	2801/098	29259	sf 124/8	582513	591574	Glimmerschiefer mit Grt (?)
	2801/099	29221	sf=ss= 100/10	582429	591598	Marmor (mit Ves.)
	2801/100a	29245		581958	591499	GrtDiatexit
	2801/100b	29222		581958	591499	GrtDiatexit
	3001/104	29223		587930	579103	Pegmatit
	3001/104b	29234		587930	579103	Glimmerschiefer
	3001/105	29224		588157	579253	Migmatit - Melamosom
	3001/106	29228		591078	581571	Hbl Kumulat
San Isidro	0302/120	29235		584021	652451	Norit
	0302/121a	29241		583142	652636	Hbl-Gabbro
	0302/121b	29236		583142	652636	Norit

	0302/122	29237		583717	652580	Norit
	0302/123	29283		585767	651715	Metasediment
El Gracho	1601/035	30027, 30028	160/66 E	584703	634338	zerscherter Granit
	1601/036	30029	139/30 SW	585238	633613	zerscherter Granit
	1601/014	29255	-	585616	633275	sill-cord(?) Migmatit
	1601/037	30030 30031	19/65 F	587256	631095	Granit(ultra)mylonit
	1601/040	29360	sf 332/52 120E	590249	629310	Hbl-Gardrt Scherz
	1601/041	20000	51 002/02, 1202	590510	628904	Hbl-Pornhyr
	1601/043	30032 30033		580/31	630440	
	1601/04/2	20361		500164	626767	Sill Migmatit
	1601/044a	29301		500164	626767	Sill-Migmatit
	0001/0440	29347		590104	020707	Sill-wightaut
	0901/SILL	29248		282207	033455	Silimanit
Valle Perdido	1701/047	29403, 29404	160/30 W	587376	621917	Granit-Protomvl.
	1701/048a	29323		587192	622061	Knotenschiefer
	1701/048b	29281		587192	622061	
	1701/040	20256	177/42 E 14/9	587313	622001	Serizit-Phyllit
	1701/040	20200	17772 L, 14/3	587313	622070	
	1701/050	20071 20224	of 04/92	507515	622013	Oz rojobor Dhyllit
	1701/051	29371, 29334	51 94/05	500104	622354	
	1701/051	29300		5050054	022400	Giimmerschieler
	1701/056		17/00 E	585027	616892	Granit-Mylonit
La Muela	1801/057	29282	sf 120/62	584083	616341	Knoten-Phyllit
	1801/058		17/19 W	584097	616337	Oz-reicher Mylonit
	1801/059			584263	616444	Granhit-Phyllit
	1801/060	20340	170/65 E	584527	616535	Granit- Mylonit
	1801/061	20350	7/65 E	584726	616402	Granit-Mylonit
	1801/0615	29350	NOS L	584726	616402	Granit-Wylonit
	1901/062	29331		504720	615009	And Carbonachiafor
	2001/0622	29374		501272	612602	And-Galbenschleier
	2001/0638	29232		501575	012003	
	2001/064	29244		501505	012027	SillPhyllit
	2001/0640	29365		501505	012027	Basaligang
	2001/0640	29363	6 4 9 9 / 9 9	581565	612627	
	2001/065	29257	st 106/38	582833	613943	Knoten-Phyllit
	2001/066			582978	614047	And-Garbenschiefer
	2001/067		95/52	583248	614216	Graphit-Phyllit
	2001/068	29352		583450	614050	Meta-Siltit (?)
	2001/069	29364	sf 82/44	583710	614644	Phyllit mit Pegmatiten
			6.0.7.10.0			
Las Palomas	2301/071	29820	st 85/38	579944	608548	Phyllit mit Pegmatiten
	2301/071b			579944	608548	SillKnoten-Phyllit
	2301/074	29239	24/38 E	580587	608978	Mus-Qz-Knoten-Phyllit
	2301/075	29499		580903	608945	Metagrauwacke (?)
	2301/076	29240	sf 74/37	581042	609134	GrtPhyllit
	2301/077		sf 108/38	581591	609344	Meta-Mergel
	2301/078	29500	sf 145/52	582592	608754	Graphit-Phyllit
	2301/079			583105	608178	
	2501/085		sf 104/35	583780	608523	Serizit-Phyllit
	2501/086	29324	sf 108/58	583995	608455	Knoten-Phyllit
	2501/087	29501	sf 89/61	584137	608347	Phyllit

	2501/088	29502	sf 123/30	584249	607748	Phyllit (neben Pegmatit)
	2501/088 b	29503		584249	607748	Basaltgang geschiefert
	2501/091	29258	sf 100/27	584873	607499	And Phyllite
	2701/093	29504	4/39 E ü	586293	603355	Bas. Mylonit
San Antonio	3101/108a	29907		595077	633275	Gang: Dolerit
	3101/108b	29908		595077	633275	Gang: Pegmatit
	3101/108c	29909		595077	633275	Gang: Aplit
	3101/109			595224	631944	Gang: junger Andesit?
	3101/110	29486		594225	631319	Ultramafit Microondas
	3101/111a	29910		588938	630167	Restit
	3101/111b	29842		588938	630167	Restit
La Huerta	1,131	29487	173/50 E	583392	661571	Migmatit
	1.132a	29823		583392	661571	Metabasit
	1.132b	29911		583392	661571	Metapelit
	1.132c	29824, 29825		583392	661571	Metagabbro
	17,225		163/18E	592730	656652	Kataklasit
	0211/164	v		595045	2620252	nalit miamatit mit raatit
Ermunio	0411/104	~ ~		585915	2030252	
	0411/100	~		580519	2023032	
	0411/107	~ ~		587051	2024040	knotenschiefer
	0411/108	X		587244	2024771	knotenschiefer
	0511/170	X		586737	2020070	serizitschiefer
	0711/1/38	X		585244	2027889	migatit mit sill porpri.
	0711/1/30	X		500400	0007500	wie a, mit granat
	0711/1/4	X		586186	2627529	migatit mit sill porpn.
	0911/175	X		584390	2617580	
	0911/1/6	X		584887	2618545	metapelit, umxx. and-porph.
	0911/1//	X		585210	2618985	metapelit, migmatit?
	0911/178	X		586205	2619793	retrograder glimmersf.
	0911/179a	Х		585638	2619892	pelit. migmatit
	0911/179b	Х				diatexit m. hbl
	1011/180a	Х		585632	2632663	migatit mit crd
	1011/180b	х				migatit mit crd
	1011/181a	х		585862	2633979	migatit mit crd
	1011/181b	Х				migatit mit crd
	1611/186	Х		591360	2634063	restit (pelit)
	1711/188	Х		591077	2636046	metapelit
	1711/189	Х		591412	2636395	restit (pelit, 2 st.)
	2011/193	Х		588818	2629927	migmatit
	2011/194	х		589034	2629829	diatexit + grt
	2811/198	Х		587438	2632405	mylonit
	2811/199	Х		587285	2632362	migmatit
Deee	1011/100	Y		040405	0500004	
DOCA	1911/190	л У		018495	2000091	
	1911/191	X		61/3/4	258/142	Grt-Tunrenden Migmatit
	1911/192	Х		616757	2587154	unreiner Marmor

Lebenslauf

Persönliche Angaben

Name	Andreas Schürzinger
Geburtsdatum	10. 06. 1969
Geburtsort	Griesbach
Eltern	Erika Schürzinger, Norbert Schürzinger

Ausbildung, Berufstätigkeit

1979 – 1988	Rupprecht-Gymnasium, München, Abschluss: Abitur
10/1988 - 12/1989	Wehrdienst
11/1989 - 10/1990	Studium der Musikwissenschaften, Ludwig-Maximilians-Universität, München
11/1990 - 06/1996	Studium der Geologie, LMU München, Abschluss: Diplom-Geologe
09/1996 - 03/1999	Wissenschaftlicher Mitarbeiter (mit kurzen Unterbrechungen), Institut für Mineralogie, Petrologie und Gemochemie, LMU München
04/1999 - 10/2000	Programmierer, APSIS AG, München
seit 11/2000	Software Berater, CAST GmbH, Frankfurt am Main / München