



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS DE LA TIERRA
PROGRAMA DE ACTIVIDAD ACADÉMICA



Nombre de la Asignatura: **Modelación geoquímica de fluidos hidrotermales**

Clave:	Semestre (s):	Campo de Conocimiento: I Geofísica de la Tierra Sólida () II Exploración, Aguas Subterráneas, Modelación y Percepción Remota (X) III Geología () IV Ciencias Ambientales y Riesgos () V Ciencias Atmosféricas, Espaciales y Planetarias. ()	No. Créditos: 8	
Carácter:	Horas		Horas por semana	Horas al semestre
Tipo: Teórico-Práctica	Teoría: 2	Práctica: 2	4	68
Modalidad: Curso	Duración del programa: Semestral			

Seriación: Sin seriación (**X**) Obligatoria () Indicativa ()

Actividad académica antecedente: El estudiante debe tener conocimientos de termodinámica, geoquímica de fluidos, estadística y conocimientos básicos de programación.

Actividad académica subsecuente:

OBJETIVO GENERAL: El objetivo del curso es que el estudiante obtenga las herramientas necesarias para desarrollar y proponer modelos geoquímico-numéricos en la solución de problemas que incluyan la interacción agua-roca. En el curso se propone el uso y manejo del software libre PHREEQC para realizar ejercicios de práctica en laboratorio de cómputo. Con lo anterior el estudiante será capaz de operar software especializado en modelación geoquímica.

Índice Temático

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción a modelado geoquímico	6	
2	El programa PHREEQC	8	8
3	Preparación y construcción de modelos geoquímicos	8	8
4	Modelado geoquímico en la solución de problemas	8	8
5	Aplicaciones	7	7
Total de horas:		37	31
Suma total de horas:		68	

Contenido Temático

Unidad	Temas y Subtemas
1	1. Introducción a modelado geoquímico 1.1. Conceptos generales 1.1.1. Definición de modelo geoquímico 1.1.2. Tipos de modelos geoquímicos 1.1.3. Algoritmos geoquímicos 1.2. Fundamentos termodinámicos 1.2.1. Reacciones en equilibrio 1.2.2. Cinética química 1.2.3. Reacciones de transporte reactivo

	<ul style="list-style-type: none"> 1.3. Geoquimiometría en modelación geoquímica <ul style="list-style-type: none"> 1.3.1. Calidad de datos iniciales 1.3.2. Fuentes de error en modelado geoquímico 1.4. Programas de Modelación Hidrogeoquímica comerciales
2	<ul style="list-style-type: none"> 2. El programa PHREEQC <ul style="list-style-type: none"> 2.1. Estructura de PHREEQC para Windows <ul style="list-style-type: none"> 2.1.1. Entrada 2.1.2. Bases de datos termodinámicos 2.1.3. Salida 2.1.4. Mallado 2.1.5. Graficado 2.2. Introducción a modelado geoquímico con PHREEQC <ul style="list-style-type: none"> 2.2.1. Reacciones en equilibrio 2.2.2. Cinética química 2.2.3. Transporte de masa reactiva 2.3. Modelación de procesos con PHREEQC <ul style="list-style-type: none"> 2.3.1. Especiación 2.3.2. Mezcla de fluidos 2.3.3. Reacciones redox 2.3.4. Intercambio iónico 2.3.5. Trayectoria de reacción
3	<ul style="list-style-type: none"> 3. Preparación y construcción de modelos geoquímicos <ul style="list-style-type: none"> 3.1. Datos requeridos para el desarrollo de modelos <ul style="list-style-type: none"> 3.1.1. Análisis químico de agua y balance de cargas 3.1.2. Análisis geoquimiométrico de los datos 3.1.3. Propagación de errores 3.2. Selección de bases de datos termodinámicas <ul style="list-style-type: none"> 3.2.1. Modelo Debye-Hückel 3.2.2. Modelo B-dot 3.2.3. Modelo Davies 3.3. Modelación con PHREEQC <ul style="list-style-type: none"> 3.3.1. Conceptualización del modelo 3.3.2. Escritura del algoritmo geoquímico 3.3.3. Preparación de gráficas 3.4. Interpretación de resultados
4	<ul style="list-style-type: none"> 4. Modelado geoquímico en la solución de problemas usando PHREEQC <ul style="list-style-type: none"> 4.1. Sistema Litosfera-agua subterránea <ul style="list-style-type: none"> 4.1.1. Especiación del agua proveniente de un pozo 4.1.2. Reacción de equilibrio en la solubilidad de gypsum 4.1.3. Precipitación de calcita y disolución de dolomita 4.2. Sistema Atmósfera-agua subterránea-Litosfera <ul style="list-style-type: none"> 4.2.1. Precipitación bajo la influencia del CO₂ de suelo 4.2.2. Precipitación de minerales en manantiales calientes sulfurados 4.2.3. Sistemas buffer en suelo 4.2.4. Evaporación 4.3. Sistema Agua subterránea <ul style="list-style-type: none"> 4.3.1. Diagrama pE-pH para Fe 4.3.2. Dependencia de pH con especies uranio 4.3.3. Modelos de interacción agua-roca 4.3.4. Agua de mar 4.4. Cinética química <ul style="list-style-type: none"> 4.4.1. Disolución de cuarzo y feldespato 4.4.2. Intemperismo químico
5	<ul style="list-style-type: none"> 5. Aplicación en la geotermia <ul style="list-style-type: none"> 5.1. Geotermometría 5.2. Equilibrio fluido-mineral

Bibliografía Básica

Bundschuh J., and Zilberbrand Z. (2012). Geochemical modeling of groundwater, vadose, and geothermal systems. Leiden, The Netherlands CRC Press/Balkema, 305 p.

Bethke C.M. (2008). Geochemical and biochemical reaction modeling, Second edition, Cambridge University Press, 543 p.

Merkel B.J, Planer-Friedrich B. (2005). Groundwater chemistry a practical guide to modeling of natural and contaminated aquatic system, Edited by Darrell Kirk Nordstrom, Springer, 200 p.

Bibliografía Complementaria**Sugerencias didácticas:**

Exposición oral

(x)

Exposición audiovisual

()

Ejercicios dentro de clase

(x)

Ejercicios fuera del aula

(x)

Seminarios

(x)

Lecturas obligatorias

(x)

Trabajo de investigación

(x)

Prácticas de taller o laboratorio

(x)

Prácticas de campo

()

Otros

Mecanismos de evaluación de aprendizaje de los alumnos:

Exámenes Parciales

(x)

Examen final escrito

(x)

Trabajo y tareas fuera del aula

(x)

Exposición de seminarios por los alumnos

(x)

Participación en clase

(x)

Asistencia

(x)

Seminario

(x)

Otras:

Línea de investigación:

Exploración, Agua subterránea, Modelación, Ciencias Ambientales, Geoterminia