

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ FERHAT ABBAS-SÉTIF (ALGÉRIE)

THÈSE

Présentée à la Faculté des Sciences

Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Option: Sismologie

**Etude des propriétés structurales, élastiques et sismiques des composants
FeO, MgO et $(\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x})\text{O}$ en utilisant le modèle PREM**

TLILI SALAH

Soutenue publiquement le: 06/12/2018

Devant la commission d'examen:

MAOUCHE DJAMAL	Président	Professeur à UFA Sétif
LAYACHI LOUAIL	Directeur de thèse	Professeur à UFA Sétif
BENMABROUK LAZHAR	Examineur	Maître de conférences UKM Ouargla
MOHAMMEDI LAZHAR	Examineur	Maître de conférences UKM Ouargla
BOUGUERA ABDALLAH	Invité	Maître assistant U B I Bordj Bou Arreridj

Dédicaces

Avant tout, louange à ALLAH le tout puissant que sans sa bénédiction et sa grâce, on ne saura réussir et arriver à nos fins

A cœur vaillant rien d'impossible

A conscience tranquille tout est accessible

Quand il y a la soif d'apprendre

Tout vient à point à qui sait attendre

Quand il y a le souci de réaliser un dessein

Tout devient facile pour arriver à nos fins

Malgré les obstacles qui s'opposent

En dépit des difficultés qui s'interposent

Les études sont avant tout

Notre unique et seul atout

Ils représentent la lumière de notre existence

L'étoile brillante de notre réjouissance

Comme un vol de gerfauts hors du charnier natal

Nous partons ivres d'un rêve héroïque et brutal

Espérant des lendemains épiques

Un avenir glorieux et magique

Souhaitant que le fruit de nos efforts fournis

Jour et nuit, nous mène ra vers le bonheur

fleuri Aujourd'hui, ici rassemblés auprès des

jurys, Nous prions dieu que cette soutenance

Fera signe de persévérance

Et que nous serions enchantés

Par notre travail honoré



Je dédie cette thèse à ...



La plus belle créature que Dieu a créée sur terre,

Cette source de tendresse, de patience et de générosité,

La perle de ma vie ma mère !

Le grand monsieur

Cette source de sûreté, de soutien et de sévérité

Mon père

L'élégante dame, mon âme sœur et la lumière de mon chemin

Ma chère femme

Le grand amour, la joie de ma vie et mes petits anges

Mes très chers fils Oussama, Houssam et Adam

*Mes chers frères, mes chères sœurs et tous leurs enfants que je
ne pourrais citer chacun par son nom.*

*Que tous trouvent ici l'expression de ma franche et profonde
reconnaissance !*

Remerciements

Ce travail modeste est le fruit des efforts, de fatigue et d'insomnie à travers des longues nuits chargées de pression, de recherche, d'étude, de sélection et de collecte des informations et de références.

Cette recherche est le résultat de diligence et de persévérance; c'est l'aboutissement d'un long cheminement au cours duquel j'ai bénéficié de l'encadrement, des encouragements et du soutien de plusieurs personnes, à qui je tiens à leur exprimer toute ma gratitude.

Ainsi, Je tiens à remercier tout d'abord mon directeur de thèse, le professeur LOUAIL Layachi, ce grand monsieur avec qui j'ai eu l'honneur et le privilège de travailler et d'apprécier ses qualités scientifiques et surtout humaines, ses valeurs, son sérieux, sa compétence et son sens de devoir qui m'a énormément marqué. Je le remercie pour sa patience et surtout pour sa confiance, ses remarques et ses conseils, sa disponibilité et sa bienveillance non seulement pour l'accomplissement de ce travail mais aussi depuis mon mémoire de magister et ce travail n'est qu'une occasion pour moi de vous témoigner monsieur ma profonde gratitude.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Monsieur MAOUCHE Djamel professeur de l'université Ferhat Abbas Sétif 1 qui a bien voulu me faire l'honneur de présider le jury d'examen de ma thèse malgré ses obligations et responsabilités.

Je remercie Monsieur BENMABROUK Lazhar et Monsieur MOHAMMEDI Lazhar maîtres de conférence A à l'université Kasdi Merbah Ouargla qui m'ont honoré en acceptant avec grande sympathie de siéger parmi le jury de thèse et l'effort de se déplacer pour une aussi longue distance et qu'ils trouvent ici toute ma gratitude.

Aussi, je tiens à exprimer un grand estime et considération à Monsieur BOUGUERA Abdellah maître assistant à l'université Bachir El Ibrahimi BBA qui a bien accepté de m'honorer par sa présence comme invité à cette soutenance.

Je lui exprime ma reconnaissance pour tous ses conseils et ses compétences, pour m'avoir communiqué sa passion pour la recherche scientifique et surtout pour son aide précieuse à l'accomplissement de cette thèse.

Je voudrais aussi remercier tout le staff administratif et enseignant du département Physique de l'Université de Ferhat Abbas Sétif 1 spécialement le chef de département et son adjoint chargé de la graduation pour leur amabilité et leur précieuse coopération.

Je tiens à remercier également la secrétaire du chef de département.

Mes sincères remerciements pour mes chers collègues que je ne peux trouver les mots justes pour vous exprimer mon affection et mes pensées, vous êtes pour moi des frères, sœurs et des amis sur qui je peux compter.

Mes chers collègues de spécialité et en témoignage de l'amitié qui nous uni et des souvenirs de tous les moments que nous avons passé ensemble, pour votre soutien, encouragements et gentillesse, je vous dédie ce travail et je vous souhaite une vie pleine de santé et de bonheur et je vous exprime mes sincères sentiments et considération.

Je remercie également M. CHAREF Badreddine pour ses efforts fournis, son aide et sa disponibilité en traduction, malgré ses occupations.

Je remercie aussi mon frère et mon compagnon de trajet et de route BELAABADI Ali pour son soutien et son encouragement pendant tous les voyages qu'on a fait ensemble malgré l'éloignement des distances et la chaleur ardente.

A Monsieur GUETTOUCHE Salim, Ingénieur Principal du CRAAG Constantine et doctorant à l'université Frères Mentouri Constantine, que je remercie énormément pour son aide précieuse dans la rédaction et la correction du manuscrit de la présente thèse et ses précieux conseils.

Enfin, je remercie tous ceux qui m'ont soutenu même avec un mot d'encouragement et ont contribué de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail car sans la réussite accordée par ALLAH et votre contribution, il n'aurait pu voir le jour.

T *able de Matières*

	Page
Table de Matières	i
Liste de figures	iv
Liste de tableaux	x
Introduction générale	1

Chapitre I

Sismologie globale et ensemble FeO, MgO

Introduction	4
I-1 Sismologie globale	4
I-1-1 La méthode INVERSE	5
I-1-1-1 Différentes types d'ondes sismiques	5
I-1-1-2 Modèle PREM	7
I-1-2 La méthode DIRECTE	10
I-2 Rappels sur l'élasticité et la propagation des ondes	11
I-2-1 Vitesses des ondes sismiques	11
I-2-2 Détermination de la densité (ρ)	11
I-2-3 L'étude de l'enthalpie de formation (H)	12
I-2-4 Détermination des constantes élastiques (c_{ij})	12
I-2-5 Détermination du module d'incompressibilité (K ou B)	13
I-2-6 Détermination du module de cisaillement (G)	14
I-2-7 Détermination des paramètres de compositions	16

Chapitre II

Etat d'art

Introduction	18
II-1 La wüstite (FeO)	18
II-1-1 Propriétés générales de la wüstite (FeO)	18

II-1-2 Structures cristallines de la wüstite (FeO)	19
II-1-3 Travaux sur de la wüstite (FeO)	21
II-2 Le périclase (MgO)	24
II-2-1 Propriétés générales du périclase (MgO)	24
II-2-2 Structures cristallines du périclase (MgO)	24
II-2-3 Travaux sur le périclase (MgO)	25
II-3 Composants magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$)	28
II-3-1 Propriétés générales des composants magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$)	28
II-3-2 Structures cristallines des composants magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$)	29
II-3-3 Travaux sur magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$)	30

Chapitre III

Contribution à l'étude des propriétés structurales et élastiques de la wüstite jusqu'à 140 GPa par méthode de calcul pseudopotentielle

Introduction	36
III-1 Méthode de calcul	37
III-2 Résultats	38
III-2-1 La transition de phase	38
III-2-2 Propriétés structurales	39
III-2-3 Propriétés élastiques	42
III-2-4 Vitesses d'onde isotrope	46
III-3 Conclusion	48

Chapitre IV

Modélisation de la variation des propriétés du MgO et FeO

Introduction	51
IV-1 La recherche d'un modèle de variation de propriétés étudiées	51
IV-1-1 Reclassification de propriétés étudiées	51
IV-1-2 Méthodes mathématiques utilisées dans la recherche du modèle	53
IV-2 Etude des résultats et détermination du meilleur modèle	54
IV-3 La comparaison entre la méthode préférée et la méthode utilisée dans la comparaison indirecte	73

Chapitre V

Etude comparative des propriétés structurales, élastiques et sismiques du FeO, MgO et les composants (Mg(1-x),Fex)O aux pressions correspondantes au modèle PREM

Introduction	75
V-1 Comparaison des propriétés structurales	76
V-1-1 Comparaison du taux volumique	76
V-1-2 Comparaison de la densité	78
V-2 Comparaison des modules élastiques	80
V-3-1 Comparaison du module d'incompressibilité	80
V-3-2 Comparaison du module de cisaillement	83
V-3 Comparaison des vitesses sismiques	86
V-3-1 Comparaison de la vitesse longitudinale	86
V-3-2 Comparaison de la vitesse de cisaillement	89
V-3-3 Comparaison de la vitesse d'hydrodynamique	92

Chapitre VI

Comparaison à d'autres études

Introduction	95
VI-1 La comparaison aux travaux composant FeO	96
VI-2 La comparaison aux travaux composant MgO	101
VI-3 La comparaison aux travaux composant magnésio-wüstite	106

Conclusion	118
Bibliographies	124
Annexes	134
Annexe A	135
Annexe B	136
Annexe C	138

***L**iste de figures*

	Page
Figure (I-1): Mouvement des particules lors d'un passage d'une onde P et d'une onde S (modifié d'après Shearer, 2009 ^[24]).	6
Figure (I-2): Mouvement des particules lors d'un passage d'une onde Love (a) et d'une onde Rayleigh (b) (D'après Bolt, 1976 ^[24]).	7
Figure (I-3): Modèle PREM en fonction de la profondeur et les couches terrestres correspondantes ^[29] .	8
Figure (I-4): L'intérieur de la Terre vu par un géophysicien, en termes de géométrie, pression et température, état physique, et composition ^[30] .	8
Figure (II-1): représente les structures cristallines possible de FeO et MgO, les grandes billes rouges foncées sont les atomes de Fer ou de Magnésium et les autres billes sont les atomes d'oxygène; a-Structure cubiques, la phase B1, Sel de Table ou type NaCl. b-Structure cubiques, la phase B2 ou type CsCl pour MgO. c-Structure hexagonale, la phase B8 type NiAs pour FeO. d-Structure Rhomboédrique ou la phase R pour FeO. e-Structure Monoclinique pour FeO.	20
Figure (II-2): Les transformations de phase de la Magnésio-wüstite ou Ferropériclase.	29
Figure (III-1): La différence d'enthalpie en fonction de la pression hydrostatique pour le FeO en utilisant l'enthalpie de la phase B1 comme référence.	39
Figure (III-2): Volume relatif en fonction de la pression hydrostatique dans les phases B1 et B2 de FeO.	40
Figure (III-3): La densité en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 de FeO obtenue par le présent travail, le modèle PREM et l'étude de Brown et Shankland ^[63] .	41
Figure (III-4): Les constants élastiques de rigidité en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 du FeO.	43
Figure (III-5): Les modules de cisaillement et de compression en fonction de la pression obtenues dans le présent travail et ceux donnés par le modèle PREM pour les phases B1 et B2 du FeO.	44

Figure (III-6): Les vitesses V_P , V_S et V_B en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 du FeO obtenues dans le présent travail et Brown et Shankland.	47
Figure (III-7): La vitesse des ondes V_P , V_S et V_B en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 du FeO obtenues dans le présent travail et données par le modèle PREM.	48
Figure (IV-1): représentation des résultats des dix modèles proposés concernant $A-V/V_0$ de FeO et $B-a/a_0$ de MgO en fonction de la pression.	56
Figure (IV-2): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les densités en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	57
Figure (IV-3): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les modules d'incompressibilité K en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	58
Figure (IV-4): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les modules de cisaillement G en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	59
Figure (IV-5): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses longitudinales V_p en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	60
Figure (IV-6): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses transversales V_s en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	61
Figure (IV-7): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses hydrodynamiques V_f en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	62
Figure (IV-8): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constantes élastiques longitudinal c_{11} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	63
Figure (IV-9): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constantes élastiques au loin-diagonal c_{12} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	64
Figure (IV-10): représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constants élastiques de cisaillements c_{44} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.	65
Figure (IV-11): représentation des résultats des dix modèles proposés concernant le FeO et pour les constantes élastiques: (A) longitudinal c_{33} , (B) au loin-diagonal c_{13} (C) cisaillement c_{66} en fonction de la pression.	66
Figure (V-1): Variation du taux V/V_0 en fonction de la pression pour FeO, MgO et les composants de $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$. Les valeurs de la pression sont celles indiquées dans le modèle PREM.	77
Figure (V-2): représente les variations de densité en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ et en modèle PREM.	79

Figure (V-3): Variations de d'incompressibilité K en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et de modèle PREM.	82
Figure (V-4): Variations du module de cisaillement G en fonction de la pression (valeurs du modèle PREM) pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et le modèle PREM.	85
Figure (V-5): représente les variations de vitesses longitudinale V_p en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et en modèle PREM.	88
Figure (V-6): représente les variations de vitesses transversale V_s en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et en modèle PREM.	91
Figure (V-7): représente les variations de vitesses hydrodynamiques V_f en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et en modèle PREM.	94
Figure (VI-1): Représente le changement des vitesses d'onde (A) et de la densité (B) en fonction de la pression de l'oxyde de Fer dans notre étude (a) [18] et l'étude de Brown et Shankland (b) [63].	96
Figure (VI-2): représente le changement de la densité en fonction de la pression de l'oxyde de Fer issu; de l'étude de Jeanloz and Ahrens 1980 [62] (a), T. Yagi et al 1988 (b) [70], par calcul Hugoniot (c) et notre étude (d).	97
Figure (VI-3): représente le changement de la densité (B) en fonction de la pression de la phase B8 de l'oxyde de Fer issu; de Hugoniot data (a) et (e), de l'étude de Y. Fei et H. Mao 1994(b) [73], de l'étude par "shock compression" (c), de l'étude par la maximum filtration de statique compression data à 900 K(d) et notre étude (f).	97
Figure (VI-4): représente (A) le changement du taux volumique en fonction de la pression de l'oxyde de Fer issu de l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 [76]; (a) pour $K_0=180$ GPa, (b) pour $K_0=150$ GPa(c) notre étude. (B) Module d'incompressibilité K en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants Magnésioiwüstite (a) tiré de l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 (b) notre étude.	98
Figure (VI-5): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les deux phases de l'oxyde de Fer tirée de l'étude de M. Murakami et al 2004 [76] et notre étude (b).	99
Figure (VI-6): représente (A) le changement du taux volumique dans la phase B1en fonction de la pression de l'oxyde de Fer tiré de l'étude de R. A. Fischer et al 2011 [83]; (a) T=1000-1500 K, (b) T=1500-2000 K, (c) T=500-1000 K, (d) T=2000-2500 K (e) notre étude. (B) Dans la phase B8 tiré de l'étude de R. A. Fischer et al 2011; (a) à T=1000-1500 K, (b) à T=500-1000 K, (c) à T=1500-2000 K, (d) à T=2000-2500 K, (e) à T=2500-3000 K (f) notre étude; (C) variation de la densité avec la pression (a) Fischer et al, 2011(b) notre étude.	100

Figure (VI-7): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression du MgO et la phase B1 pour FeO issu de l'étude de M. Liu et L. Liu 1987 [88] (a), (b) et notre étude (c).	101
Figure (VI-8): représente(A) isothermes du changement du taux volumique en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de A. Yoneda 1990 à 300K [91]; (a) et (b) première et deuxième approximation calculées à partir de the shock-EOS pour, (c) et (d) première et deuxième approximation calculée par l'utilisation de l'équation d'état de Birch-Murnaghan EOS, (e) résultats de compression statique sur DAC de l'étude de Mao and Bell, 1979; (f) notre étude.(B) le module d'incompressibilité K en fonction de la pression (a1) et (a2) première et deuxième approximation issues de l'étude de Yoneda 1990,(f) notre étude.	102
Figure (VI-9): représente le changement des deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de (a) L. Stixrude 1998 [03] (b) notre étude.	102
Figure (VI-10): représente le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 1999 [94]; (a) données expérimentales de Sinogeikin et Bass, 1999, (b) meilleur fitting des points par Sionogeikin et Bass, 1999,(c) extrapolation des données de A. Yoneda 1990 [62] (d) notre étude.	103
Figure (VI-11): représente (A) le changement de la densité, (B) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s (C) en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium (a) issu de l'étude de T. S. Duffy et D. L. Anderson 1989,(b) B. B. Karki et al 1999 [95]; à T=2000 K, (c) à T=1000 K, (d) à T=300 K, (e) à T=3000 K (f) notre étude.	104
Figure (VI-12): représente(A)le changement des deux vitesses d'onde longitudinale V_p (B) transversale V_s en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 2000 [97]; (a) obtenues par "finite strain fits" selon les auteurs, (b) données expérimentales des auteurs, (c)données à partir de la compression non hydrostatique des mêmes auteurs (d) notre étude.	105
Figure (VI-13): représente (A) le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (B) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la pression pour l'Oxyde de Magnésium (a) issu de l'étude de A. Hachemi et al 2009[101] (b) notre étude.	106
Figure (VI-14): représente (A) le changement de la densité en fonction de la fraction molaire de FeO présente dans le composant magnésiowüstite (a) l'étude de I. Jackson et al 1978 [102]; (b) les mesures par rayons X par les auteurs, (c) notre étude. (B) Le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (a) l'étude de	107

Spetzler, 1970 pour MgO et Mizutani et al, 1972 pour FeO, (b)valeurs pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (c)courbe pour quatre composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (d) courbe pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs (e) de Rosenhauer et al 1976, (f) notre étude (g) la courbe issue de l'utilisation des bornes de Hashin-Shtrikman. (C) et (D) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s (a)pour des résultats de l'étude de Spetzler 1970 pour MgO et Mizutani et al 1972 al pour FeO selon Jackson et al 1978;(b) pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (c) courbe de ces composants selon les auteurs (d) notre étude.

Figure (VI-15): représente (A) le changement de la densité, (B) du module d'incompressibilité K et de cisaillement G, (C) et (D) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la fraction molaire en présence du Fer dans les composants magnésioiwüstite, (a) issu de l'étude de L. J. Bonczar et E. K. Graham 1982 [103] (b) notre étude. 108

Figure (VI-16): représente le changement de la densité et en fonction de la pression pour le composant magnésioiwüstite pour; $x=40$ (a, b, c, d, e et f) valeurs issues de l'étude de A. M. S. Vassiliou et Thomas J. Ahrens 1982[104] (g) notre étude. 109

Figure (VI-17): représente le changement du module d'incompressibilité en fonction de la fraction molaire en présence du fer dans les composants magnésioiwüstite(a) issus de l'étude de Jeanloz and Thompson 1983, (b) Bonczar and Graham 1982, (c) Jackson et al 1978, (d) Rosenbauer et al 1976,(e) les déviations de l'idéalité suggérées par R. M. Hazen et R. Jeanloz 1984[66] (f) notre étude. 110

Figure (VI-18): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésioiwüstite pour $x=60$ et $x=80$ (a) issu de l'étude de P. Richet et al 1989[105] (b) notre étude. 110

Figure (VI-19): représente le changement (A) de la densité en fonction de la pression pour les composants magnésioiwüstite $x=1$, $x=20$, $x=40$, $x=60$ et $x=80$, (B) la vitesse d'onde longitudinale V_p (C) transversale V_s (D) la vitesse hydrodynamique en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants magnésioiwüstite à la pression; 0, 23.8, 25, 28.3, 47.8, 50, 51.2 et 135.8 GPa respectivement ;(a) issu de l'étude de J. Hama et K. Suito 1999[106] (b) notre étude. 112

Figure (VI-20): représente (A) le changement du taux volumique suivant la pression du MgO; (B) et (C) le changement, du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (a) issu de l'étude de Chorpelas 1996, (b) Duffy et Ahrens 1995,(c) A. Yoneda 1990 [91], (d) J. Hama et K. Suito 1999, (e) Isaak et al 1990 (f) notre étude, (D) le changement des vitesses d'onde longitudinale V_p (E) transversale V_s (F) la vitesse d'onde hydrodynamique(a)issu de l'étude de Chorpelas 1996, (b) J. Hama et K. Suito 1999 (c) notre étude. 113

- Figure (VI-21):** représente (A, B et C) le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=1$, $x=27$, $x=54$, $x=54.1$, $x=55$, $x=72$, $x=99$, (D) de la densité, (E) du module d'incompressibilité K (F) du module de cisaillement G en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants magnésio-wüstite (a) issu de l'étude de S. D. Jacobsen et al 2002 [111] (b) notre étude. 114
- Figure (VI-22):** représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=1$, $x=27$, $x=93$ ((C) pour la phase cubique, (R) pour la phase Rhomboédrique) et $x=99$ (a) issu de l'étude de S. D. Jacobsen et al 2005 [112] (b) notre étude. 115
- Figure (VI-23):** représente (A) le changement du taux volumique, (B) du module d'incompressibilité K (C) la vitesse d'onde hydrodynamique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=1$, $x=17$ et $x=99$ (a) issu de l'étude de J. Lin et al 2005[11] (b) notre étude. 116
- Figure (VI-24):** représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=1$, $x=17$, $x=20$ et $x=99$ (a) issu de l'étude de S. Speziale et al 2007[115] (b) notre étude. 117

Liste de tableaux

	Page
Tableau (I-1): Structure interne de la terre ^[28] .	9
Tableau (II-1): les propriétés structurales possibles de FeO et MgO, et les conditions thermodynamiques correspondantes.	19
Tableau (II-2): résumé pour les importantes valeurs des paramètres des propriétés étudiées pour l'Oxyde de Fer ou FeO en particulier à la pression 0 GPa.	21
Tableau (II-3): présente un résumé pour les importantes valeurs des paramètres des propriétés étudiés pour l'Oxyde de Magnésium ou MgO en particulier à la pression 0 GPa.	28
Tableau (III-1): La dérivée P/R à la pression calculées pour les constantes élastiques du FeO et son existence au niveau du manteau inférieur à cette échelle donnée par Karki et al. ^[48] .	44
Tableau (III-2): La dérivée P/R à la pression calculée pour la densité et les modules élastiques du FeO comparée avec celle donnée par le modèle PREM au manteau inférieur Dziewonski et Anderson ^[07] .	46
Tableau (IV-1): Valeurs des paramètres correspondant aux pressions manquantes dans les deux études déterminées par interpolation linéaire.	52
Tableau (IV-2): Valeurs des constantes élastiques correspondant aux pressions manquantes dans les deux études calculées par interpolation linéaire	52
Tableau (IV-3): Tableau (IV-3): Valeurs des nombres des points identiques et non-identiques pour P P (paramètres principales; V/V0, cij et K) et P C (paramètres complémentaires; densité, G, VP, VS et Vf) des deux phases de FeO et MgO des résultats de dix modèles de calcul.	55

Introduction générale

La connaissance de la structure interne terrestre continue à constituer un grand défi pour la communauté scientifique malgré les avancées remarquables dans le développement des techniques théoriques et expérimentales dans le domaine de la géophysique et la sismologie. Les modèles de structure sont tirés principalement des observations sismologiques qui sont riches en informations concernant la structure, la composition, l'état thermodynamique et la dynamique régnant à l'intérieur de la terre, mais il s'est avéré être difficile à les interpréter avec exactitude. Les difficultés rencontrées sont dues au fait que le comportement et les caractéristiques des minéraux constituant l'intérieur de la terre restent inconnues dans les conditions régnantes, alors qu'ils sont connus seulement dans les conditions ambiantes^[01,02]. Cette ambiguïté n'a pas permis d'arriver à un consensus autour de la composition du manteau inférieur^[03-06]. Dans le manteau inférieur et selon le modèle PREM (Preliminary Reference Earth Model^[07]), la pression est de l'ordre de 135 GPa alors que la température à la limite supérieure est de l'ordre de 1600°C, évaluée entre 2449 et 3157 K^[01].

L'étude des effets de pression, de température et de composition sur la structure et la densité des alliages de minéraux est l'un des principaux objectifs de la physique minérale^[08]. Le suivi et l'investigation de ces constituants sont un grand apport dans la compréhension de l'évolution du globe terrestre et la dynamique qui y règne. La plupart des études géochimiques et pétro-physiques suggèrent que le manteau inférieur est composé essentiellement de silicates et oxydes de composants purs (ex: [09], [10]) où le fer est le métal le plus répandu qui joue un rôle important dans les processus géochimiques et géodynamique de l'intérieur de la terre^[11].

Le suivi des différentes phases des oxydes de fer et de Magnésium et l'ensemble magnésio-wüstite dans les différentes conditions est un thème de recherche d'actualité afin de faire une analogie avec la matière terrestre. L'oxydo-réduction, la dismutation et la métallisation de la wüstite sont au centre de la compréhension de la formation du noyau, de

l'interaction entre manteau-noyau et le processus de la solidification du noyau interne ^[12-16]. La détermination de la structure et les propriétés élastiques de chaque phase à des hautes pressions jusqu'aux conditions limites du noyau externe de la terre sont effectués par des approches expérimentales ou numériques.

Les études menées auparavant comme Karki et al, 1997 ^[17] n'ont pas pris le changement de phase des composants magnésio-wüstite d'une manière détaillée, alors que presque toutes les études étaient expérimentales à travers l'usage de hautes pressions, par exemple sur des cellules de diamants.

La problématique de la présente thèse consiste à étudier des propriétés structurales, élastiques et sismiques des composants FeO, MgO et $(\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x})\text{O}$ par approche numérique en utilisant le code CASTEP. La méthodologie adoptée dans ce travail est:

- La détermination de l'enthalpie de formation en fonction de la pression pour connaître les structures favorisées (les plus stables) et le changement de phase entre elles;
- La détermination des paramètres de la maille cristalline;
- La détermination des propriétés élastiques pour chaque pression;
- La détermination des propriétés sismologiques;

Cette thèse est organisée en six chapitres qui se résument comme suit:

Chapitre 1: Introductif, il sera consacré à l'aspect théorique lié au concept de sismologie globale et les méthodes utilisées ainsi que les définitions de base de la mécanique des solides permettant de calculer les modules élastiques et les vitesses des ondes sismiques. Il sera également présenté les différents types d'ondes sismiques générées après un séisme, leurs définitions ainsi que leur origine et les modèles de structures terrestres obtenus par analyse des ondes sismiques. Le modèle PREM sera aussi présenté d'une manière détaillée.

Chapitre 2: Dans ce chapitre les propriétés générales des composants seront présentés. Un état d'art sera présenté afin de passer en revue les différentes études travaux ayant abordé l'un ou l'ensemble des composants dans cette thèse. Cette recherche constituera une référence lors de la synthèse de nos résultats par la suite.

Chapitre 3: Ce chapitre est présenté d'une manière exhaustive, une étude sera présentée sur la détermination des propriétés structurales et élastiques de l'oxyde de fer dans les conditions de pression du manteau inférieur soit 140 GPa, ce qui est traduit par une publication scientifique dans la revue internationale « PHASE TRANSITIONS » en 2017

intitulée « *Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations* ».

Chapitre 4: Au sein duquel, le meilleur modèle décrivant les différentes propriétés des deux oxydes sera déterminé parmi plusieurs d'autres par interpolation mathématique en comparant statistiquement pour déduire les valeurs des paramètres à toutes les pressions absentes dans chacune des deux études (Karki et al, 1997 ^[17]; Tlili et al, 2017 ^[18]).

Chapitre 5: A partir du modèle choisi auparavant, les propriétés structurales et élastiques des deux oxydes seront déduites pour chaque valeur de pression du modèle PREM. L'application des relations de Hashin&Shtrikman permettra de déterminer les propriétés structurales et élastiques pour les composants de magnésio-wüstite à différentes teneurs du fer. Une comparaison entre les valeurs obtenues sera effectuée pour chaque composant.

Chapitre 6: Dans ce chapitre, Une étude comparative sera procédé entre nos résultats et ceux issus de la bibliographie.

Une conclusion générale: Après avoir fait une synthèse globale des résultats obtenus, une conclusion générale sera présentée portant ainsi que les perspectives ouvrant par ce travail.

C*hapitre I:*

Sismologie globale et les propriétés élastiques

Introduction:

Dans ce chapitre, on abordera les différents aspects théoriques liés au concept de la sismologie globale à travers sa définition ainsi que les différentes méthodes utilisées dans cette discipline et la présentation des différents types d'ondes sismiques et les modèles de structure proposés à partir de l'analyse de ces ondes de manière générale et le modèle PREM précisément. Sont présentés aussi, les différentes définitions et formules pour la détermination des différents paramètres utilisés dans la présente étude ainsi que quelques propriétés des composants objets de notre travail, en particulier les structures cristallines et les transitions de phase.

I-1 Sismologie globale:

La sismologie est la science qui étudie les tremblements de terre ou séismes et la manière dont ils affectent le globe terrestre de manière générale. Ces séismes génèrent des ondes élastiques se propageant dans toutes les directions affectant les structures qu'elles traversent provoquant des fissures ^[19].

La sismologie globale est une discipline de cette science telle que la sismogenèse, la sismotectonique ou la paléo-sismologie mais qui s'intéresse à la structure interne de la terre et sa composition à partir des données recueillies des séismes ^[20]. En sismologie globale, il existe deux approches: l'une dite **INVERSE** se basant sur le signal sismique et l'autre **DIRECTE** se basant sur les méthodes expérimentales ou la simulation numérique ^[21].

I-1-1 La méthode INVERSE:

Cette méthode se base sur l'analyse du spectre des ondes sismiques dégagées par le sismographe et arriver à reconstituer un modèle de structure terrestre. Les résultats de cette analyse proposent des profils de chaque couche selon des vitesses en fonction de la profondeur [22].

Mais présentons d'abord les différents types d'ondes sismiques générées par un séisme.

I-1-1-1 Différents types d'ondes sismiques

L'analyse des enregistrements sismiques ont permis de mettre en évidence l'existence de deux grands types d'onde [23]: les ondes de volume qui traversent la Terre et les ondes de surface qui se propagent à sa surface. L'observation de ces enregistrements nous permet de constater que ces ondes se succèdent ou se superposent et leur vitesse de propagation ainsi que leur amplitude sont sensibles à la nature des structures géologiques qu'elles traversent, c'est pourquoi, les signaux enregistrés sont la combinaison d'effets liés à la source, aux milieux traversés et aux instruments de mesure.

a- Les ondes de volume

Ces ondes se propagent à l'intérieur du globe à une vitesse dépendant du milieu traversé et qui augmente de manière générale avec la profondeur car le matériau traversé devient plus dense. Ce fût le sismologue Richard Dixon Oldham qui identifia les ondes P et S en 1906 en étudiant le séisme d'Assam en 1897 où il distingua dans ses sismogrammes deux types d'ondes ainsi qu'il mettra en évidence une zone d'ombre et en déduisit l'existence d'une structure distincte du manteau terrestre, à savoir le noyau liquide [24]. Ces ondes sont de deux types:

- **Les ondes P** dites aussi ondes primaires, ondes de compression ou ondes longitudinales. Le déplacement des particules du sol qui accompagne leur passage se fait par des dilatations et des compressions successives parallèlement à la direction de propagation de l'onde. Elles se propagent dans tous les milieux même à travers le noyau terrestre et elles sont les plus rapides par rapport aux autres ondes de surface. Elles sont donc les premières à être distinguées sur les sismogrammes.
- **Les ondes S** dites aussi ondes secondaires, ondes de cisaillement (shear waves d'où ondes S) ou ondes transversales. À leur passage, les mouvements du sol s'effectuent

perpendiculairement au sens de propagation de l'onde. Ces ondes ne se propagent pas dans les milieux liquides, elles sont en particulier arrêtées par le noyau externe de la Terre. Elles apparaissent en second sur les sismogrammes.

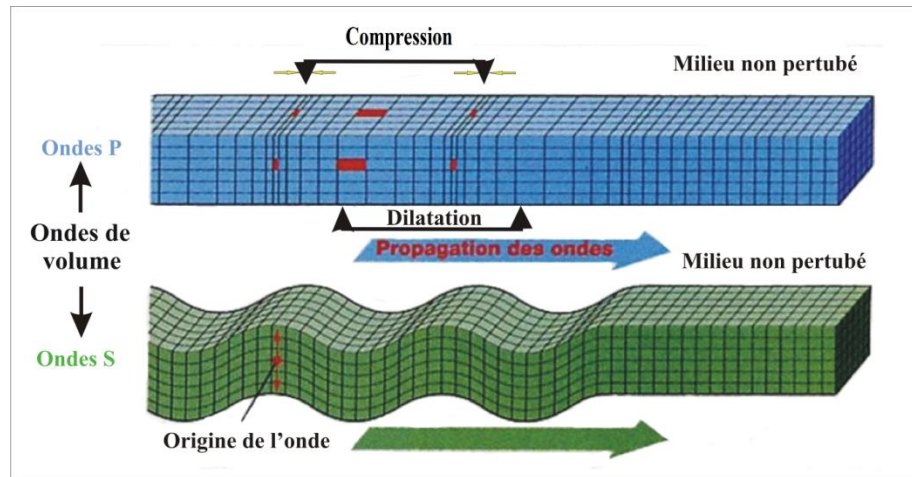


Figure (I-1): Mouvement des particules lors d'un passage d'une onde P et d'une onde S (modifié d'après Shearer, 2009 ^[24]).

b- Les ondes de surface

Ces ondes se propagent à la surface de la Terre. Elles ont un effet comparable aux rides formées à la surface d'un lac. Leur vitesse est inférieure à celle des ondes de volume mais leur amplitude est généralement plus forte, mais décroît rapidement avec la distance à la surface qui les guide. On distingue deux types d'ondes de surface ^[25]:

- L'onde de Love: c'est l'anglais Augustus Edward Hough Love qui découvrit son existence en 1911. Son déplacement est comparable à celui des ondes S sans le mouvement vertical. Les ondes de Love provoquent un ébranlement horizontal qui est la cause de nombreux dégâts aux fondations d'un édifice.
- L'onde de Rayleigh: elle a été découverte par John William Strutt Rayleigh en 1885. Son déplacement est complexe, assez semblable à celui d'une poussière portée par une vague, constituant un mouvement à la fois horizontal et vertical.

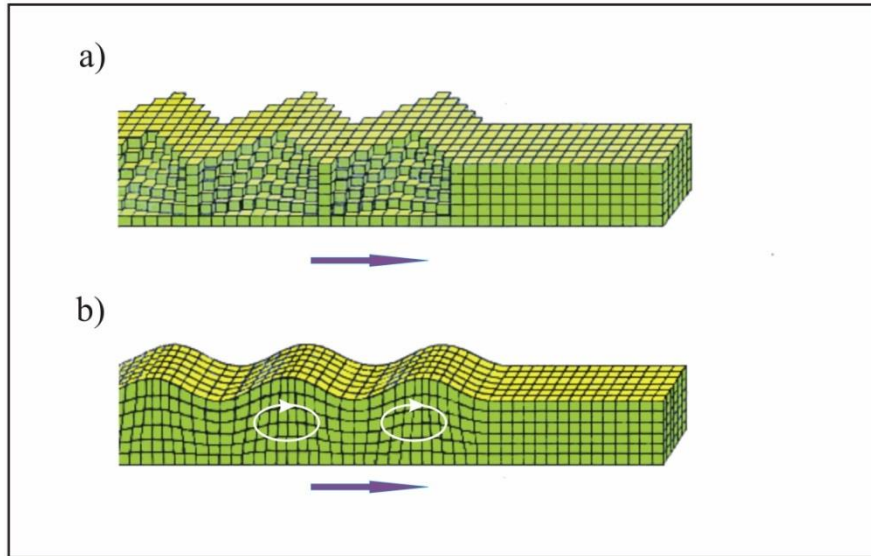


Figure (I-2): Mouvement des particules lors d'un passage d'une onde Love (a) et d'une onde Rayleigh (b) (D'après Bolt, 1976 ^[24]).

I-1-1-2 Modèle PREM:

Comme cité auparavant, l'analyse des enregistrements sismiques nous permet de dresser les rais sismiques ou hodochrones qui sont des courbes reportant le temps d'arrivée de chaque onde (connaissant l'épicentre d'un séisme et le moment où il s'est produit) en fonction de la distance épacentrale Δ . Par la méthode inverse on peut ensuite remonter des hodochrones aux profils de vitesse des ondes P et S et de densité en fonction de la profondeur et de relever les discontinuités traduisant le passage d'un milieu à un autre et d'en dégager un modèle car il faut signaler que celles-ci s'expliquent par une modification de composition chimique donc une modification des caractéristiques du milieu. Ainsi fut proposé le premier modèle de Jeffreys-Bullen (1939), il est déterminé par inversion des temps de parcours et distances angulaires ^[26]. Aujourd'hui il y a plusieurs autres modèles légèrement différents qui sont aussi utilisés comme IASP91 (1991) et AK135 (1995) ^[27]. Mais le modèle le plus utilisé est le modèle PREM (Preliminary Reference Earth Model, Dziewonski & Anderson 1981 ^[07]) car il donne une bonne approche de la structure et composition interne de la Terre supposée être en couches concentriques (voir annexe A pour les données utiles à la présente étude et la figure (I-3)). Ainsi, le globe terrestre est constitué comme suit ^[28]:

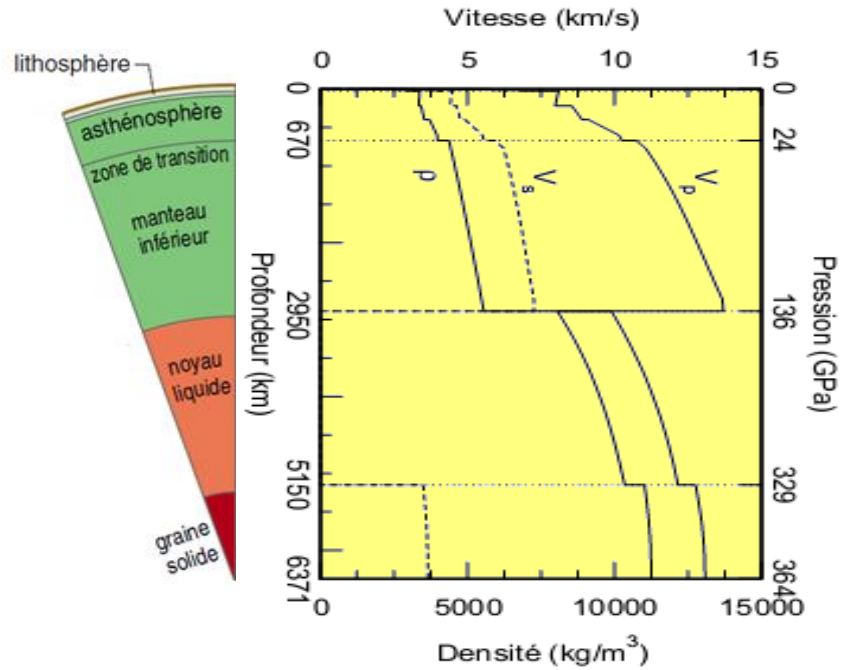


Figure (I-3): Modèle PREM en fonction de la profondeur et les couches terrestres correspondantes ^[29].

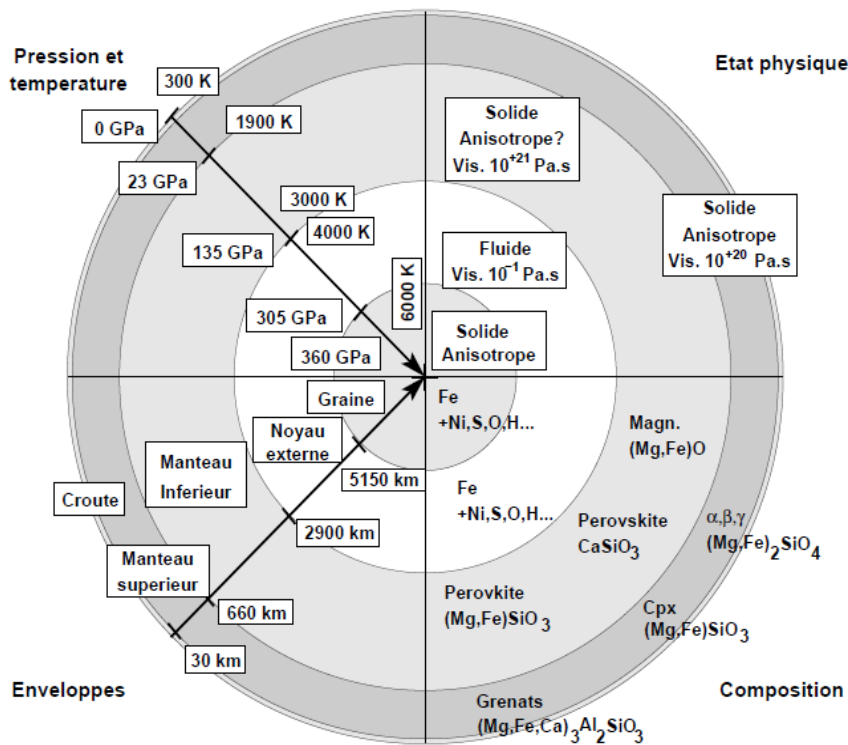


Figure (I-4): L'intérieur de la Terre vu par un géophysicien, en termes de géométrie, pression et température, état physique, et composition ^[30].

- **la croûte:** elle est Océanique, d'une épaisseur de 5 à 15 km sous les océans ou Continentale, avec une épaisseur variant d'environ de 30 à 50 km mais eut atteindre 80 km dans certaines régions de convergence.
- **le manteau:** séparé de la croûte par la discontinuité de Mohorovicic (Moho) et s'étend jusqu'à 2900 km de profondeur.
- **le noyau:** au centre de la Terre, séparé du manteau par la couche D" (discontinuité de Gutenberg), siège de fortes hétérogénéités.

Les caractéristiques des ces unités sont résumées dans le tableau (I-1) et la figure (I-3) au dessus.

Tableau (I-1): Structure interne de la terre ^[28].

Région	Profondeur (km)	Fraction /masse de la terre
Croûte océanique	0-15	0.00099
Croûte continentale	0-50	0.00374
Manteau supérieur	10-400	0.103
Zone de transition	400-650	0.075
Manteau inférieur	650-2890	0.492
Noyau externe	2890-5150	0.308
Noyau interne	5150-6370	0.017

Néanmoins, ces unités comprennent d'autres subdivisions importantes marquées par des discontinuités ^[28]:

- entre 100 et 200 km de profondeur, les vitesses V_p et V_s diminuent suite à la diminution de la rigidité (matériau moins visqueux); cette zone est appelée LVZ (Low Velocity Zone). On appelle lithosphère la partie sus-jacente de la LVZ (elle contient donc la croûte et la partie supérieure du manteau), elle est rigide; l'asthénosphère, la partie sous-jacente de la LVZ est plus ductile.
- à 400 et 670 km de profondeur, l'augmentation des vitesses sismiques traduit des transitions de phase vers des matériaux plus denses. Le manteau dans son ensemble est formé de roches silicatées; jusqu'à 400 km de profondeur il est principalement formé de Péridotites, roches dont

les minéraux essentiels sont l'Olivine et les Pyroxènes. La zone de transition à 400 km marque la transition de l'Olivine vers la phase spinelle alors qu'à 670 km, cette dernière se transforme en un assemblage Pérovskite et magnésiowüstite. Cette limite marque la séparation entre le manteau supérieur et le manteau inférieur.

- Le noyau est lui aussi divisé en deux parties séparées par la discontinuité de Lehmann à 5100 km de profondeur: le noyau externe, liquide est constitué en majorité de Fer et en moindre proportion de Nickel et d'éléments légers (Oxygène, Soufre). Le noyau interne, ou graine, est formé essentiellement de Fer solide.

I-1-2 La méthode DIRECTE:

Cette méthode est parmi les nouvelles méthodes utilisées par les sismologues. Elle est appelée aussi la sismologie moderne ^[31] où les sismologues ont recours pour l'étude des couches profondes à des techniques expérimentales ou théoriques par simulation numérique ^[32].

Pour les techniques expérimentales, les expériences de haute pression et haute température permettent de recréer les conditions de pression et de température de la Terre profonde ^[32]. Les mesures en laboratoire permettent d'étudier les différentes propriétés physiques des minéraux. Elles nous renseignent sur la minéralogie d'assemblages susceptibles de représenter la profondeur de la Terre. Pour ces techniques il y a deux méthodes: la compression statique par utilisation de cellules à enclumes de diamant (CED) (voir description dans ^[33]) ou des presses multi enclumes, et la technique dynamique ou acoustique ou la spectroscopie Brillouin ou la méthode ultrasonique (voir description dans ^[34]).

Une approche complémentaire aux expériences consiste à calculer, à partir des données physiques les propriétés élastiques des minéraux. Les méthodes les plus souvent utilisées sont des méthodes dites « ab-initio » basées sur la dynamique moléculaire ^[35], des méthodes basées sur la physique statistique (méthodes vibrationnelles) ^[32] et des méthodes basées sur la thermodynamique ^[36]. Pour notre part, on applique la méthode directe à partir de la relation entre le modèle de la Terre et déduire le changement des propriétés structurales et élastiques du milieu qui sont intimement liées aux changements des vitesses sismiques. Dans ce qui suit et à travers les différentes définitions et lois, nous présenterons ce lien entre la physique du solide et la sismologie.

I-2 Rappels sur l'élasticité et la propagation des ondes

I-2-1 vitesses des ondes sismiques:

Comme mentionné précédemment, Les ondes de volume sont de deux types: P et S et leur vitesse de propagation est donnée en fonction des caractéristiques du milieu à savoir la densité ρ de la matière et les deux modules, d'incompressibilité K et de cisaillement G de la matière, selon les relations suivantes ^[37]:

$$V_p = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}G}{\rho}} \quad (I - 1)$$

$$V_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (I - 2)$$

Aussi, on définit la vitesse hydrodynamique ou vitesse d'incompressibilité V_f ou V_ϕ qui joue un rôle très important dans la connaissance de la distribution de la densité dans les couches internes et elle est relative seulement au module d'incompressibilité et à la densité. Elle est donnée par la relation:

$$V_f^2 = V_p^2 - \frac{4}{3}V_s^2 = \frac{K}{\rho} \quad (I - 3)$$

Donc pour déterminer les vitesses, il faut connaître les trois constantes: ρ , K et G .

I-2-2 Détermination de la densité (ρ):

Elle est le résultat de la division de la masse de la matière m sur son volume V . Dans les corps solides, elle prend le volume de la maille conventionnelle. Pour 1 mole de la matière, la densité est fonction des nombres des noyaux dans la maille conventionnelle, N_a étant le nombre d'Avogadro 6.023×10^{23} et de A l'ensemble des masses molaire d'atomes composants le noyau et V_c le volume du maille conventionnelle formant la structure ^[37]:

$$\rho = \frac{An}{N_a V_c} \quad (I - 4)$$

A partir de cette définition de la densité, la problématique du type de structure de la matière présente apparaît lors du changement de la pression et pour résoudre le problème ci-dessus il faut étudier l'enthalpie de formation de la structure cristalline H ou l'énergie Gibbs ΔG .

I-2-3 L'étude de l'enthalpie de formation (H):

Pour un ensemble de structures cristallines, l'enthalpie de formation se calcule pour chacune des structures en fonction de la variation de la pression de sorte que la valeur minimale indique la structure la plus stable. Dans la majorité des temps, la structure cristalline stable subie un changement, de sorte que les variations des courbes d'enthalpie de formation se croisent dans des points appelés les points de changement de phase ^[17-18,38].

I-2-4 Détermination des constantes élastiques (c_{ij}):

Dans un milieu élastique homogène et pour des déformations infinitésimales, les contraintes et les déformations sont reliées linéairement par la loi de Hooke. Dans le cas général, elles sont données sous la forme tensorielle;

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (I - 5)$$

On peut définir de façon réciproque; $\varepsilon_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}$, où σ_{ij} et ε_{ij} sont respectivement les tenseurs de contrainte et de déformation, c_{ijkl} et s_{ijkl} sont respectivement les tenseurs de rang 4 des modules élastiques ou rigidités et le tenseur des déformabilités ^[39-42].

En combinant la loi de Hooke (I-5) avec la relation fondamentale de la dynamique:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (I - 6)$$

Où ρ est la masse volumique et u_i est le déplacement, on obtient l'équation d'onde:

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (I - 7)$$

Une onde plane polarisée selon $\mathbf{u}^0$ se propage dans la direction $\mathbf{n}$ avec la vitesse de phase V , l'équation à résoudre devient:

$$c_{ijkl} n_j n_k u_l^0 = \rho V^2 u_i^0 \quad (I - 8)$$

Où Γ_{ij} le tenseur de Christoffel $\Gamma_{il} = C_{ijkl} n_j n_k$, On obtient l'équation de Christoffel:

$$\Gamma_{il} u_l^0 = \rho V^2 u_i^0 \quad (I - 9)$$

Cette dernière équation est l'équation aux valeurs propres dont la résolution donne les directions de polarisation des ondes et leurs vitesses de phase respectives. Notons que cette

résolution fournit des directions de polarisation qui ne sont pas dans le cas général, colinéaires ou perpendiculaires à la direction de propagation: on parle alors de pseudo-ondes longitudinales P et pseudo-ondes cisaillements S ^[43].

Pour des raisons de symétrie, le nombre de coefficients indépendants du tenseur c_{ijkl} peut être réduit de 81 à 21 et mis sous la forme d'un tenseur symétrique de rang 2 moyennant l'utilisation de nouveaux indices (notation de Voigt) ^[44]:

ij(kl)	11	22	33	23(32)	13(31)	12(21)
I(J)	1	2	3	4	5	6

Le tenseur des rigidités devient ^[45]:

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{16} \\ c_{16} & \dots & c_{66} \end{pmatrix} \quad (\text{I-10})$$

- Les constantes c_{ii} diagonales avec $i \leq 3$ peuvent être désignées sous les noms des constantes élastiques longitudinales;
- Les c_{ii} avec $i \geq 4$ s'appellent les constantes d'élastiques de cisaillement.
- Les c_{ij} avec $i \neq j/3$ sont des constantes au loin-diagonales.
- Les c_{ij} avec $i \leq 3$ et $j > 3$, qui mesurent la contrainte de cisaillement produite par un effort longitudinal, s'appellent les constantes élastiques mélangées ^[46].

Pour la symétrie cubique les trois constantes c_{11} , c_{12} et c_{44} définissent toutes les constantes de même nature, ou $c_{11} = c_{22} = c_{33}$, $c_{12} = c_{12} = c_{21} = c_{13} = c_{31}$ et $c_{44} = c_{55} = c_{66}$. Mais pour la symétrie hexagonale il y a d'autres constantes c_{33} , c_{13} et c_{66} , pour ça $c_{11} = c_{22} \neq c_{33}$, $c_{12} = c_{12} \neq c_{13} = c_{31}$ et $c_{44} = c_{55} \neq c_{66}$ ^[17,44-46].

I-2-5 Détermination du module d'incompressibilité (K ou B):

Appelé aussi Bulk modulus. Il représente la mesure de la résistance d'un matériau à un changement de volume. C'est le rapport de la variation de pression à la variation relative du volume.

$$K = -V \left(\frac{\Delta P}{\Delta V} \right) \quad (\text{I-11})$$

où: V est le volume de matière comprimée jusqu'au volume $V - \Delta V$ à l'aide d'un incrément de pression ΔP . Le signe négatif est mis conventionnellement parce que les matériaux se contractent

sous l'effet d'une augmentation de pression et se dilatent sous l'effet d'une diminution de pression. Le module de compression possède les dimensions d'une force par unité de surface et s'exprime donc en unités $M L^{-1}T^{-2}$. Sa valeur pour les roches terrestres est de l'ordre de 100 GPa [04].

Dans plusieurs études sa valeur est donnée directement ou bien calculée par la relation mathématique suivante [17,18,38,47,48]:

$$K = \frac{1}{2} (c_{11} + c_{12}) \quad (I - 12)$$

I-2-6 Détermination du module de cisaillement (G):

Appelé aussi coefficient de cisaillement ou module de rigidité ou encore module de torsion (en anglais: Shear modulus) et noté G. Il se définit à partir d'expérimentations qui mettent en cause non pas un changement de volume, mais un changement de forme correspondant à un cisaillement, une torsion, une rotation différentielle, etc. Pour les corps simples tels que le fer, le cuivre, l'étain, le plomb, etc. il existe une loi empirique établie par Sutherland qui stipule que lorsqu'on approche le point de fusion d'un tel matériau, le module de rigidité tend vers zéro selon une loi quadratique [49]. Un état fluide est caractérisé par un module de rigidité nul ($G = 0$).

À partir des constants élastiques et le module d'incompressibilité, il y a deux méthodes pour calculer ce module, à savoir celle de Voigt & Russ et celle de Hashin & Shtrikman.

Cette dernière donne des résultats beaucoup plus précis et c'est elle qui est utilisée dans la présente étude car le module de cisaillement G est déterminé à partir des constantes élastiques comme suit:

- Pour un système cubique [17,18,38,48]:

$$G = \left(\frac{G_{HS-} + G_{HS+}}{2} \right) \quad (I - 13)$$

Où : G_{HS+} , G_{HS-} sont respectivement les limites supérieures et inférieures de Hashin–Shtrikman [50-52], alors que:

$$G_{HS+} = c_{44} + 2 \left(\frac{5}{c_s - c_{44}} + \frac{18(B + 2c_{44})}{5c_{44}(3B + 4c_{44})} \right) \quad (I - 14)$$

et:

$$G_{HS-} = c_s + 3 \left(\frac{5}{c_{44} - c_s} + \frac{12(B + 2c_s)}{5c_s(3B + 4c_s)} \right) \quad (I - 15)$$

aussi:

$$c_s = \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{2} \right) \quad (I - 16)$$

- Pour un système hexagonal ^[15-27] :

$$G = \frac{(G_{PM}^- + G_{PM}^+)}{2} \quad (I - 17)$$

avec G_{PM}^- , G_{PM}^+ les limites supérieures et inférieures respectivement de Peselnick and Meister ^[53]

où:

$$G_{PM}^\pm = G_\pm + \frac{B^\pm}{1 + 2\beta_\pm B^\pm} \quad (I - 18)$$

avec:

$$G_+ = c_{66} \quad \text{et} \quad G_- = c_{44} \quad (I - 19)$$

et:

$$B^\pm = \frac{1}{5} \left[\frac{G_{eff}^r - G_\pm}{D_\pm} + \frac{2(c_{44} - G_\pm)}{1 - 2\beta_\pm(c_{44} - G_\pm)} + \frac{2(c_{66} - G_\pm)}{1 - 2\beta_\pm(c_{66} - G_\pm)} \right] \quad (I - 20)$$

et :

$$D_\pm = 1 - 2\beta_\pm(G_{eff}^r - G_\pm) - \alpha_\pm(B_V - B_\pm) \quad (I - 21)$$

et aussi:

$$\beta_\pm = \frac{2\alpha_\pm}{15} - \frac{1}{5G_\pm} \quad (I - 22)$$

si:

$$\alpha_\pm = \frac{-1}{B_\pm + 4G_\pm / 3} \quad (I - 23)$$

avec:

$$B_\pm = \frac{B_V(G_{eff}^r - G_\pm)}{(G_{eff}^v - G_\pm)} \quad (I - 24)$$

où :

$$B_V = \frac{[2(c_{11} + c_{12}) + 4c_{13} + c_{33}]}{9} \quad (I - 25)$$

et:

$$G_{eff}^v = \frac{(c_{11} + c_{33} - 2c_{13} - c_{66})}{3} \quad (I - 26)$$

enfin:

$$G_{eff}^r = 3 \frac{(c_{11} - c_{66} - c_{13})(c_{33} - c_{13}) + c_{33}(c_{11} - c_{66} + c_{33} - 2c_{13})}{2(c_{11} + c_{12}) - 4c_{13} + c_{33}} \quad (I - 27)$$

où G_{eff}^r, G_{eff}^v : est l'énergie par unité de volume dans un grain pour une déformation de cisaillement uni axial de grandeur unité dont la principale contrainte de compression est appliquée au grain le long de son axe de symétrie ^[54].

I-2-7 Détermination des paramètres de compositions:

Revenons maintenant à la détermination des importants modules nécessaires à cette étude qui lie la sismologie à la minéralogie ^[47]:

La densité de composition est donnée par la relation:

$$\rho = \frac{1}{V} \sum x_i M_i \quad (I - 28)$$

De sorte que V est le volume molaire global du composant et il est déduit à travers la conservation de la masse comme suit ^[32]:

$$V = \sum_i x_i v_i \quad (I - 29)$$

De sorte que x_i, v_i, M_i la fraction molaire, le volume molaire et la masse molaire des pôles purs formants le composant consécutivement.

Le module d'incompressibilité est déterminé selon Hashin & Shtrikman comme suit ^[55]:

$$B = \frac{1}{2} (B_{HS-} + B_{HS+}) \quad (I - 30)$$

où:

$$B_{HS-} = B_j + \frac{A_j}{1 + \alpha_j A_j}, B_{HS+} = B_j + \frac{A_N}{1 + \alpha_N A_N}$$

et:

$$A_N = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{v_i}{(B_{si} - B_N)^{-1} - \alpha_N}, \quad A_1 = \sum_{i=2}^N \frac{v_i}{(B_{si} - B_1)^{-1} - \alpha_1}$$

et la fraction volumique v_1 est:

$$v_i = \frac{x_i V_i}{V} \quad (I - 31)$$

aussi le module de cisaillement:

$$G_{HS} = \frac{1}{2} (G_{HS-} + G_{HS+}) \quad (I - 32)$$

de sorte que:

$$G_{HS+} = G_N + \frac{B_N}{1 + \beta_N B_N}, \quad G_{HS-} = G_1 + \frac{B_1}{1 + \beta_1 B_1}$$

et:

$$B_1 = \sum_{i=2}^N \frac{v_i}{[2(G_i - G_1)]^{-1} - \beta_1}, \quad B_N = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{v_i}{[2(G_i - G_N)]^{-1} - \beta_N}$$

en fin :

$$\beta_j = -\frac{3(B_j + 2G_j)}{5G_j(3B_j + 4G_j)}, \quad \alpha_j = \frac{-3}{3B_j + 4G_j}$$

Chapitre II :

Etat de l'art

Introduction :

Plusieurs travaux de recherche ont abordés l'étude du FeO, le MgO et l'ensemble magnésio-wüstite étant donné que ces deux oxydes sont considérés comme deux pôles purs dans la sismologie du globe tels que :CaO, BaO, Si₂O et font partie de nombreux constituants du Manteau surtout la magnésio-wüstite (Mg_(1-x),Fe_x)O ^[17,18,31,38,48,49, 56-101]. Donc il est indispensable de présenter les propriétés générales et les structures cristallines de ceux-ci et de dresser un état de l'art afin de faire un tour d'horizon sur les différentes études effectuées jusque-là sur cette thématique afin de pouvoir dégager notre problématique de la thèse et situer notre travail par la suite.

II-1 La wüstite (FeO):

II-1-1 Propriétés générales de la wüstite (FeO):

Des traces de l'Oxyde de Fer ou **Wüstite** ont été trouvées dans plusieurs conduits volcaniques. FeO est caractérisé par sa couleur grise brillante, sa dureté est de 5 à 5.5 mohs, sa masse volumique estimée de 5.88 g/cm³ et sa composition naturelle est stœchiométrique. Dans la nature, la wüstite ne se trouve pas dans la plupart des roches car l'oxydation de Fer généralement dégage la magnétite. Son nom vient du savant allemand Fritz Wilhelm Friedrich Wüst (1860-1938) ^[61].

II-1-2 Structures cristallines de la wüstite (FeO):

L'Oxyde de Fer prend plusieurs structures cristallines ^[12,18, 61-83], la structure cubique ou la phase B1 tel que le Sel de Table NaCl figure (I-5-a), la structure hexagonale ou la phase B8 comme la structure du composant NiAs figure (I-5-b), la structure Rhomboédrique R figure (I-5-c) et enfin la structure Monoclinique figure (I-5-d). Chacune de ces structures a ses paramètres et ses conditions thermodynamiques spécifiques et qui sont présentés au tableau (I-2).

Tableau (II-1): les propriétés structurales possibles de FeO et MgO, et les conditions thermodynamiques correspondantes.

	Cubique		Monoclinique	Rhomboédrique	Hexagonale
S-C	NaCl (B1)	CsCl (B2)		R	NiAs (B1)
G-S	Fm-3m	Pm-3m	C2/m	R-3	P6 ₃ /mmc
N-G-S	225	221	12	148	194
Z	8	8	4	2	1
a	4.326/4.2506	4.2/4.24	5.261	6.123	2.597
b	4.326/4.2506	4.2/4.24	3.033	6.123	2.597
c	4.326/4.2506	4.2/4.24	3.06	6.123	5.153
$\alpha(^{\circ})$	90	90	90	59.34	90
$\beta(^{\circ})$	90	90	124.649	59.34	90
$\gamma(^{\circ})$	90	90	90	59.34	120
coor	Fe/Mg(0.0.0) O(0.5,0.5,0.5)	Mg(0.0.0) O(0.5,0.5,0.5)	Fe(0.0.0.99) O(0.0.5.0.5)	Fe(0.0.0) Fe(0.5,0.5,0.5) Fe(0.5.0.0) Fe(0.0.5.0.5) O(0.25,0.25,0.25) O(0.25,0.25,0.75)	Fe(0.0.0) O(0.66,0.33,0.25)
Conditions	T=298 ⁰ K, P=1atm		T=10 ⁰ K	T=600 ⁰ K, P=17GPa	T=900 ⁰ K, P=87GPa

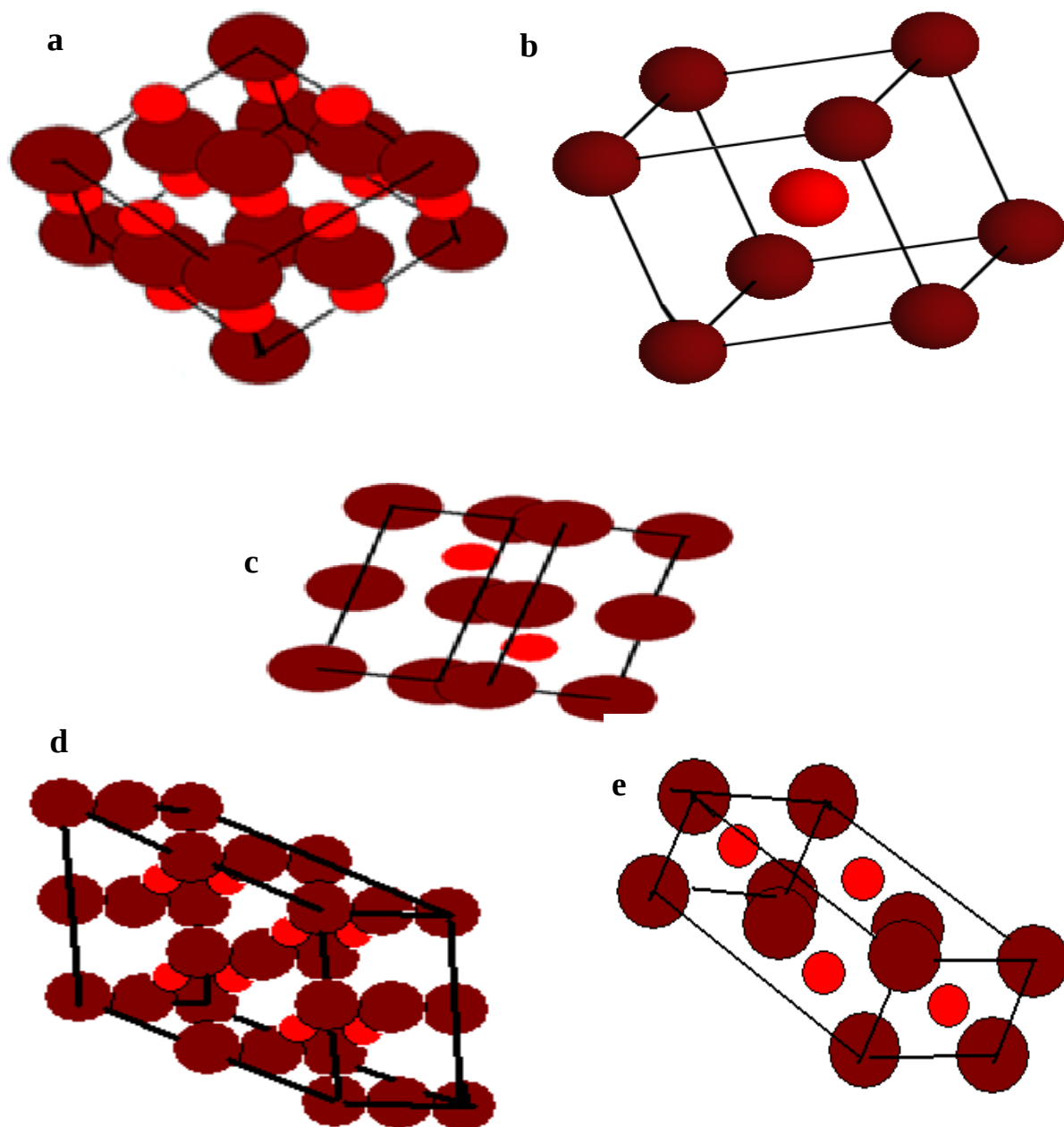


Figure (II-1): représente les structures cristallines possible de FeO et MgO, les grandes billes rouges foncées sont les atomes de Fer ou de Magnésium et les autres billes sont les atomes d'oxygène;
a-Structure cubiques, la phase B1, Sel de Table ou type NaCl pour les deux oxydes.
b-Structure cubiques, la phase B2 ou type CsCl pour MgO.
c-Structure hexagonale, la phase B8 type NiAs pour FeO.
d-Structure Rhomboédrique ou la phase R pour FeO.
e-Structure Monoclinique pour FeO.

II-1-3 Travaux sur de la wüstite (FeO):

Les études concernant l'oxyde de fer sont les moins répondues en les comparants à celles des autres composants évoqués et les plus notables sont les suivantes:

Tableau (II-2):résumé pour les importantes valeurs des paramètres des propriétés étudiées pour l'Oxyde de Fer ou FeO en particulier à la pression 0 GPa.

	x (%) Dans Fe _x O	a(Å)	K(GPa)	T(K)
1 Y. Fei et H. Mao (1994)		4.324		
2 S. Stolen et F. Gmnvold (1996)		4.323	180/150	
3 Clenenden and Drickamer (1966)	94	4.304	154(10)	1123
4 Mao et al. (1969)	92.4	4.289	142(10)	1108
5 Mizutani (1971)	46.4	4.317	172	
6 Mizutani et al. (1972)	98	4.317	174(12)	
7 Jackson et al. (1978)	100		182(5)	
8 Will et al. (1980)	94.1	4.299	154(5)	923
	92.7	4.299	154	
9 Jeanloz and Ahrens (1980)	94	4.308	185(5)	1373
10 Sumino et al. (1980)	92	4.280	181.4	
11 Berger et al. (1981)	95	4.310	150	1373
12 Hazen (1981)	92	4.290	151.9(6)	1573
	93	4.302	153.1(8)	1573
	94.7	4.308	154.0(7)	1573
13 Bonczar and Graham (1982)	94	4.306	141.5(3.9)	1273
	100		183.5(3.1)	
14 Jeanloz and Sato-Sorensen (1983)	94	4.308	157(12)	1273
15 Jackson et al. (1985)	94.5	4.308	153	
16 Yagi et al. (1985)	98	4.325	169(10)	1573
17 Ming Liu et Lin-gun Liu 1987	93.3	4.302	150.0	
18 Webb et al. (1988)	100		179	
19 Jackson et al. (1990)	94.3	4.307	154.9	1350
	100		174	
20 Fei (1996)	98	4.323	146	HPS
21 M. Murakami et al. (2004)			127(21)	
22 R. A. Fischer et al. (2011)			149.4	

➤ **l'étude de Brown et Shankland 1981 [63]:**

Ce travail constitue une grande référence dans la détermination de l'état thermodynamique de la terre où ils proposent une approche basée sur le Modèle Debye avec deux fréquences de coupures pour les ondes de compression et cisaillement afin de déduire quelques paramètres thermodynamiques et dresser un profil pour la structure terrestre et ce à partir des données sismologiques (Parametric Earth Model). Aussi, ils présentent une application pour une variété de solides. Ce travail est essentiel dans la mesure où il présente le changement de la densité et les trois vitesses d'ondes par le changement de pression à la limite de notre étude où nous ferons une comparaison avec ses résultats.

➤ **l'étude de T. Yagi et al 1988 [70]:**

La courbe de compression Hugoniot de la wüstite (Fe_{1-x}O) a été étudiée jusqu'à 120 GPa en utilisant un pistolet à gaz léger à deux étages. La wüstite polycristalline sans pores a été cultivée par la méthode de la zone flottante et des spécimens plaquettaires, typiquement de $10 \times 14 \times 2 \text{ mm}^3$, ont été préparés. La méthode du miroir incliné a été adoptée pour enregistrer l'état de compression de choc et à la fois la solution d'adaptation d'impédance et l'approximation de surface libre ont été utilisées pour déduire la courbe de compression de Hugoniot. Une augmentation discontinue de la densité a été observée à environ 70 GPa.

➤ **l'étude de Y. Fei et H. Mao 1994 [73]:**

Des mesures in situ par diffraction synchrotron des rayons X du FeO à des pressions élevées et à des températures élevées ont révélé que la phase à haute pression de FeO avait la structure NiAs (B8). Aussi, ils ont déterminés les paramètres de maille de cette phase à 96 GPa et 800 K. Le comportement métallique de la phase à haute pression est en accord avec une structure NiAs de FeO liée de manière covalente et métallisée. La transition vers la structure NiAs du FeO améliorerait la solubilité de l'oxygène dans le fer fondu. Cette transition fournit donc une base physico-chimique pour l'incorporation de l'oxygène dans le noyau de la Terre.

➤ **l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 [76]:**

Dans cette étude, les limites de phase de la wüstite à haute pression sont calculées en utilisant un ensemble de données thermodynamiques décrivant le système Fe-O. Une nouvelle description thermodynamique de la wüstite est présentée, tandis que les descriptions thermodynamiques du fer, de l'oxygène, de la magnétite et de l'hématite sont tirées de la littérature. L'équation pour l'énergie Gibbs pour la formation de la wüstite à la pression ambiante repose sur des études calorimétriques. La description donne des valeurs raisonnables pour le point eutectique et des limites de phase de la wüstite à haute température et explique en outre la formation d'un mélange intermédiaire métastable de wüstite et de magnétite presque stœchiométriques sur le chauffage de la wüstite trempée à environ 500 K. l'extrapolation aux hautes pressions est faite en tenant compte de la variation de la composition, la température et de la pression du volume molaire de la wüstite. Aussi, elle a présenté la variation de ce module en fonction de la valeur x dans cet oxyde autrement entre 88 jusqu' à 100. Ainsi elle a montré le changement du volume de la maille de structure.

➤ **l'étude de M. Murakami et al 2004 [79]:**

Ils ont étudié les transitions de phase de FeO à haute pression et haute température jusqu'à 87 GPa et 1730 K par des mesures in situ de diffraction synchrotron des rayons X dans une cellule d'enclume de diamant chauffée au laser (DAC). Leurs résultats ont montré que la structure de type NaCl (B1) de FeO subit une transition vers la structure de type NiAs (B8) au-dessus de 70 GPa à 1600 K. L'augmentation de densité au cours de cette transition est d'environ 2%. La pression de transition B1-B8 est cohérente avec la pression de transition antérieure induite par le choc. Ils suggèrent que les intensités relatives des pics de diffraction de la phase B8 peuvent induire une structure polytype normale/inverse NiAs, qui a une nature métallique qui pourrait favoriser l'incorporation de l'oxygène dans le noyau riche en fer. La transition vers la phase B8 métallique au-dessus de 70 GPa est également cohérente avec des mesures de résistance électrique antérieures.

➤ **l'étude de R. A. Fischer et al 2011 [83]:**

Par la même technique du travail précédent, cette étude a établi le diagramme de phase du FeO stœchiométrique et les équations d'état de ses structures B1 et B8 qui ont été mesurés à des températures et des pressions élevées atteignant celles du noyau externe de la Terre. Aussi, ils ont trouvé que la pente positive de la frontière de phase entre les phases sub-solide B1 et B8 de FeO est globalement cohérente avec celles rapportées par Kondo et al. (2004) et Ozawa et al. (2010). Leurs résultats confirment que la phase stable du FeO dans les conditions de l'intérieur de la Terre a la structure B1, et non la structure B8. Ils ont montré que l'équation d'état de B1-FeO rapportée par Campbell et al. (2009) ne décrivaient pas précisément leurs nouvelles données de pression plus élevée, mais leur équation d'état présentée décrivait non seulement leurs nouvelles données mais aussi celles de plusieurs études antérieures (Campbell et al., 2009; Ozawa et al., 2010; Seagle et al., 2008). Ils ont montré aussi le changement du volume de la maille conventionnelle de l'oxyde avec le changement de la pression pour différents niveaux de température allant de 300K jusqu'à 3000 K pour les deux phases ainsi que le changement de la densité de l'oxyde avec le changement de la pression de 130 jusqu'à 370 GPa.

II-2 Le périclase (MgO):

II-2-1 Propriétés générales du périclase(MgO):

L'Oxyde de Magnésium connu par **Périclase** se trouve en grande quantité dans la nature et généralement, il est dilué dans les eaux minérales. Le MgO est caractérisé par sa couleur grise brillante et parfois jaune aussi, sa dureté est de 6 mohs et sa masse volumique estimée de 3.56 g/cm³. Le MgO est découvert par le savant Italien Greek (1840) ^[31].

II-2-2 Structures cristallines du périclase (MgO):

L'Oxyde de Magnésium prend deux structures cristallines, cubique comme l'Oxyde de Fer mentionné précédemment (figure I-5-a) et l'autre est la phase B2 comme celle de CsCl ^[3,17, 84-101] (figure (I-5-e)), voir bien aussi la deuxième colonne dans le tableau (II-1) au-dessus.

II-2-3 Travaux sur le périclase (MgO):

➤ **l'étude de B. B. Karki et al 1997 [17]:**

Les constants élastiques individuels de l'oxyde de magnésium (MgO) ont été déterminés pour le régime de pression du manteau inférieur terrestre (LM) avec la théorie de la perturbation fonctionnelle de la densité (DFT) par l'approximation locale densité (LDA). De plus, les vitesses sismiques et l'anisotropie prédite par la forte pression est conservée vers le fond de la LM jusqu'à 150 GPa.

Parmi les études évoquant cet oxyde, celle-ci est considérée comme une référence parce qu'elle s'occupe de la majorité des propriétés et sous les conditions de notre étude. En outre, elle présente une comparaison avec des études précédentes présentées dans le tableau (II-3) ci-dessous, seulement elle n'a pas mentionné les deux études suivantes.

➤ **l'étude de M. Liu et L. Liu 1987 [88]:**

Cette étude a été menée sur les deux oxydes en utilisant la diffraction des rayons X à la température ambiante et en changeant la pression jusqu'à 8.3 GPa et obtenir une courbe de la variation volumique en fonction de pression jusqu'à 9 GPa pour les deux oxydes. Aussi, le bulk modulus a été calculé.

➤ **l'étude de A. Yoneda 1990 [91]:**

Dans cette étude, un dispositif hybride (liquide –solide) de compression a été conçu à la fois sur le MgO et MgAl_2O_4 jusqu'à 8 GPa. Aussi, une procédure analytique du traitement des données acoustiques a été améliorée et a proposé une formulation pour décrire la relation pression et constantes élastiques qui ont été obtenues pour les hautes pressions par extrapolation où la relation entre la transition de phase et le ramollissement par cisaillement dans MgO et MgAl_2O_4 est discutée selon le critère de Born. Les propriétés physiques (capacité thermique, constante de Gruneisen, dilatation thermique, etc.) de MgO ont été calculées en modifiant le modèle de Kieffer. Une dilatation thermique négative est attendue pour MgO supérieur à 50 GPa.

➤ **l'étude de L. Stixrude 1998 [03]:**

Il a passé en revue les principales méthodes théoriques dans le calcul des propriétés élastiques à savoir la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) basée sur l'approximation LDA (Local Density Approximation) ainsi que la méthode des pseudo-potentiels. Aussi, il a comparé ses résultats de différents composants dont le MgO avec d'autres travaux de cette époque à savoir ([17,105-107]) et aussi les résultats expérimentaux. Pour ce qui est de la périclase, il a établi la courbe des constantes élastiques et la vitesse des ondes longitudinales jusqu'à 140 GPa de pression.

➤ **l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 1999 [94]:**

Les propriétés élastiques monocristallines de MgO ont été mesurées par diffusion Brillouin dans une cellule d'enclume de diamant (DAC) à 18.6 GPa. Leurs mesures démontrent que les conditions de contraintes quasi-hydrostatiques peuvent être obtenues dans un milieu sous pression solide par recuit thermique et ont établi la précision avec laquelle les modules d'élasticité peuvent être mesurés sur cette plage de pression étendue.

L'anisotropie acoustique du MgO diminue avec la pression qui devient isotrope à 21.5 GPa. Les écarts par rapport aux forces interatomiques non centrales, mesurés par les relations de Cauchy, augmentent régulièrement avec la pression.

➤ **l'étude de B. B. Karki et al 1999 [95]:**

Cette étude est considérée complémentaire de B. B. Karki et al 1997 [17], mais ils ont montré que les effets de la température sur les observations sismiques (densité, vitesses et anisotropie) disparaissent de façon monotone avec l'augmentation de la pression et par conséquent, dans des conditions réelles du LM. Les vitesses des ondes isotropes de MgO restent comparables aux vitesses sismiques, comme cela a déjà été observé dans des calculs de haute pression athermique.

➤ **l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 2000 [97]:**

Dans cette étude les propriétés élastiques monocristallines du pyrope synthétique $\text{Mg}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ et de la Périclase MgO ont été mesurées par diffusion de Brillouin dans un dispositif DAC

jusqu'à 20 GPa où un mélange 16:3:1 de méthanol-éthanol-eau a été utilisé comme milieu transmetteur de pression. Au-dessus de la pression de congélation de ce milieu, 14 GPa, le traitement thermique et la relaxation des contraintes qui l'accompagne produisent des conditions quasi-hydrostatiques. Une analyse des erreurs géométriques associées au DAC indique que celui-ci introduit une incertitude supplémentaire de la vitesse de l'ordre de 0.5% par rapport aux mesures dans l'air. Ils ont conclu que leurs résultats pour le MgO étaient en excellent accord avec les mesures ultrasoniques précédentes effectuées à des pressions plus basses et en bon accord avec des mesures de compression récentes sur pyrope à pressions supérieures à 20 GPa, suggérant que la diffusion de Brillouin est une méthode précise pour les mesures de densité à haute pression et de modules élastiques. Ils ont trouvé que le pyrope était presque élastiquement isotrope dans les conditions ambiantes et reste isotrope au-dessus de la plage de pression étudiée. En revanche, l'anisotropie élastique de MgO diminue considérablement avec l'augmentation de la pression, devenant élastiquement isotrope à 21.5 GPa.

➤ **l'étude de A. Hachemi et al, 2009 [101]:**

Ils ont mené une étude sur de l'anisotropie à haute pression du MgO à partir de calculs des premiers principes basés sur la théorie fonctionnelle de densité (DFT) dans des approximations de gradient généralisé. Leurs résultats montrent que la dépendance en pression des coefficients élastiques de rigidité et des paramètres d'anisotropie, dans les phases B1 et B2, présente pour la compression hydrostatique élevée, une déformation préférée de cisaillement est selon le plan (100) et la réponse du matériau à la déformation et au cisaillement est presque pareil. D'après leurs calculs des vitesses de propagation des ondes élastiques, le MgO développe une anisotropie élastique, notamment, dans la phase B1. Ils présentent aussi les propriétés élastiques de la phase B2 sous haute pression.

Il convient de souligner que l'importance de ce travail ne consiste pas seulement à calculer paramètres élastiques à haute pression dans les deux phases B1 et B2, mais aussi dans la prédiction du comportement élastique de la phase B2 sous très haute pression et de voir l'effet de la transition de phase sur l'élasticité du MgO.

Dans le tableau (II-3), une récapitulation des différentes études menées sur le MgO.

Tableau (II-3): présente un résumé pour les importantes valeurs des paramètres des propriétés étudiés pour l'Oxyde de Magnésium ou MgO en particulier à la pression 0 GPa.

	a(A)	Densité(g/cm ³)	K(GPa)	G(GPa)
1 Anderson et andreach (1966)		3.583	159.8	
2 Anderson et al. (1968)		3.580	160.1	
3 Chang and Barsch (1969)		3.579	159.7	
4 Spetzler (1970)		3.583	160.5	
5 Mao and Bell (1979)		3.582	156	
6 Ming Liu et Lin-gun Liu (1987)			160.0	
7 Akira Yoneda 1990	4.212	3.584	162.7	
8 Chang and Cohen (1984)	4.191		146	
9 Bukowinski (1985)	4.221		155	
10 Mehl and Cohen (1988)	4.167		172	
11 Isaak et al. (1990)	4.191		181.9	
12 Fei (unpublished)			160.03	
13 Carter et al. (1971)	4.2112		157	
14 Jackson and Niesler (1982)			162.5	130.9
15 Duffy and Ahrens (1995)			162.5	130.8
16 Chopelas (1996)			162	130.9
17 Lars stixrude (1998)				
18 S. V. Sinogeikin et J. D. Bass (1998)			163.2(10)	130.2(10)
19 B. B. Karki et al. (1999)			162	128
20 S. V. Sinogeikin et J. D. Bass (2004)			163.2(10)	130.2(10)
21 A. Hachemi et al. (2011)		3.570		

II-3 Composants magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$):

II-3-1 Propriétés générales des composants magnésiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$):

En plus de ce qui a été évoqué précédemment concernant la formation du manteau inférieur, la majorité des études évoquent le composant **Magnésiowüstite** autrement appelé **Ferropériclase**. Ces études ont confirmé que ce composant a beaucoup d'états autrement dit que ce n'est pas un seul composant mais plusieurs composants. C'est une matière non-stœchiométrique qui dépend du x quantité d'échange des ions du Magnésium Mg^{+2} aux ions du Fer Fe^{+2} dans le Périclase, d'où sa formule chimique est $(\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)})\text{O}$. Ou le contraire, c'est-à-

dire x quantité d'échange des ions du Fer Fe^{+2} par des ions du Magnésium Mg^{+2} dans le wüstite de formule chimique $(\text{Fe}_x, \text{Mg}_{(1-x)})\text{O}$, de sorte que x est une fraction pour cent. Alors, il y a 99 formes possibles de magnésioiwüstite avec sa forme simple. Quant à la forme la plus complexe quelques études ont confirmé que l'échange se fait avec plusieurs ions, de sorte que d'autres ions participent comme Ca^{+2} , Ba^{+2} , Mais avec un faible taux. L'état non-stœchiométrique de ce composant est la cause qu'il est impossible de déterminer des caractéristiques générales stables comme c'était mentionné ci-dessus pour les deux oxydes ^[102-114].

II-3-2 Structures cristallines des composants magnésioiwüstite $(\text{Mg}_x, \text{Fe}_{(1-x)})\text{O}$:

Quant aux composants magnésioiwüstite vu l'état non-stœchiométrique en plus de la similitude entre les deux diamètres des ions Mg^{+2} et Fe^{+2} de sorte que le taux de différence entre leurs diamètres est estimée à 0.94. Alors la structure cristalline d'un composant magnésioiwüstite prend des structures cristallines des deux oxydes selon l'ion le plus dominant, si Fe^{+2} est cet ion le composant prend les trois structures cristallines de FeO, au moment où il prend les structures cristallines de MgO si Mg^{+2} est l'ion est le plus dominant.

L'influence de la teneur en fer ou magnésium ainsi que la température et la pression sur le changement de phases de la magnésioiwüstite sont présentées dans la figure (I-6).

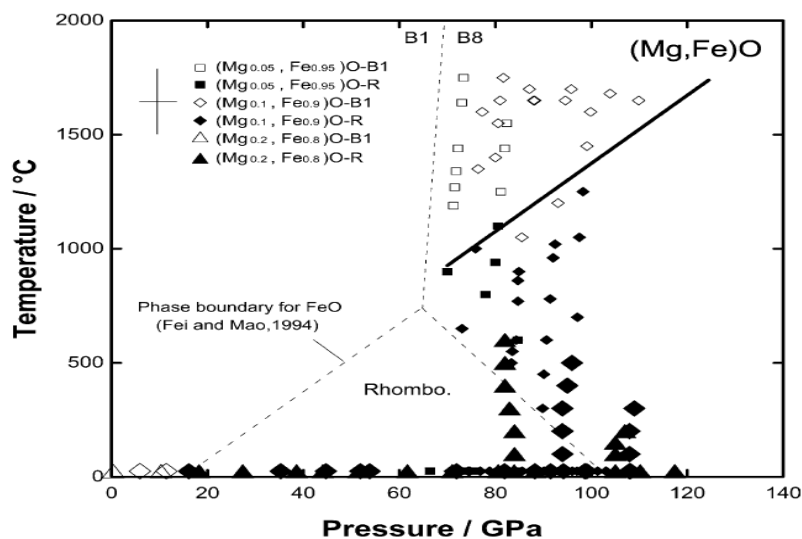


Figure (II-2): Les transformations de phase de la Magnésioiwüstite ou Ferropériclase en fonction de la pression et la température ^[112].

II-3-3 Travaux sur magnésio-wüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$):

➤ **l'étude de I. Jackson et al 1978 [102]:**

Ils ont procédé dans leur travail à la mesure des vitesses des ondes de compression (V_p) et de cisaillement (V_s) dans cinq agrégats poly-cristallins bien caractérisés de $(\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)})\text{O}$ ($0.85 \sim x > 0.23$) en fonction de la pression hydrostatique (jusqu'à 6 kbar) par l'usage de la technique de transmission et superposition de pulsion ultrasonique. Ils ont trouvé que les deux vitesses diminuaient systématiquement avec l'augmentation de la teneur en fer. Les propriétés élastiques du FeO stœchiométrique ont été déduites en inversant les données de la solution solide en utilisant un modèle dans lequel les déformations du monocristal varient linéairement avec la fraction volumique de chaque membre d'extrémité. Ils suggèrent que ce modèle, avec l'identification des modules d'agrégats avec la moyenne arithmétique des limites de Hashin-Shtrikman, peut être utilisé pour décrire la variation du module (K_s) et du module de cisaillement (μ_s) avec une composition d'agrégats poly-cristallins à phases de symétrie arbitraire. Ils ont comparé leur modèle avec celui de Liu (1968). Pour les modules élastiques isotropes de FeO ainsi obtenus ils étaient en accord avec les données de Wüstite de Mizutani et al. (1972) mais incompatible avec les modules de masse dérivés des données de compression statique de Mao et al. (1969) et Rosenhauer et al. (1976). Une description alternative de la variation de μ avec x basée sur la considération des solutions solides en tant qu'agrégats à deux phases est également présentée.

➤ **l'étude de L. J. Bonczar et E. K. Graham 1982 [103]:**

Les vitesses de compression et de cisaillement dans une série d'échantillons poly-cristallins de magnésio-wüstite $(\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)})_y\text{O}$ ont été mesurées en utilisant la méthode de superposition d'impulsions. Chaque échantillon a été caractérisé en termes de composition, de stœchiométrie et de porosité par analyse chimique, microsonde et par diffraction des rayons X.

Leurs mesures ont montré les échantillons individuels étaient isotropes à l'intérieur de 1/4%. L'application de corrections empiriques pour tenir compte des effets de la non-stœchiométrie et de la porosité leur a permis de déterminer les propriétés élastiques isotropes pour toute la série de solutions solides stœchiométriques $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$. Leurs données correspondaient généralement aux résultats d'études antérieures, qui utilisaient à la fois des

techniques de compression ultrasoniques et statiques, lorsque des corrections sont appliquées aux effets de non stœchiométrie. Aussi, leurs mesures sur magnésio-wüstites riches en Fe ont démontré clairement que les propriétés élastiques isotropes, en particulier le module de masse K_s , dépendent fortement de la structure de défaut (non stœchiométrie) des échantillons et que lorsque des corrections sont appliquées pour les effets non stœchiométriques, les propriétés élastiques de la série de solutions solides (Mg, Fe)O se comportent selon la relation de déformation linéaire proposée par Liu (1968) et Jackson et al. (1978).

➤ **l'étude de M. S. Vassiliou et Thomas J. Ahrens 1982 [104]:**

Leur travail était fait sur des échantillons poly-cristallins (avg. porosité 6.9%) de la magnésio-wüstite ($\text{Mg}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{O}$) et ayant suivi le même dispositif expérimental que l'étude précédente et couvrant une plage de pression au-delà de 200 GPa. Ils montrent aussi qu'il y avait des preuves marginales pour une transition de phase possible autour de 120 GPa et ils suggèrent que contrairement aux hypothèses précédentes, qu'une transition de phase dans la magnésio-wüstite n'est pas une explication probable des effets sismiques dans la région D " du manteau inférieur et que la transition wüstite peut être un phénomène plus complexe que supposé initialement lié peut-être à un effet de non stœchiométrie localisé à l'extrémité riche en fer de la solution solide.

➤ **l'étude de P. Richet et al 1989 [105]:**

La détermination du module d'incompressibilité à 0 GPa est considérée parmi les plus importants résultats de ce travail, de sorte que ces valeurs ont été présentées pour les deux oxydes et plusieurs composants magnésio-wüstite (pour $x=0.4$, 0.6 et 0.8). Et à partir de ce module, ils ont pu trouver l'équation d'état de changement du taux volumique en fonction de la pression (jusqu'à 100 GPa). Soit que ce changement est comme des valeurs et il est relatif de deux composants magnésio-wüstite pour $x=60$ et $x=80$, ou bien comme une représentation pour tous les composants magnésio-wüstite mentionnés au-dessus, où il a présenté une comparaison avec les deux oxydes en utilisant des résultats d'autres études. Ce travail a compté sur la technique des cellules de diamant et l'analyse par les rayons x.

Leurs paramètres pour FeO sont cependant nettement moins que ceux trouvés par Jackson et al. [1978] et Bonczar et Graham [1982] et ils suggèrent des mesures ultrasoniques pour résoudre la controverse. Aussi, Ils permettraient également d'après eux, de mieux déterminer la dépendance de K_0 vis-à-vis de la composition et de tester la variabilité linéaire de K_0 . De même, ils pourraient aider à différencier les nombreux types d'équations empiriques ou théoriques qui ont été proposés.

➤ **l'étude de J. Hama et K. Suito 1999 [106]:**

Ils ont proposé un modèle thermodynamique simple pour calculer les propriétés à haute pression et à haute température du MgO de manière cohérente. Le modèle explique l'équation d'état EOS à ~ 220 GPa à température ambiante et l'équation d'état de l'onde de choc à 200 GPa très bien. La température calculée de Hugoniot s'élève à 3400 K à 200 GPa. Les paramètres d'entrée sont le volume de la cellule unitaire, V_0 , le bulk modulus K , sa dérivée de pression, K_0' , température de Debye, θ_0 et un paramètre relatif au module de cisaillement, f_{44} . L'expansivité thermique calculée, α , et les paramètres d'Anderson-Gruneisen, à pression nulle sont en accord avec les données expérimentales à 1000-1250 K et celles à 1800 K, respectivement. Leur modèle explique aussi très bien les vitesses expérimentales des ondes de compression et de cisaillement à 1800 K à pression nulle. Ils suggèrent que l'examen de leur modèle était plutôt limité mais qu'il permettait de prédire les propriétés thermoélastiques dans des conditions de manteau inférieur avec la supposition que la concentration en fer de Mw est de 10-15% dans le manteau inférieur et l'effet d'une faible teneur en fer sur leurs propriétés semblent être petites sauf pour la densité (Wang et al., 1994). A partir de l'assemblage binaire de MgPv et Mw, nous avons montré que la densité et les vitesses des ondes de compression et de cisaillement de PREM étaient respectivement de 0.1 % et 1.8 % sur le manteau inférieur zs 721-2871 km sauf pour les voisinages des deux limites de zs670 et 2891 km. Dans notre calcul, $T_z \check{Z}$. a été déterminé en supposant que le manteau inférieur était adiabatique et $T_s 1873$ K f $\check{Z}$. 1600 °C. Bien que le modèle purement pérovskitique consistant en Mg Fe SiO puisse expliquer la densité de puits PREM, "p s et " différent de PREM de 7.5-3.2 % et 5.5-3.5 % respectivement sur zs721-2871 km. Notre résultat préliminaire suggère la composition de pyrolite pour le manteau inférieur. Les détails seront donnés dans un document séparé.

➤ **l'étude de S. D. Jacobsen et al 2002 [111]:**

ils rapportent les effets de la substitution $(\text{Mg}, \text{Fe})^{2+}$ et non stœchiométrique due à Fe^{3+} sur la structure cristalline, les constantes élastiques (C_{ij}) et les modules (K_{0T} , K_{0S} , G_0) de $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ en utilisant la diffraction des rayons X et l'interférométrie par ultrasons avec une nouvelle méthode de génération d'ondes de cisaillement à hautes fréquences. Parmi les résultats qu'ils ont trouvé que le taux de variation des constantes élastiques de composition est le plus élevé entre MgO et $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ avec 25 mol% FeO , ce qui implique que la substitution du Fe en périclase a un effet plus important sur les propriétés élastiques plutôt que d'ajouter du Mg à la wüstite. Aussi, ils ont trouvé que l'anisotropie élastique de $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ a un comportement plutôt inhabituel, étant essentiellement constante pour la gamme 0-25 mol% FeO mais décroît ensuite linéairement avec la teneur en Fe de sorte que la wüstite est élastiquement isotrope.

➤ **l'étude de S. D. Jacobsen et al, 2005 [114]:**

Lors de cette étude, l'application la technique du synchrotron par rayons X monochromatique à 40 keV est présentée pour des études d'équations d'états de haute précision sur des ensembles de monocristaux analysés individuellement dans la même cellule de pression diamant-enclume. Ils ont obtenu des diagrammes de diffraction sur l'axe des zones dispersés en angle à partir de cristaux de wüstite $\text{Fe}_{0,93}\text{O}$ et de magnésio-wüstite $(\text{Mg}_{0,73}\text{Fe}_{0,27})\text{O}$ à 51 GPa dans un milieu d'hélium sous pression hydrostatique. La phase rhomboédrique de $\text{Fe}_{0,93}\text{O}$ a été observée au-dessus de 23 GPa, et son module isotherme (K_0) a été déterminé à 134 GPa, en supposant $K' = 4$. La phase rhomboédrique de $\text{Fe}_{0,93}\text{O}$ est plus compressible que B1- $\text{Fe}_{0,93}\text{O}$ structuré, avec $K_0 = 146$ GPa. La magnésio-wüstite $(\text{Mg}_{0,73}\text{Fe}_{0,27})\text{O}$ reste cubique sur la plage de pression expérimentale, et a un module de 154 GPa avec $K' = 4.0$.

➤ **l'étude de J. Lin et al, 2005 [11]:**

Dans cette étude, sont montrés les états de spin du fer dans la magnésio-wüstite et les effets isolés des transitions électroniques sur l'élasticité du magnésio-wüstite avec la spectroscopie d'émission de rayons X in situ et la diffraction des rayons X aux pressions du manteau inférieur. Une transition du fer à la magnésio-wüstite est observée engendrant un comportement de compression anormal entre les états de spin élevé et de spin faible. Bien

qu'aucun changement significatif de densité ne soit observé à travers la transition électronique, le saut dans les vitesses du son et le bulk modulus à travers la transition fournit une explication supplémentaire sur l'hétérogénéité de l'onde sismique dans le manteau inférieur. Aussi, ils déduisent que la transition affecte également les interprétations actuelles des modèles géophysiques et géochimiques en utilisant des données d'équation thermique d'état extrapolées ou calculées sans tenir compte des effets de la transition électronique.

➤ **l'étude de S. Speziale et al, 2007 [115]:**

Leur étude par diffraction des rayons X à haute pression de $(\text{Mg}_{0.80}\text{Fe}_{0.20})\text{O}$ à température ambiante révèle une discontinuité du module d'élasticité à $40 (\pm 5)$ GPa, similaire à la pression à laquelle une transition spin électronique de Fe^{2+} est observée par spectroscopie Mössbauer. Le volume de cellule élémentaire est cohérent avec les estimations passées du rayon ionique du Fe^{2+} à faible spin. Une transition de spin à des profondeurs du manteau inférieur entre 1100 et 1900 km (40-80 GPa) entraînerait une diminution du volume de la cellule élémentaire et une augmentation de la vitesse sonore globale. Aussi, ils suggèrent que même en l'absence de discontinuité sismique visible, la transition de spin du fer impliquerait une correction des modèles de composition actuels du manteau inférieur, avec une augmentation de 10% en moles de magnésio-wüstite pour correspondre aux données sismologiques.

En conclusion à ce qui a été présenté précédemment, on peut dire que pour la modélisation de la structure terrestre par approche minéralogique a suscité beaucoup d'études sur les minéraux dont les oxydes de fer et de magnésium et le mélange magnésio-wüstite mais elles se sont en majeure partie basées sur l'expérimentation sans atteindre les conditions réelles des profondeurs de la terre et aussi pour la modélisation théorique, seule le travail de Karki et al, 1997 ^[17] constitue une référence dans cette approche sauf qu'elle s'est limité à l'oxyde de magnésium. Un autre point important à relever est l'absence de comparaison ou prise de considération par rapport aux données et conditions des modèles de structures par approche sismologique tels que le modèle PREM qui apparait dans une grande partie des études de structures profondes. De cette synthèse, on a décidé dans notre choix d'adopter une démarche identique à celle de Karki et al, 1997 ^[17] mais élargie à l'oxyde de fer et l'ensemble magnésio-wüstite et d'essayer de déterminer les

différentes propriétés élastiques et sismiques des différents composants aux conditions du modèle sismologique PREM.

Pour cela, nous avons suivi la méthodologie la suivante :

- 1- Etudier les propriétés élastiques et structurales de l'oxyde de fer aux hautes pressions, ce qui a fait l'objet d'une publication scientifique à la revue « PHASE TRANSITIONS » présentée dans le chapitre qui suit.
- 2- Dédire un modèle de variation des propriétés des deux oxydes FeO et MgO en fonction de la pression
- 3- Calcul des propriétés des deux oxydes à partir du modèle obtenu auparavant aux valeurs de pression du modèle PREM et à partir des relations Hashin-Shtrikman, on calcule les propriétés de l'ensemble magnésio-wüstite selon les différentes teneurs (1 à 99) aux mêmes conditions citées précédemment.
- 4- On fera une synthèse de ces résultats par rapports aux différents constituants et le modèle PREM ainsi qu'à ceux disponibles dans la bibliographie.

Chapitre III:

Contribution à l'étude des propriétés structurales et élastiques de la wüstite jusqu'à 140 GPa par méthode de calcul pseudopotentielle

Introduction:

Comme il a été indiqué à la fin du chapitre précédent, la première étape de notre travail est l'étude des propriétés structurales et élastiques de l'oxyde de fer aux hautes pressions en adoptant la démarche de Karki et al, 1997 ^[17] soit 140 GPa par la méthode de calcul des pseudopotentiels. Ce chapitre a fait l'objet d'une publication à la revue scientifique « PHASE TRANSITIONS » en 2017 présenté en annexe du manuscrit.

Il faut signaler que l'intérêt porté à l'étude de l'oxyde de fer ou wüstite a grandi puisque il constitue une phase importante dans les réactions affectant la magnésio-wüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$) ^[116] dans les conditions du manteau inférieur et peut être considéré comme composant significatif du noyau de la terre ^[117].

Ainsi, plusieurs travaux se basant sur l'expérimentation ou par calculs théoriques, se sont penchés sur l'étude des propriétés structurales, le changement de phase et les implications géophysiques de ces composants. Ces études ont montrés l'existence de quatre structures cristallines possibles de la wüstite: la phase monoclinique C2/m, à la fois aux hautes pressions ^[81] et à 1 bar et à basse température ^[77], et cette phase n'existe pas dans les conditions thermodynamiques de la terre. Dans les conditions ambiantes, la wüstite est stable dans la phase B1 (type NaCl) et trois phases transitoires sont produites

par les phases restantes; toutes les transitions tendent à la phase B8 (type NiAs) aux hautes valeurs de pression, et il y a une seule transition avec compression à température ambiante dans laquelle le FeO subit une transition de phase vers la phase rhomboédrique ou R-3 où elle n'apparaît pas aux températures élevées et les pressions élevées; car à ces valeurs, la transition de phase s'effectue directement de la phase B1 à la phase B8 [12, 62, 70, 72-74, 79, 83, 112]. La plupart de ces études n'ont pas exploré clairement les propriétés élastiques de cet oxyde, notamment leur variation par rapport à la pression au moins jusqu'au noyau externe de la terre. Cependant, seule l'étude expérimentale de Brown et Shankland est à signaler portant sur la densité du FeO et de vitesses des ondes isotropes [52] où nous utilisons leurs résultats pour la comparaison.

Dans notre travail, nous avons effectué des calculs en utilisant la méthode pseudopotentielle fonctionnelle de densité pour obtenir des informations précises sur le FeO, exactement sur ses propriétés structurales et élastiques, ainsi qu'une comparaison avec ses valeurs obtenues à partir de quelques études et le modèle PREM dans la plage de pression 0-140 GPa à 0 K. Pour conclure, nous résumons les résultats les plus importants de notre travail dans la section 3 de ce chapitre.

III-1 Méthode de calcul:

Dans ce travail, nous avons utilisé le code CASTEP (Cambridge Total Energy Package) [118, 119], dans lequel la théorie de la fonctionnelle de densité et le théorème de Kohn-Sham sont utilisés pour résoudre l'équation de Schrödinger [120, 121], puis de trouver la valeur propre d'énergie du système. Afin de réduire le nombre de variables, l'approche pseudopotentielle et la fonction d'onde plane ont été introduites [122]. Le schéma Monkhorst-Pack a été utilisé pour échantillonner la zone irréductible de Brillouin [123]. La corrélation d'échange de l'énergie a été traitée avec l'approximation GGA-PW91 [124]. Pour cette étude, nous avons utilisé une coupure d'énergie égale à 450 eV, et l'échantillonnage de la zone de Brillouin était de 8 x 8 x 8; ces valeurs assurent une bonne convergence de calcul par rapport à des résultats fiables.

III-2 Résultats:

III-2-1 La transition de phase:

La stabilité de la phase structurale est déterminée par le calcul de l'énergie libre de Gibbs (G) pour les phases possibles, qui est donnée par $G = E_{tot} + PV - ST$. Sachant que les calculs théoriques sont effectués à $T = 0$ K, alors l'énergie libre de Gibbs devient égale à l'enthalpie, $H = E_{tot} + PV$.

Pour les conditions ambiantes, cet oxyde cristallise dans la structure sel de table, avec le groupe spatial Fm3m (#225), ce qui peut entraîner d'autres conditions: la phase R métastable avec le groupe spatial R-3 (#148) ou la phase B8 avec groupe P63/mmc (#194). Nous avons calculé l'enthalpie des trois phases impliquées obtenues de 0 à 140 GPa et celle qui a la plus faible énergie est choisie comme la plus stable. La transition d'une structure instable à la suivante est obtenue à l'intersection des courbes d'enthalpie correspondantes. Nous pouvons utiliser une autre méthode qui consiste à calculer la différence d'enthalpie et à considérer l'une d'elles comme une référence; si la différence est positive, la phase de référence est la phase stable, et vice versa. Ces différences de fonctionnement par la pression des phases structurales FeO qui sont calculées par l'approche GGA sont représentées sur la figure (III-1).

La différence d'enthalpie entre les phases B1 et R est presque égale à trois valeurs: 0, 30 et 100 GPa (deux courbes parallèles), et donc la phase rhomboédrique dans ce cas est instable. La différence d'enthalpie de B8 par rapport de B1 décroît lorsque la pression augmente jusqu'à devenir nulle pour la pression autour de 77 GPa, qui est la pression de transition de la wüstite. Au-delà de 77 GPa, la phase hexagonale B8 (NiAs) devient stable.

La transition de phase et la pression de transition calculée présentées ici sont en accord avec les valeurs prédites (70 GPa) de Jeanloz et Ahrens ^[62] utilisant les études antérieures de compression de choc et Knittle et al. ^[68], Knittle et Jeanloz ^[72], et Yagi et al. ^[70] en utilisant les mesures de résistance électrique. Toutes ces études sont en accord avec la suggestion de Fei et Mao ^[73]. Cependant, Murakami et al. ^[79] et Sata et al. ^[78] ont récemment rapporté que la transition de la structure B1 à la structure B8 normale à 87 et 130 GPa, respectivement, par les expériences DAC chauffées au laser. Mais toutes ces

études étaient à haute température (> 1000 K). Nous pensons que tous ces écarts sont dus à la différence entre notre méthode théorique et ces conditions expérimentales.

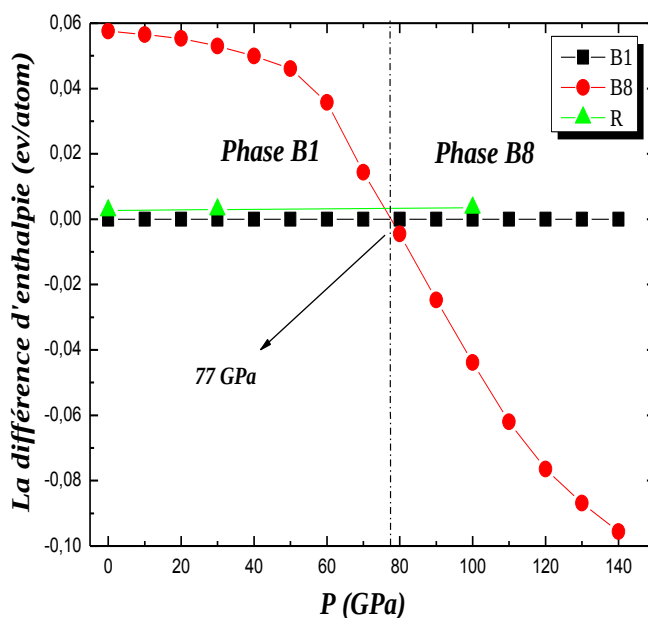


Figure (III-1): La différence d'enthalpie en fonction de la pression hydrostatique pour le FeO en utilisant l'enthalpie de la phase B1 comme référence.

III-2-2 Propriétés structurales:

Nous avons calculé la variation du volume relatif V/V_0 avec la pression pour les phases B1 et B8, où V_0 est le volume conventionnel à 0 GPa. La relation entre le V/V_0 et la pression pourrait être illustrée par la relation entre le volume du cristal et la pression appliquée qui est représentée sur la figure (III-2).

Pour la phase B1, ce volume varie de 22 sur la plage de pression 0-70 GPa. Partout, à 0 GPa, le volume de la cellule unitaire de wüstite est de $71.53 \text{ \AA}^3$, et il devient $56.14 \text{ \AA}^3$ à 70 GPa. Dans la phase B8, le changement de volume est plus faible, $18 \text{ \AA}^3$. A la pression 80 GPa, ce volume est de $26.74 \text{ \AA}^3$ et le volume final est de $15.97 \text{ \AA}^3$ à la pression de 140 GPa.

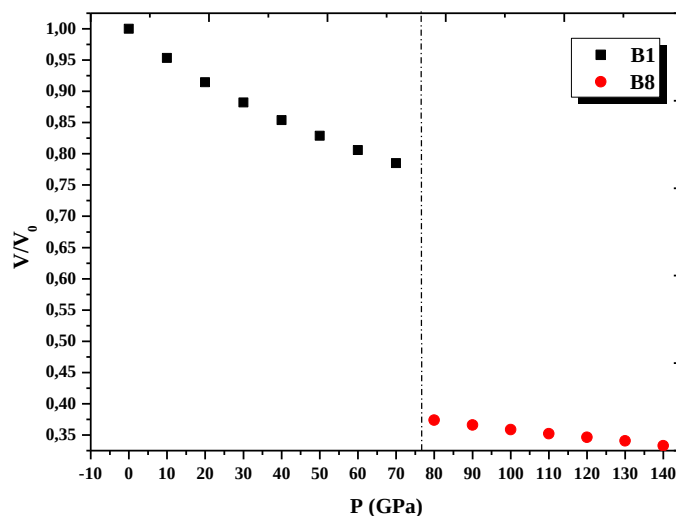


Figure (III-2): Volume relatif en fonction de la pression hydrostatique dans les phases B1 et B2 de FeO.

La densité ρ est donnée par la relation (I-4) de chapitre I.

Nos calculs montrent que dans les deux phases B1 et B8, la densité de FeO augmente linéairement avec la pente de pression autour de 26 et 18 %, respectivement. En d'autres termes, la densité augmente à travers la transition B1-B8 d'environ 5 %, alors que Jeanloz et Ahrens ^[62] et Murakami et al. ^[68] l'ont calculé à 4 % et 2 %, respectivement, pour la transition induite par le choc.

La différence entre la densité des phases B1 et B8 par rapport à nos résultats et celles rapportées dans les travaux de Brown et Shankland pour wüstite, et celles obtenues par le modèle PREM sont montrées sur la figure (III-3).

Nous avons comparé nos résultats avec les travaux expérimentaux de Brown et Shankland ^[63] où on observe que:

- (1) La phase de transition n'apparaît pas dans l'étude de Brown et Shankland.
- (2) La densité dans nos calculs est relativement plus élevée que celle des résultats de Brown et Shankland. Il faut signaler que la wüstite étudiée par Brown et Shankland n'était pas pure (un échantillon de magnesiowüstite).

A une pression inférieure à 140 GPa, les valeurs de densité de FeO, selon nos calculs, sont beaucoup plus élevées que celles du matériau terrestre qui sont données par le modèle PREM par Dziewonski et Anderson ^[7]. Mais autour de cette pression, les deux densités sont presque égales et elles ont presque la valeur de 10.03 g/cm³. Ceci s'explique par le fait qu'à cette valeur de pression, nous sommes dans le noyau externe où le composant le plus important est le fer ^[48]. Entre 20 GPa et la dernière pression, nous notons que la dérivée de pression de la densité est relativement plus élevée dans les deux phases B1 et B8 par rapport à celle dans le modèle PREM (voir le tableau (III-2)). Entre 7.1 et 23.8 GPa, la densité du modèle PREM augmente généralement plus rapidement que l'augmentation de la densité de cet oxyde, mais avant la pression finale, les deux densités sont égales.

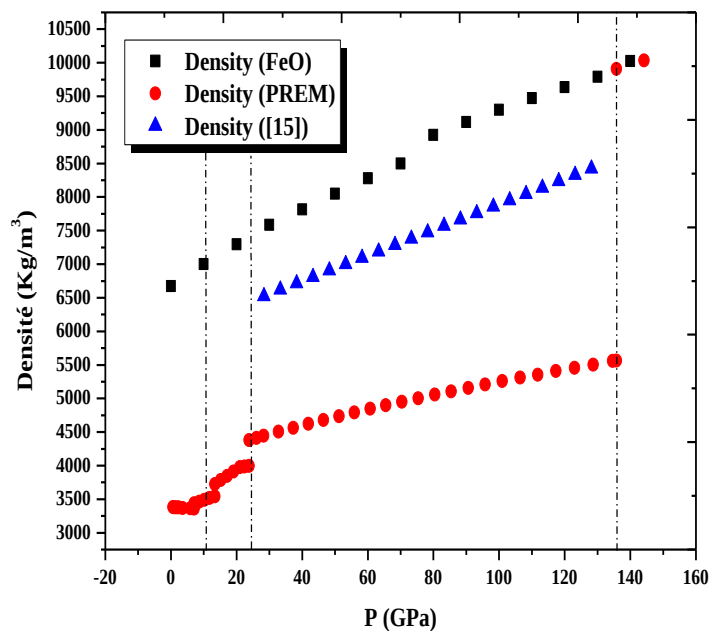


Figure (III-3): La densité en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 de FeO obtenue par le présent travail, le modèle PREM et l'étude de Brown et Shankland ^[63].

III-2-3 Propriétés élastiques:

Les constantes élastiques des solides fournissent un lien entre le comportement mécanique et dynamique des cristaux et donnent des informations importantes concernant la nature des forces agissant dans les solides. En particulier, ils fournissent des informations sur la stabilité et la rigidité des matériaux. Les valeurs calculées de plusieurs constantes élastiques de la matrice de rigidité dans les deux phases B1 et B2 sont représentées en fonction de la pression sur la figure (III-4).

Pour la structure cubique, il existe trois coefficients indépendants: c_{11} , c_{12} et c_{44} . La constante élastique c_{11} représente l'élasticité en longueur. Une déformation longitudinale produit un changement de c_{11} . Les constantes élastiques c_{12} et c_{44} sont liées à l'élasticité de forme, qui est une constante de cisaillement. Une déformation transversale provoque un changement de forme sans changement de volume. Par conséquent, c_{12} et c_{44} sont moins sensibles à la pression par rapport à c_{11} . Nous voyons une augmentation quasi-linéaire de c_{11} et c_{12} en fonction de la pression. Cependant, c_{44} dans cette phase augmente linéairement jusqu'à 20 GPa, mais au delà de cette pression c_{44} diminue linéairement. À toutes les pressions dans cette phase, les trois axes [100], [010] et [001] sont les moins compressibles car $c_{11} > c_{44}$ et $c_{11} > c_{12}$. Cette déformation le long de ces axes est facile dans la phase B1. Au-dessus de 20 GPa, c_{44} devient plus petit que c_{12} puisque $c_{11} > c_{12} > c_{44}$, indiquant que le cisaillement le long du plan (100) est le plus facile.

Pour le cristal hexagonal, il y a trois autres coefficients à ajouter (c_{13} , c_{33} et c_{66}), mais seulement cinq d'entre eux sont indépendants puisque $c_{66} = 1/2(c_{11} - c_{12})$. Il faut noter que dans cette phase, toutes les constantes élastiques varient de façon monotone avec l'augmentation de la pression. c_{11} , c_{12} , c_{33} , c_{13} et c_{44} augmentent, mais c_{66} diminue. De même, la constante élastique c_{33} représente l'élasticité en longueur. c_{33} est supérieure à c_{11} , ce qui signifie que la résistance à la contrainte appliquée est élevée dans la direction [001] plutôt que dans la direction [100] et cela signifie que les liaisons atomiques le long des plans {001} entre les plus proches voisins sont plus fortes que ceux le long des plans {100}. Ceci est en accord avec le résultat ci-dessus que FeO est plus compressible le long de l'axe a que le long de l'axe c. D'un autre côté, on peut observer que les valeurs unidirectionnelles de la constante élastique c_{11} pour FeO sont supérieures aux valeurs c_{44} ,

ce composé présente donc une résistance relativement plus faible aux déformations de cisaillement pures.

Pour la stabilité du réseau, les critères de stabilité de Born devraient être satisfaits. Les conditions connues de stabilité mécanique des cristaux cubiques sont: $c_{11} > 0$, $c_{11} > c_{12}$, $c_{44} > 0$, $c_{11} + 2c_{12} > 0$ et $c_{11} < B < c_{12}$ ^[41]. Pour la phase hexagonale, les critères de stabilité mécanique sont donnés par $c_{11} > c_{12}$, $c_{44} > 0$ et $(c_{11} + c_{12}).c_{33} > 2c_{13}^2$ ^[71]. Nos résultats pour les constantes élastiques satisfont ces conditions de stabilité mécanique traditionnelles pour toutes les phases considérées de B1 et B8.

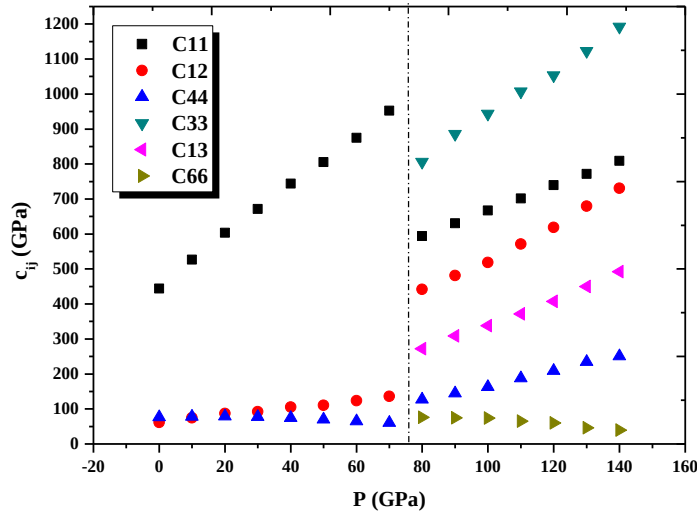


Figure (III-4): Les constantes élastiques de rigidité en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 du FeO.

Nos résultats donnés de c_{11} , c_{12} dans la phase cubique et ceux de c_{33} , c_{13} dans la phase hexagonale pour l'oxyde étudié dans la gamme de pression du manteau inférieur ont été les dérivés de pression situés dans les intervalles déterminés par Karki et al. ^[78], ces résultats ont été rapportés dans le tableau (III-1). Malheureusement, nos dérivées de pression de c_{12} et c_{44} pour la phase B1 calculés à basse pression sont loin de ceux obtenus à partir des méthodes expérimentales rapportées par Jackson et al. ^[60] ($\partial c_{44}/\partial P = -1.03$, $\partial c_{12}/\partial P = 2.77$). De plus, nos résultats de c_{12} et c_{44} sont comparés aux travaux de Jackson et al. ($c_{12} = 123$ GPa et $c_{44} = 45$ GPa); il est facile d'observer qu'ils sont plus différents, parce que ce travail ^[71] utilise la même formule non stœchiométrique de la wüstite $Fe_{1-x}O$ où x est une variable allant jusqu'à 0.12 ^[12].

Tableau (III-1): La dérivée P/R à la pression calculées pour les constantes élastiques du FeO et son existence au niveau du manteau inférieur à cette échelle donnée par Karki et al.^[48].

Constants élastiques	phase	$\partial C_{ij}/\partial P$ (%) de FeO dans notre	$\partial C_{ij}/\partial P$ intervalle dans le manteau	Existence
C_{11}	B1	6.988	[5, 10]	Oui
	B8	3.5618		No
C_{33}	B8	6.3294	[5, 10]	Oui
C_{12}	B1	0.9814	[0.5, 4]	Oui
	B8	4.7614		No
C_{13}	B8	3.5602	[0.5, 4]	Oui

Les propriétés élastiques du matériau sont décrites par deux autres coefficients de rigidité élastique qui caractérisent le matériau: le module de masse B comme résistance à la rupture et le module de cisaillement G comme résistance à la déformation plastique. La relation de pression à ces coefficients de raideur élastique a été représentée sur la figure (III-5).

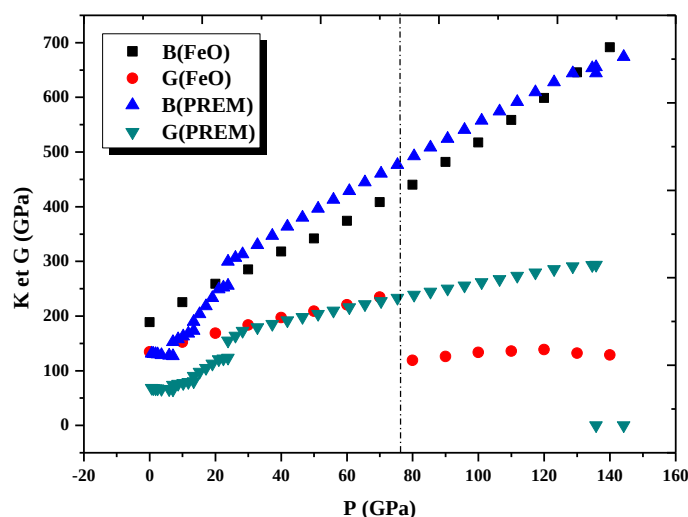


Figure (III-5): Les modules de cisaillement et de compression en fonction de la pression obtenues dans le présent travail et ceux donnés par le modèle PREM pour les phases B1 et B2 du FeO.

Dans notre cas, les valeurs de B ont été données par le calcul CASTEP et peuvent être définies par l'équation est donnée par la relation (I-12) de chapitre I.

Le module de cisaillement est obtenu en utilisant la constante élastique c_{ij} du schéma de moyenne de Hashin-Shtrikman ^[38] est donnée par les relations (I-13-27) de chapitre I.

Nous notons qu'à la pression de 0-140 GPa, le module de masse augmente linéairement dans une courbe continue. La transition de phase de wüstite pour le module de cisaillement est très claire comme les constantes élastiques de ce matériau. Dans la phase B1, le module de cisaillement augmente linéairement et relativement lentement que le premier module. Au contraire, la phase B8 a un module de cisaillement moins sensible à la pression. Au-dessus de 120 GPa, ce module diminue, mais sous cette pression G augmente.

Pour la phase B1, à pression nulle, nos valeurs calculées en masse sont surestimées par rapport à celles de Jackson et al. ^[71] (153 GPa). Néanmoins, à cette pression, nos valeurs en gros sont en bon accord avec l'expérience précédente de Jeanloz et Sato-Sorensen (180 GPa) ^[69]. Nous pensons que la différence entre cette expérience et notre méthode de calcul est due à la méthode expérimentale qui utilise le même composé wüstite non stoechiométrique ^[12].

Le module de masse et de cisaillement de la phase B1 est plus élevé que celui du modèle PREM sous pression au début du manteau inférieur (23.8 GPa), et la vitesse de changement va être exactement comme nous l'avons vu dans le cas de la densité. Au-dessus de cette pression, les valeurs présentées du module de cisaillement sont en excellent accord avec le modèle précédent, mais les valeurs et la dépendance linéaire du module de compression dans cette plage de pression sont légèrement inférieures à celles du PREM. La pression linéique calculée de B et G est résumée dans le tableau (III-2). Dans ce tableau, on peut voir que pour la phase B8, la pression linéaire du module massique varie sensiblement sous pression par rapport aux variations de ce module dans le PREM modèle. Mais jusqu'à 120 GPa, notre masse est plus faible, et à 130 GPa, les deux masses sont presque égales. Cependant, les valeurs de G calculées sont inférieures et ne sont pas en accord avec celles du modèle PREM, comme on peut le voir dans le tableau (III-2).

Tableau (III-2): La dérivée P/R à la pression calculée pour la densité et les modules élastiques du FeO comparée avec celle donnée par le modèle PREM au manteau inférieur Dziewonski et Anderson ^[07].

		Phase	Intervalle de pression pour FeO	Déviaton de pression pour FeO (%)	Intervalle de pression pour PREM	Déviaton de pression pour PREM (%)
Densité	$\rho(\text{g/cm}^3)$	B1	20-70	24.1	23.8-135.8	10.6
		B8	80-130	17.35	23.8-135.8	10.6
Modules élastiques	K(GPa)	B1	20-70	2.98	23.8-135.8	3.18
		B8	80-130	4.11	23.8-135.8	3.18
	G(GPa)	B1	20-70	1.31	23.8-135.8	1.24
		B8	80-130	0.26	23.8-135.8	1.24

III-2-4 Vitesses d'onde isotrope:

L'étude de la dépendance de l'isotropie élastique à la pression est importante pour comprendre les mécanismes sismologiques. La solution de l'équation de Christoffel ^[07, 38, 41, 42, 49, 54, 69, 71] donne les vitesses d'ondes élastiques: de compression ou longitudinale V_P , de cisaillement ou transversale V_S et V_B sont données par les relations (I-1-3) présentent dans le chapitre I.

Les figures (III-6 et 7) montrent la variation des variations relatives des vitesses (V_P , V_S et V_B) par rapport à la pression hydrostatique appliquée dans notre travail. Les valeurs expérimentales obtenues par Dziewonski et Anderson ^[07] en utilisant les données PREM et par Brown et Shankland ^[52] sont également inclus à titre de comparaison.

Toutes les vitesses dans la phase B1 et V_P , V_B dans la phase B8 augmentent approximativement linéairement avec la pression. Mais la vitesse d'onde élastique transversale dans la phase B8 change comme la variation du module de cisaillement G . Seule V_B a une courbe continue où la transition de phase n'est pas claire que les autres vitesses. De plus, en structure cubique, la variation de V_P est rapide et la variation de V_S est lente; dans l'autre structure, V_B a été modifié plus rapidement que V_P . Nous pouvons voir le résumé de ces résultats dans le tableau (III-2).

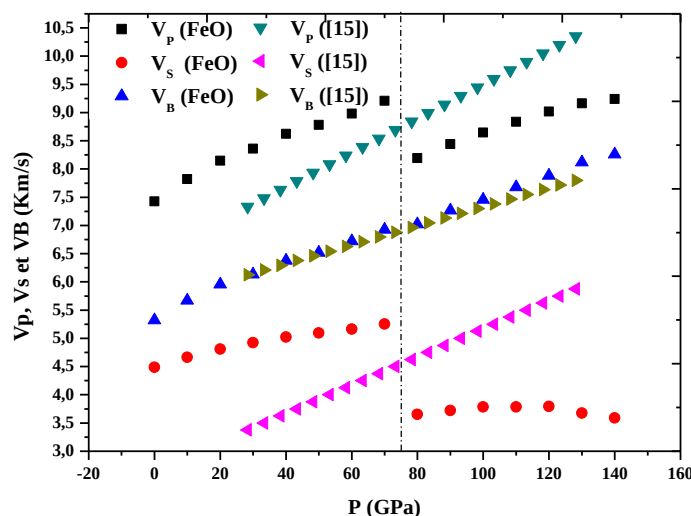


Figure (III-6): Les vitesses V_p , V_s et V_b en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 de FeO obtenues dans le présent travail et Brown et Shankland.

La figure (III-6) montre une très bonne concordance entre notre vitesse sonore globale V_b et celle de Brown et Shankland [52], où elle pourrait être d'une variation plus lente pour notre étude en phase hexagonale et similaire en phase cubique, la transition de phase n'apparaît pas dans l'étude de Brown et Shankland pour toutes les vitesses des ondes. Les vitesses d'onde V_p et V_s dans nos calculs sont relativement élevées par rapport à celles de Brown et Shankland pour B1 et moins dans la phase B2, mais ces vitesses dans notre étude changent plus lentement dans les deux phases. Notez que le wüstite étudié par Brown et Shankland a été inclus dans un échantillon de magnésio-wüstite.

La figure (III-7) montre que les valeurs de vitesse dans le modèle PREM sont toujours supérieures à celles de FeO, à l'exception de la vitesse de l'onde de cisaillement où les valeurs sont presque identiques. Seulement dans la structure de sel dans l'intervalle 0-10 GPa qui représente la croûte et le début du manteau supérieur, les vitesses dans le matériau terrestre diminuent par opposition à leurs changements pour le wüstite. Mais dans la partie finale du manteau supérieur en atteignant la pression de 23.8 GPa, le changement des vitesses dans le modèle PREM est plus élevé que son changement dans

cet oxyde, tandis que dans tout le manteau inférieur ce changement sera plus rapide dans ce modèle en particulier dans la phase hexagonale. Cependant, au-dessus de 135.8 GPa, c'est-à-dire aux limites du début du noyau externe, il semble que les valeurs de vitesse dans le modèle sont indépendantes de la pression et les valeurs sont toujours inférieures et identiques à la vitesse de l'onde sonore. Enfin, à titre de remarque, les valeurs de la vitesse de l'onde sonore longitudinale et de masse de notre oxyde correspondent presque à celles de la vitesse du son global et de la vitesse de l'onde de cisaillement du modèle PREM, respectivement.

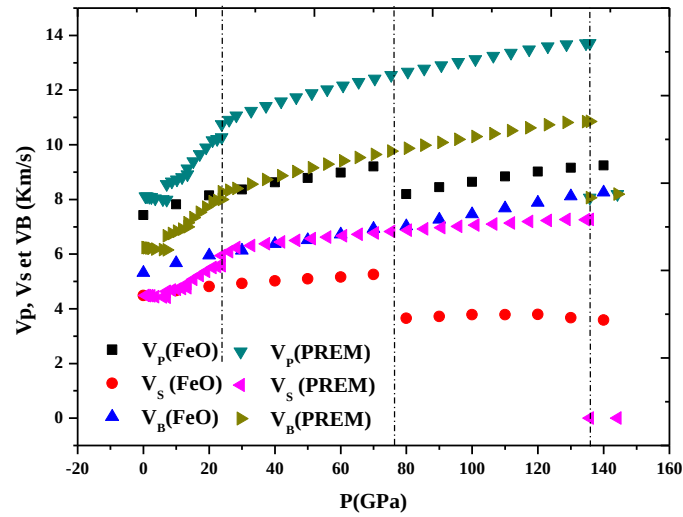


Figure (III-7): La vitesse des ondes V_p , V_s et V_b en fonction de la pression dans les phases B1 et B2 du FeO obtenues dans le présent travail et données par le modèle PREM.

III-3 Conclusion:

Dans cette première partie de l'étude, nous avons calculé les propriétés structurales et élastiques du FeO à haute pression hydrostatique en utilisant les calculs du premier principe à température nulle avec la méthode pseudopotentielle dans GGA pour la corrélation d'échange d'énergie (XC).

Les points importants à retenir de ce qui a précédé sont:

- En changeant la pression, on remarque qu'à 77 GPa, cet oxyde passe de la phase cubique NaCl (B1) à la phase hexagonale NiAs (B8) avec une augmentation de densité d'environ 5 %.
- Seule l'étude de la densité, du module de masse et de la vitesse de l'onde sonore globale montre des courbes continues, ce qui signifie qu'il n'y a pas d'occurrence de la transition de phase.
- Nous avons trouvé une dépendance linéaire dans l'augmentation de la densité, de la plupart des constantes élastiques et des vitesses de module ou d'onde de FeO avec une pression croissante. Mais C_{44} dans la phase B1, c_{66} , le module de cisaillement et la vitesse d'onde transversale dans la phase B8 ne sont pas corrélés avec la tendance précédente.
- Nos résultats spéciaux pour les constantes élastiques révèlent que les changements de c_{11} et c_{12} dans la première phase et chacun des c_{33} et c_{13} dans la deuxième phase sont dans les limites établies par des études antérieures de pôles purs contenus dans le manteau inférieur.
- Nous avons tenté de comparer les valeurs des propriétés étudiées dans nos résultats avec des données expérimentales, bien qu'elles soient peu nombreuses, abordées avec cet oxyde. Ce sont des données issues d'études adaptant différentes conditions à celles utilisées dans nos calculs comme l'ajout du changement de température. Nous avons trouvé beaucoup d'accord dans certains cas, et peu dans d'autres. Parmi ces études, on trouve celles qui s'intéressaient à des valeurs de pression très déterminées. Le seul traitement pour le changement de la densité et les vitesses d'onde pour cet oxyde selon le changement de pression était dans le manteau inférieur, était dans l'étude de Brown et Shankland de l'échantillon de wüstite extrait de magnesiowüstite.
- Nous avons pu comparer la densité, le module d'élasticité et les trois vitesses d'onde de l'oxyde de fer en fonction de nos résultats avec ceux du matériau terrestre contenu dans le modèle PREM. Cette comparaison a montré l'existence soit d'un accord dans la modification de ces paramètres, soit de la conformité de leurs valeurs dans les deux matériaux. Cela ne peut se produire que dans des zones déterminées des couches terrestres comme le manteau inférieur ou à des profondeurs données.

Aussi, il faut noter que certes, notre étude ait été motivée par l'étude de Karki et al, 1997 sur l'oxyde de magnésium, et qu'elle soit similaire, mais elle diffère sur un certain nombre de points:

- Dans leur étude, Karki et al, 1997 ^[17] se sont basé sur la méthode d'approximation LDA alors que nous on a préféré la méthode GGA.
- Dans ce travail, on s'est limité au calcul des vitesses des ondes sismiques.
- En comparant les valeurs de pression de calcul, on voit bien qu'il n'y pas de correspondance exacte de sorte qu'on puisse faire une comparaison directe où le pas de changement de pression adopté dans notre étude est fixé à 10 GPa à l'encontre de l'autre étude où il n'est pas fixe et seulement des valeurs sont présentées. Ainsi on peut relever que dans notre étude les valeurs de pression 5 et 125 GPa ne figurent pas, alors que dans l'autre étude les valeurs suivantes (30, 50, 70, 90, 110, 120, 130 et 140 GPa) ne sont pas mentionnées.
- Il est également possible de noter que les deux études n'ont pas procéder à une comparaison directe avec le modèle PREM du point de vue des valeurs de la pression c-à-d valeur par valeur pour une meilleure corrélation des résultats et l'interprétation par la suite.

A cet effet, on essayera dans le chapitre suivant de déduire un modèle pouvant représenter la variation des propriétés des deux oxydes englobant les différentes valeurs de pression mentionnées dans les deux études mais aussi selon le modèle PREM.

C*hapitre IV:*

Modélisation de la variation des propriétés du MgO et FeO

Introduction:

Comme on l'a signalé à la fin du chapitre précédent, les études de Tlili et al, 2017 ^[18] et Karki et al, 1997 ^[17] sur les propriétés du FeO et le MgO, mentionnent des structures stables et la transition de phase au changement de la pression pour ces deux oxydes ainsi que d'autres paramètres structuraux, élastiques et sismiques (Les résultats de ces deux études sont rassemblés dans l'annexe A) mais la non correspondance des valeurs de pression étudiées rendent la comparaison directe difficile. Aussi, pour palier à cette difficulté, on peut procéder à une comparaison indirecte en essayant de trouver un modèle pouvant décrire les deux pôles purs aux différentes valeurs de pression en se basant sur le principe de linéarité du changement des propriétés entre des valeurs proches de la pression ^[3,17,27] où il est possible de faire une comparaison des pentes de changement linéaire entre des points très proches. En d'autres termes, on essayera de déduire un modèle par interpolation linéaire ou polynomiale capable de décrire la variation des propriétés aux différentes valeurs de pression manquantes dans les deux études.

IV-1 La recherche d'un modèle de variation des propriétés étudiées:

IV-1-1 Reclassification des propriétés étudiées:

Lorsqu'on compare les paramètres étudiés, on peut observer que certains paramètres des propriétés présentés dans le chapitre précédent ont été calculés directement tels que le volume de la maille conventionnelle, les constantes élastiques et le module d'incompressibilité. Alors que d'autres, par contre, ont été déduits par la suite à partir des lois exposées précédemment (la densité, le module de cisaillement et les vitesses sismiques). Donc, on peut

classer les premiers comme étant des paramètres de base ou élémentaires, quant aux deuxièmes, ce sont des paramètres complémentaires. Cette classification peut multiplier les modèles (méthodes) proposés dans cette étude, car le calcul de l'incertitude diffère selon qu'on utilise des formules mathématiques ou directement sans l'utilisation de ces formules.

Par interpolation linéaire, on obtient par exemple les tableaux de valeurs suivants:

Tableau (IV-1): Valeurs des paramètres correspondant aux pressions manquantes dans les deux études déterminées par interpolation linéaire.

	P(GPa)	V/V ₀	K(GPa)	Den(g/cm ³)	G(GPa)	V _p (Km/s)	V _s (Km/s)	V _φ (Km/s)
Tlili et al, 2017	5	0.977	206.99	6.83	143.34	7.62	4.58	5.50
	125	0.343	622.05	9.71	135.40	9.09	3.73	8.00
Karki et al, 1997	30	0.862	276	4.03	179.1	11.37	6.70	9.78
	50	0.81	354	4.29	208.25	12.21	6.99	10.60
	70	0.77	423	4.51	231.6	12.79	7.19	11.18
	90	0.74	498	4.70	253.15	13.36	7.35	11.74
	110	0.72	568.20	4.87	270.94	13.81	7.46	12.20
	120	0.71	601.40	4.96	279.98	14.02	7.52	12.42
	130	0.70	634	5.04	289.06	14.23	7.58	12.62
	140	0.69	666	5.11	298.18	14.42	7.63	12.81

Tableau (IV-2): Valeurs des constantes élastiques correspondant aux pressions manquantes dans les deux études calculées par interpolation linéaire

	P(GPa)	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	C ₁₃ (GPa)	C ₃₃ (GPa)	C ₆₆ (GPa)
Tlili et al, 2017	5	485.25	67.86	77.78	67.86	485.25	77.78
	125	755.56	649.26	222.07	428.60	1087.82	53.15
Karki et al, 1997	30	549	138	162	/	/	/
	50	719	171	172	/	/	/
	70	877	197	178	/	/	/
	90	1028.50	232.50	186	/	/	/
	110	1188	258	187.60	/	/	/
	120	1264	270	189.20	/	/	/
	130	1341	280.60	190.80	/	/	/
	140	1419	289.80	192.40	/	/	/

IV-1-2 Méthodes mathématiques utilisées dans la recherche du modèle:

Afin de déterminer les propriétés physiques à d'autres valeurs de pressions dans les intervalles présentés précédemment, on utilise soit l'interpolation linéaire où diverses études effectuées sur les pôles pures indiquent qu'il y a un changement linéaire entre chaque deux points proches pour la plupart des caractéristiques étudiées (Karki et al, 1997 ^[17] ; Karki et al, 2001 ^[37] ; Louail et al, 2006 ^[27]) ou par interpolation polynomiale où dans un intervalle, nous calculons le nombre de points utilisés et calculés, soit n , par un polynôme de degré $(n-1)$ c'est-à-dire:

$$P_n(x) = \sum_{i=1}^{n-1} a_i x^i \quad (\text{II} - 1)$$

On pourrait, de la même manière, prendre en compte un certain nombre de points, qui sont les plus organisés (et qui ont le même pas) soit $n > m$ pour que le polynôme utilisé devient du degré $(m-1)$:

$$P_m(x) = \sum_{i=1}^{m-1} a_i x^i \quad (\text{II} - 2)$$

Dans un autre modèle, on peut prendre la moyenne des résultats des polynômes à partir de la linéarité jusqu'au polynôme supérieur de degré $(n-1)$:

$$M_n = \left(\sum_{j=1}^{n-1} \sum_{i=0}^j a_i x^i \right) / n - 1 \quad (\text{II} - 3)$$

Comme on peut également prendre la moyenne des polynômes linéaires jusqu'au degré $m-1$, à savoir:

$$M_m = \left(\sum_{j=1}^{m-1} \sum_{i=0}^j a_i x^i \right) / m - 1 \quad (\text{II} - 4)$$

Nous avons donc cinq modèles différents et comme il existe un ensemble de paramètres complémentaires liés à d'autres paramètres de base, on peut compter cinq autres modèles où sont

utilisés les relations entre les deux types de paramètres pour déterminer l'un de l'autre, enfin, nous constatons qu'il y a au total dix modèles différents.

Afin de choisir le meilleur modèle, nous avons fixé les limites de l'intervalle des valeurs de pression entre 0 et 150 GPa selon (B. B. Karki et al, 1997) ^[17], et entre 0 et 140 GPa selon notre étude précédente (Tlili et al, 2017) ^[18] et à chaque fois nous supprimons une seule valeur et elle sera calculée selon le reste et sera comparée encore une fois à l'originale. Les valeurs sont de 5 à 125 GPa dans la première étude et de 10 à 130 GPa dans la deuxième.

Après avoir déterminé le meilleur modèle parmi les dix, on procédera au renouvellement des valeurs manquantes des propriétés étudiées entre les résultats des deux travaux pour la comparaison directe (valeur par valeur).

NOTE: on peut utiliser un grand nombre de programmes, de langages de programmation où des environnements de développement tels que Silab, Matlab qui disposent de beaucoup d'outils aménagés auparavant pour faciliter le travail surtout avec les polynômes tels que le Ployfit.

II-2 Etude des résultats et détermination du meilleur modèle:

Afin de choisir le meilleur modèle pour déterminer les valeurs manquantes des propriétés étudiées, on utilise un nombre de points identiques et non-identiques de sorte qu'ils soient déterminés en utilisant l'incertitude relative entre les valeurs calculées et les valeurs réelles avec une précision critique de 1 % entre les deux types de points. En d'autres termes, on procédera de manière comparative et statistique entre les différentes valeurs des paramètres obtenues à partir de ces modèles et celui qui présente le meilleur compromis sera choisi parmi les autres.

Pour chaque modèle, il y a 205 points étudiés où pour l'oxyde de fer FeO, sont étudiés treize paramètres dans la structure hexagonale qui se répètent à la faveur de cinq valeurs de pression, c'est-à-dire 65 points différents, et dans la structure cubique, sont étudiés dix paramètres répétés à la faveur de six valeurs de pression, c'est-à-dire, il y a 60 points différents, ainsi, sont étudiés 125 points dans le cas de cet oxyde. Il reste 80 points relatifs à l'oxyde de magnésium MgO, divisés pour le même nombre de paramètres de la structure cubique du FeO, c'est-à-dire dix paramètres pour huit valeurs de pression.

Tableau (IV-3): Valeurs des nombres des points identiques et non-identiques pour P P (paramètres principales; V/V_0 , c_{ij} et K) et P C (paramètres complémentaires; densité, G , V_P , V_S et V_f) des deux phases de FeO et MgO des résultats de dix modèles de calcul.

		Nombre des points identiques		Nombre des points non-identiques	
		P P	P C	P P	P C
M1	FzO B1	5	5	25	25
	FeO B8	0	1	40	24
	MgO	5	4	35	36
M2	FzO B1	12	20	18	10
	FeO B8	10	17	26	12
	MgO	23	20	7	30
M3	FzO B1	12	20	18	10
	FeO B8	10	17	26	12
	MgO	32	35	7	6
M4	FzO B1	17	30	13	0
	FeO B8	25	18	15	7
	MgO	30	28	10	12
M5	FzO B1	17	30	13	0
	FeO B8	25	18	15	7
	MgO	36	29	4	11
M6	FzO B1	5	4	25	26
	FeO B8	0	1	40	24
	MgO	5	5	35	35
M7	FzO B1	12	15	18	15
	FeO B8	10	18	26	11
	MgO	23	26	7	24
M8	FzO B1	12	20	18	10
	FeO B8	10	17	26	12
	MgO	32	39	7	2
M9	FzO B1	17	24	13	6
	FeO B8	25	20	15	5
	MgO	30	36	10	4
M10	FzO B1	17	24	13	6
	FeO B8	25	20	15	5
	MgO	36	34	4	6

Les figures (IV-1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 et 11) traduisent avec précision les résultats de cette comparaison entre les différents modèles.

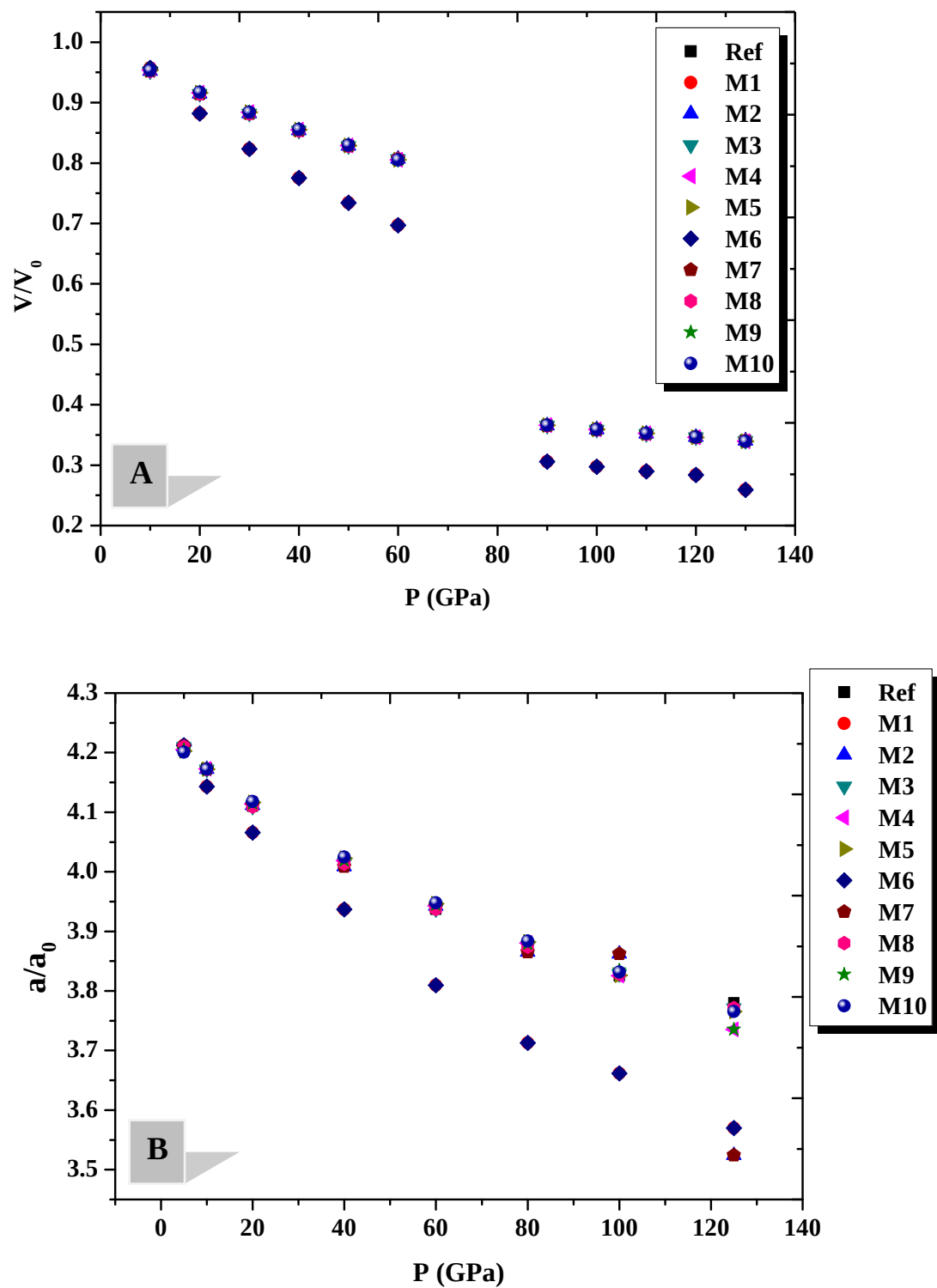


Figure (IV-1): Représentation des résultats des dix modèles proposés concernant: A- V/V_0 de FeO et B- a/a_0 de MgO en fonction de la pression.

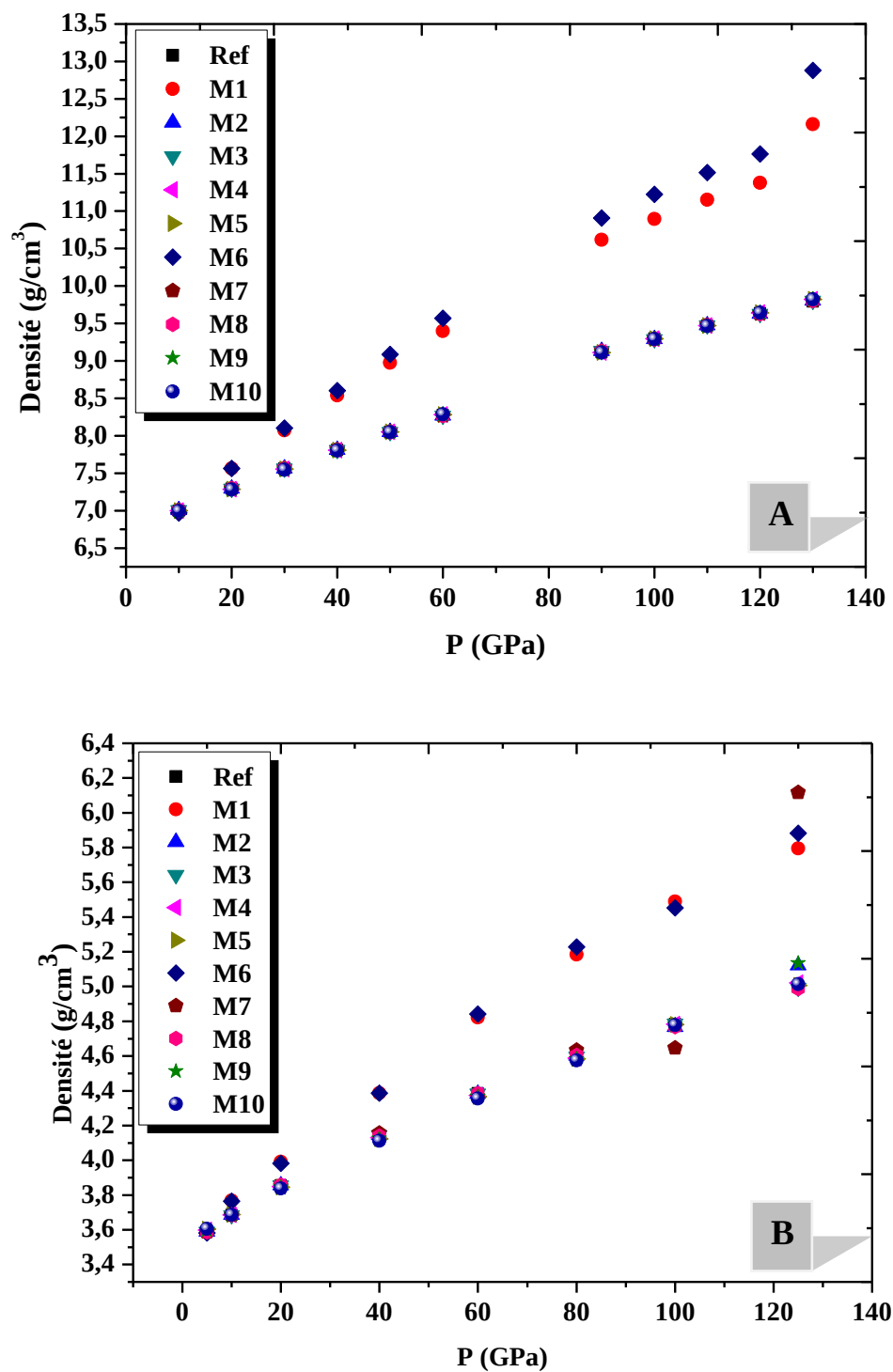


Figure (IV-2): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les densités en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

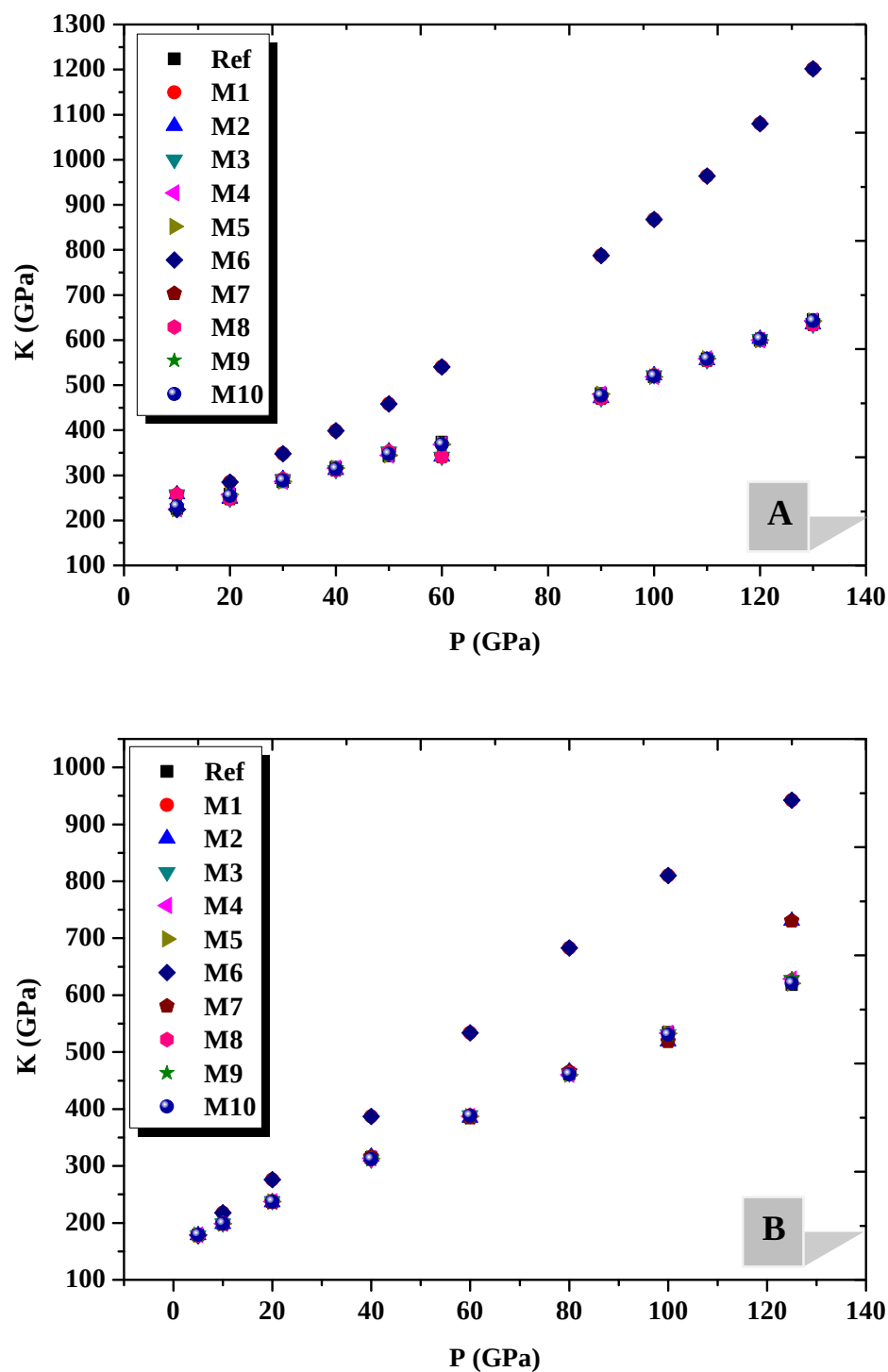


Figure (IV-3): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les modules d'incompressibilité K en fonction de la pression concernant; A- FeO, B- MgO.

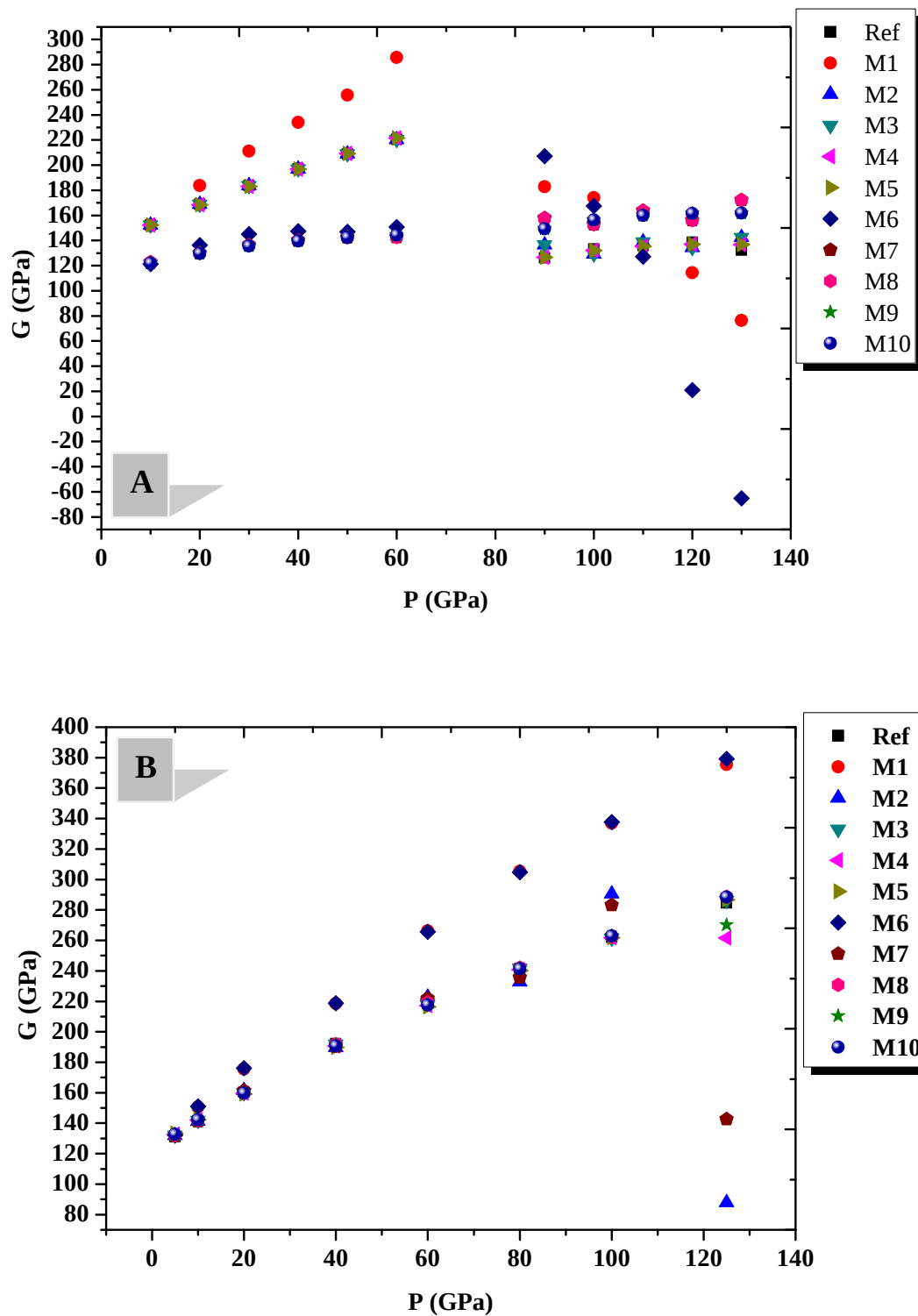


Figure (IV-4): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les modules de cisaillement G en fonction de la pression concernant; A- FeO, B- MgO.

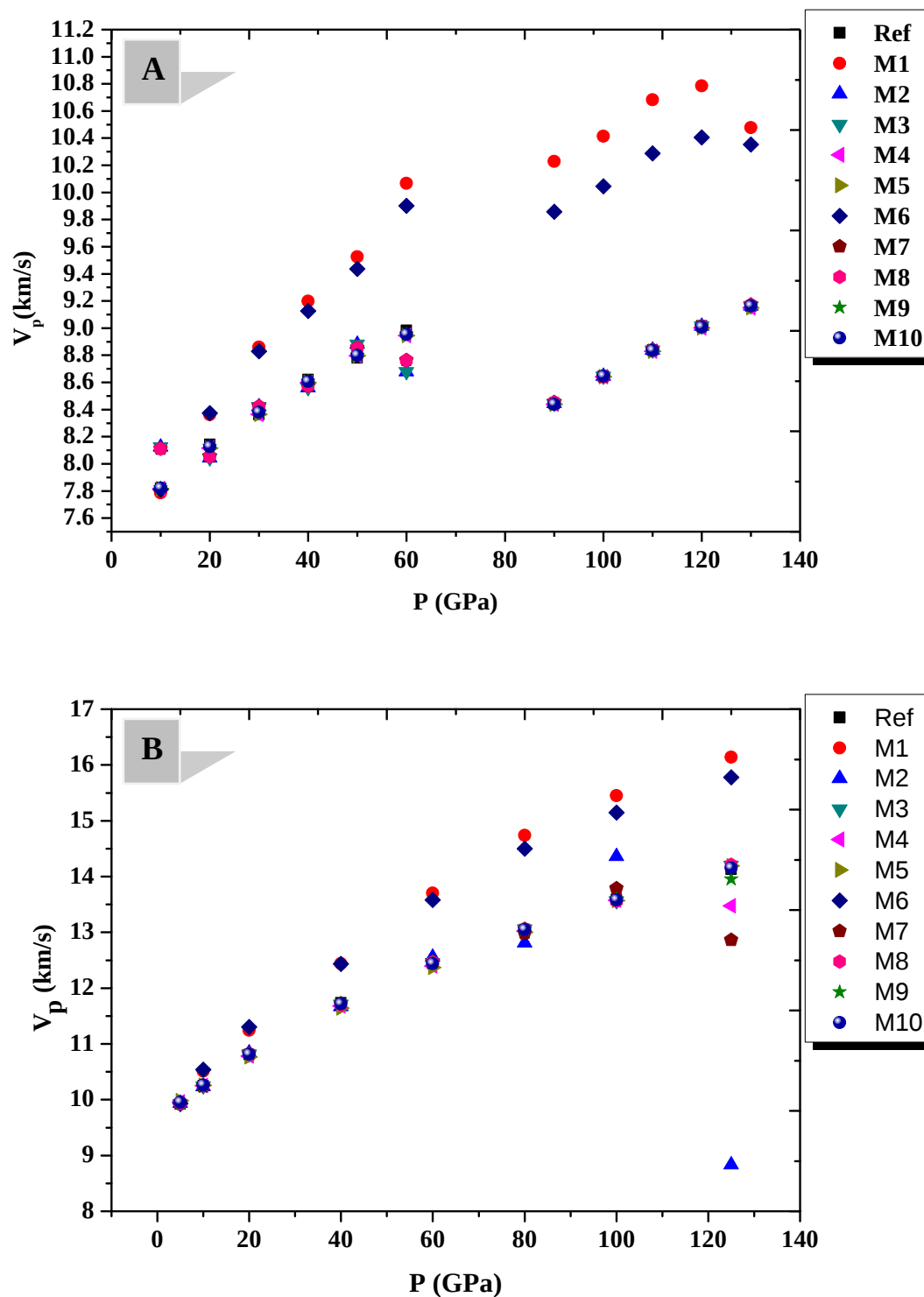


Figure (IV-5): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses longitudinales V_p en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

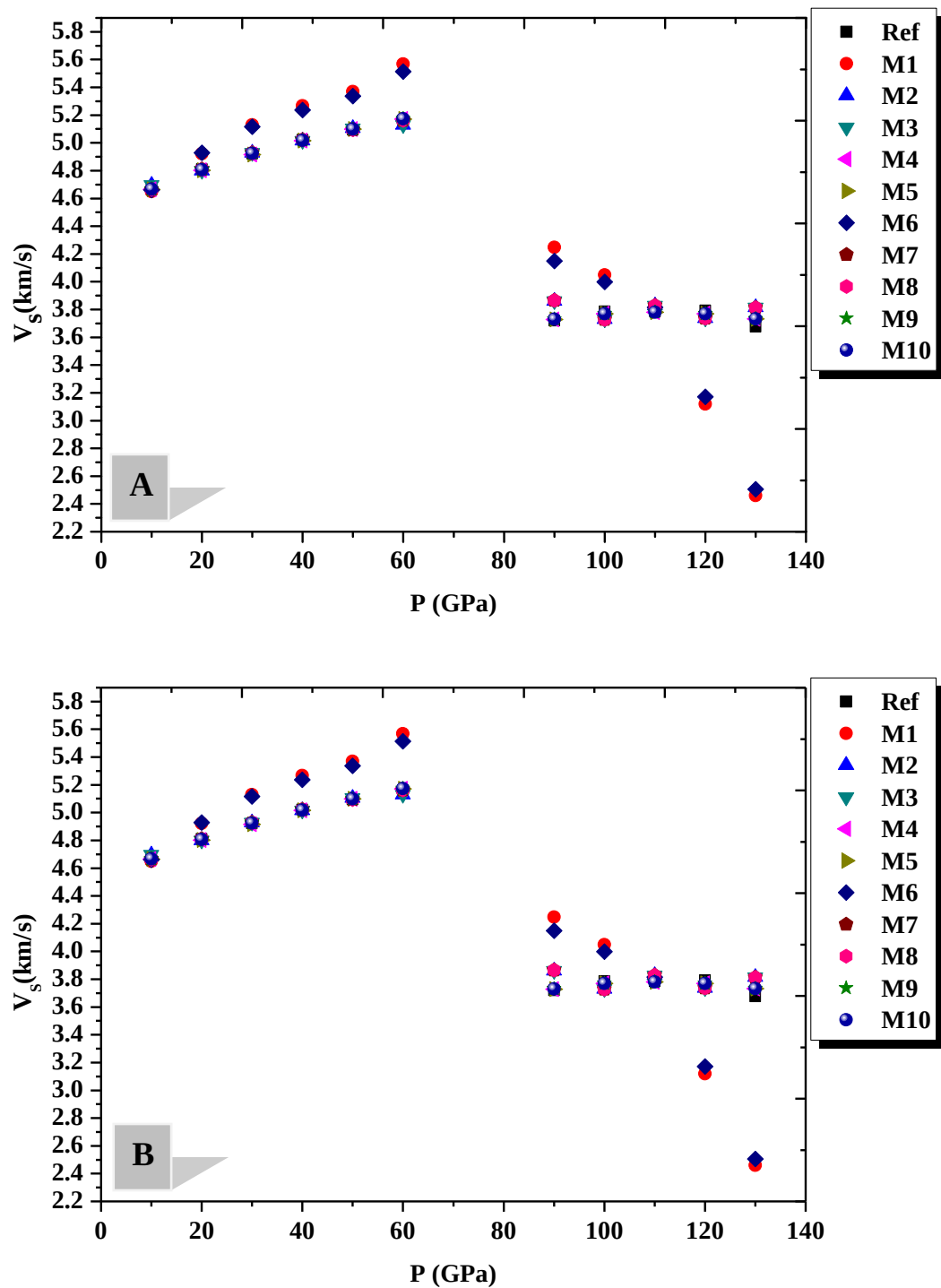


Figure (IV-6): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses transversales V_s en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

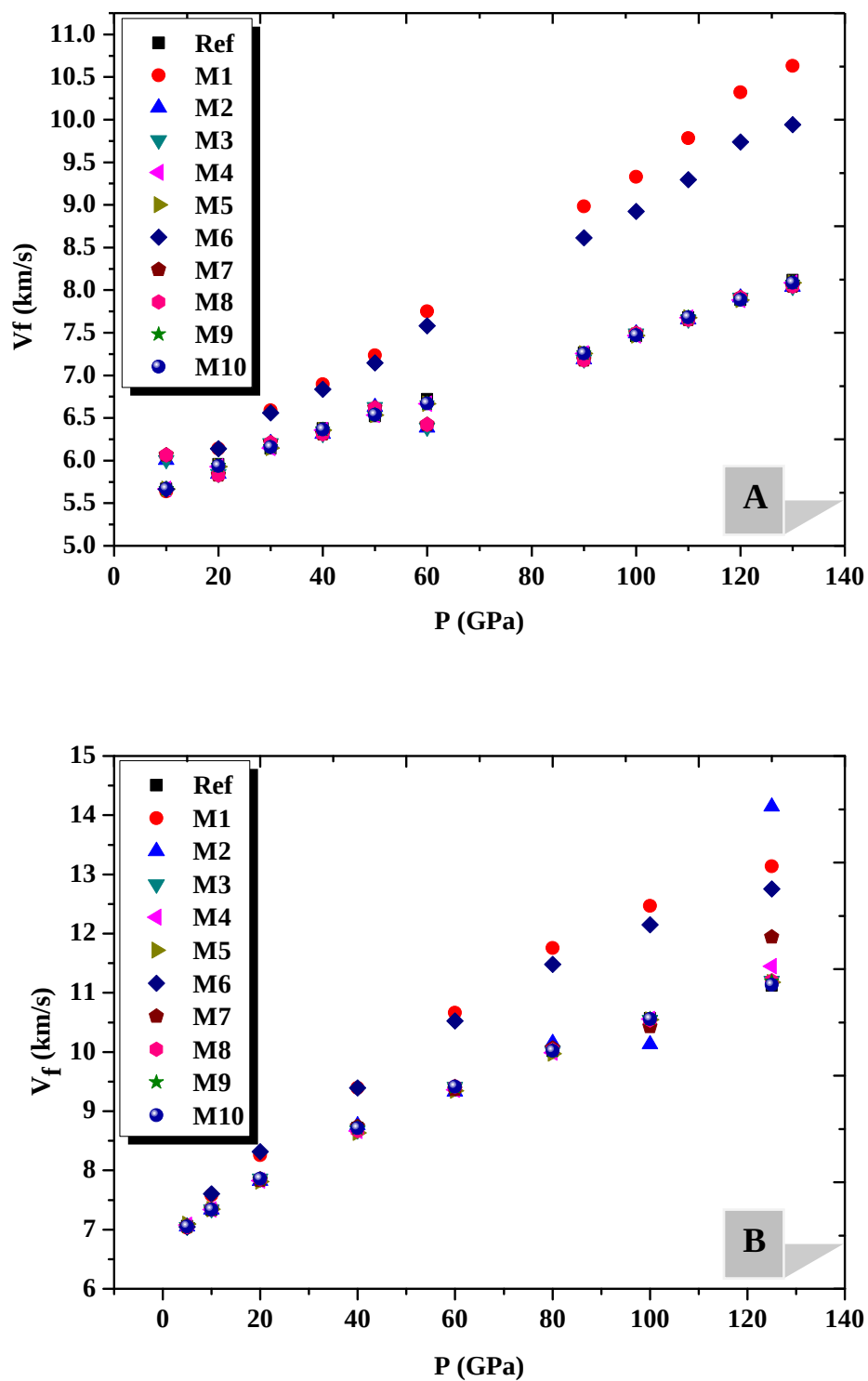


Figure (IV-7): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les vitesses hydrodynamiques V_f en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

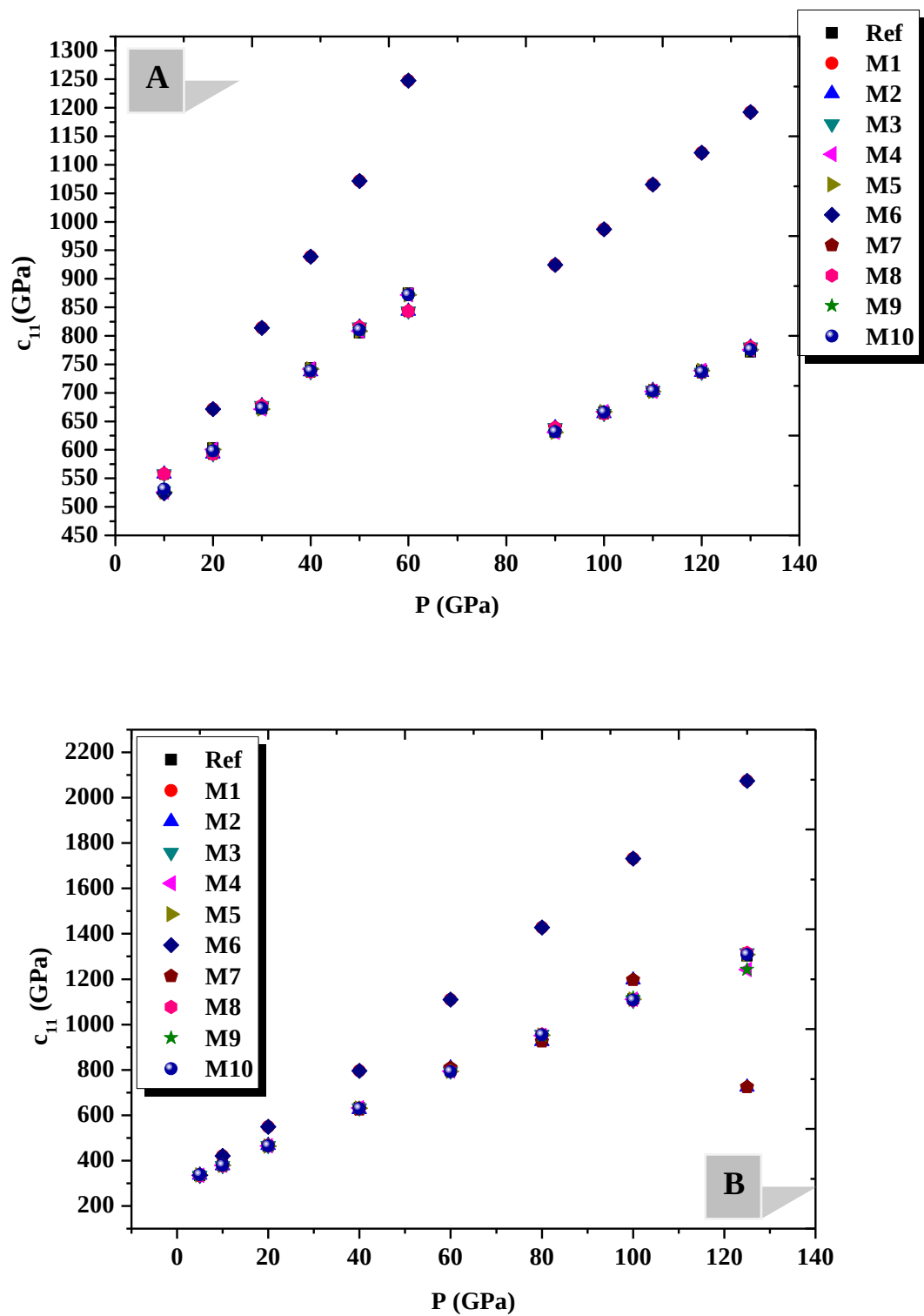


Figure (IV-8): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constantes élastiques longitudinales c_{11} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

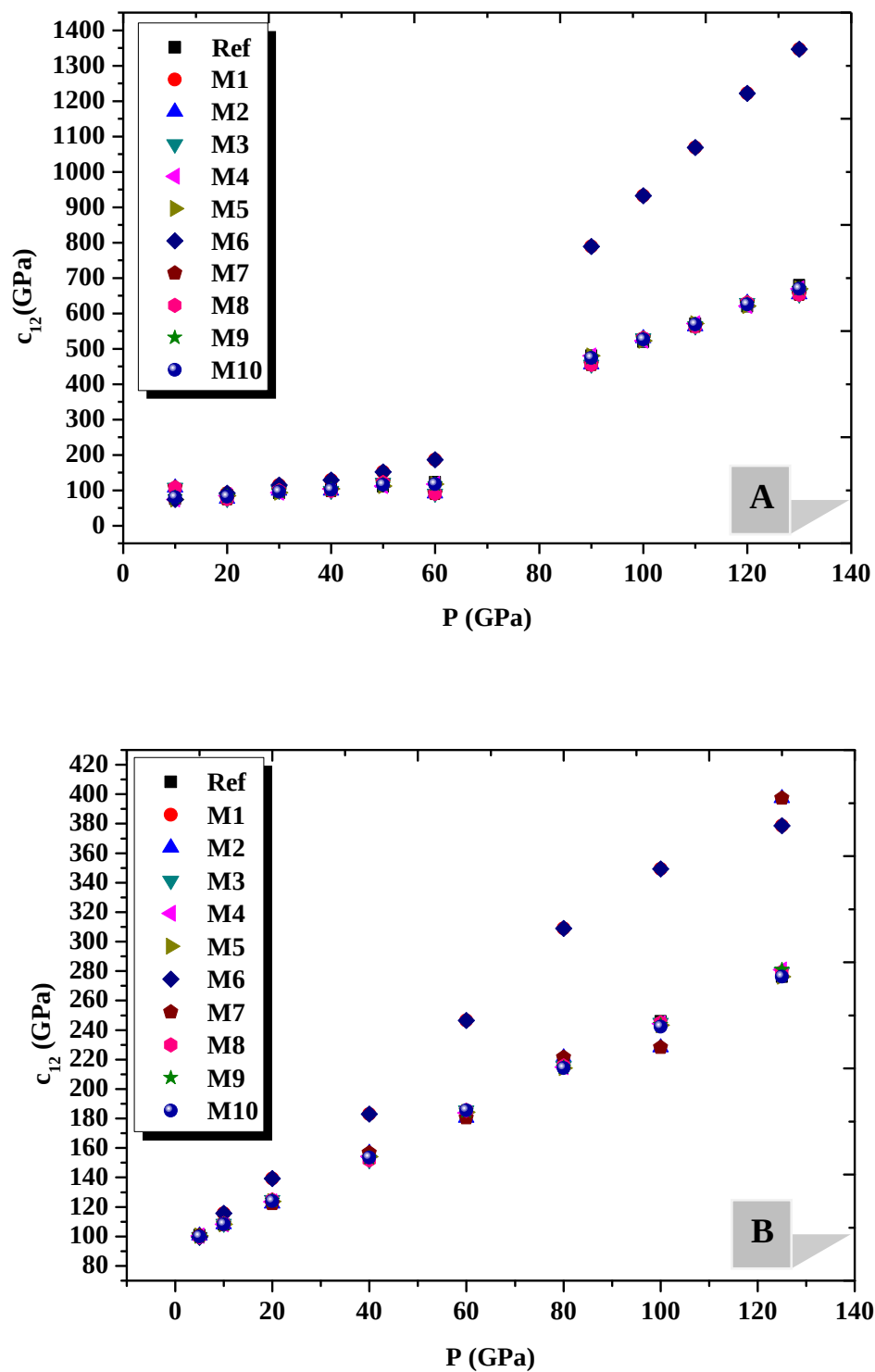


Figure (IV-9): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constantes élastiques au loin-diagonal c_{12} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

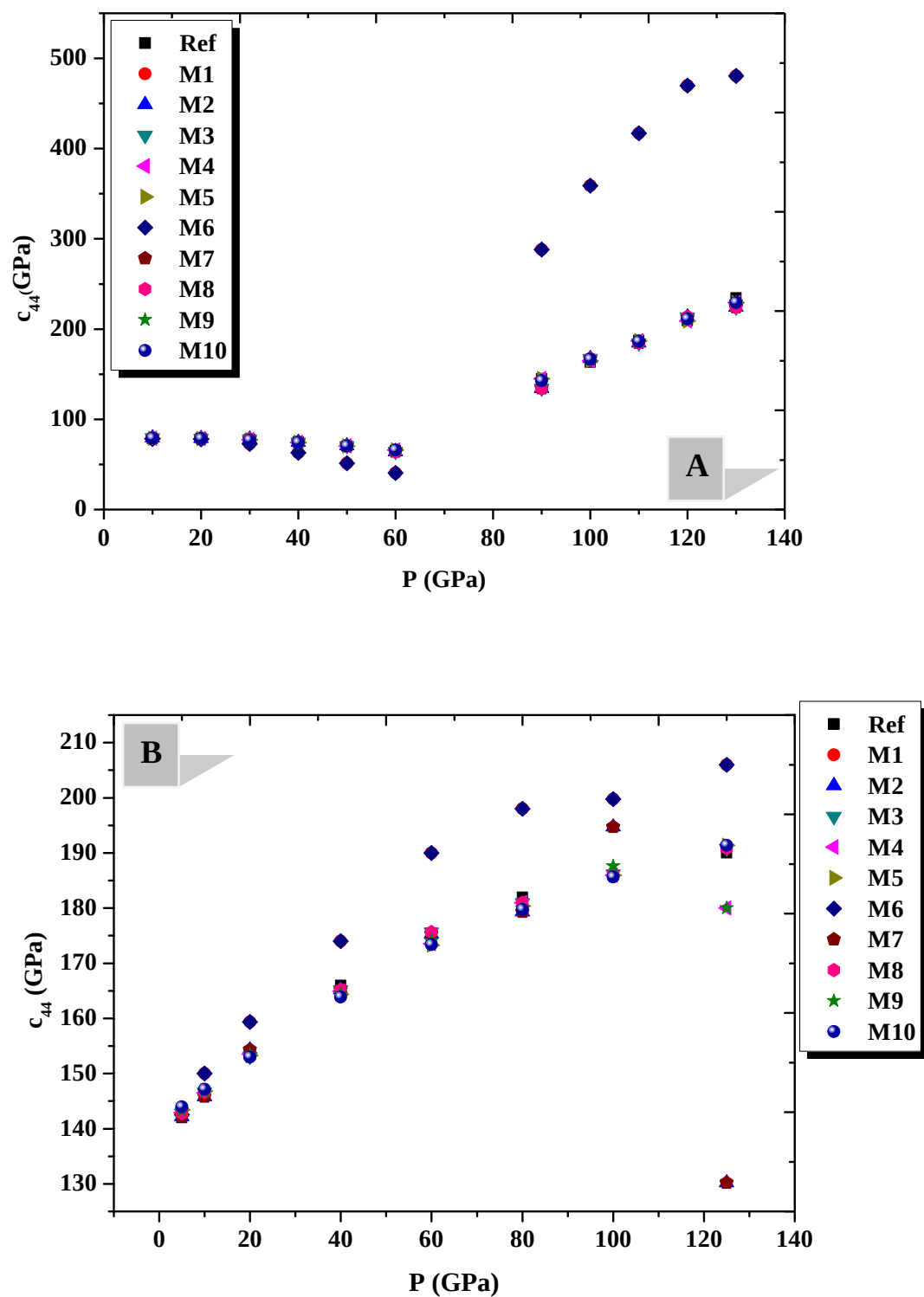


Figure (IV-10): Représentation des résultats des dix modèles proposés pour les constantes élastiques de cisaillements c_{44} en fonction de la pression concernant: A- FeO, B- MgO.

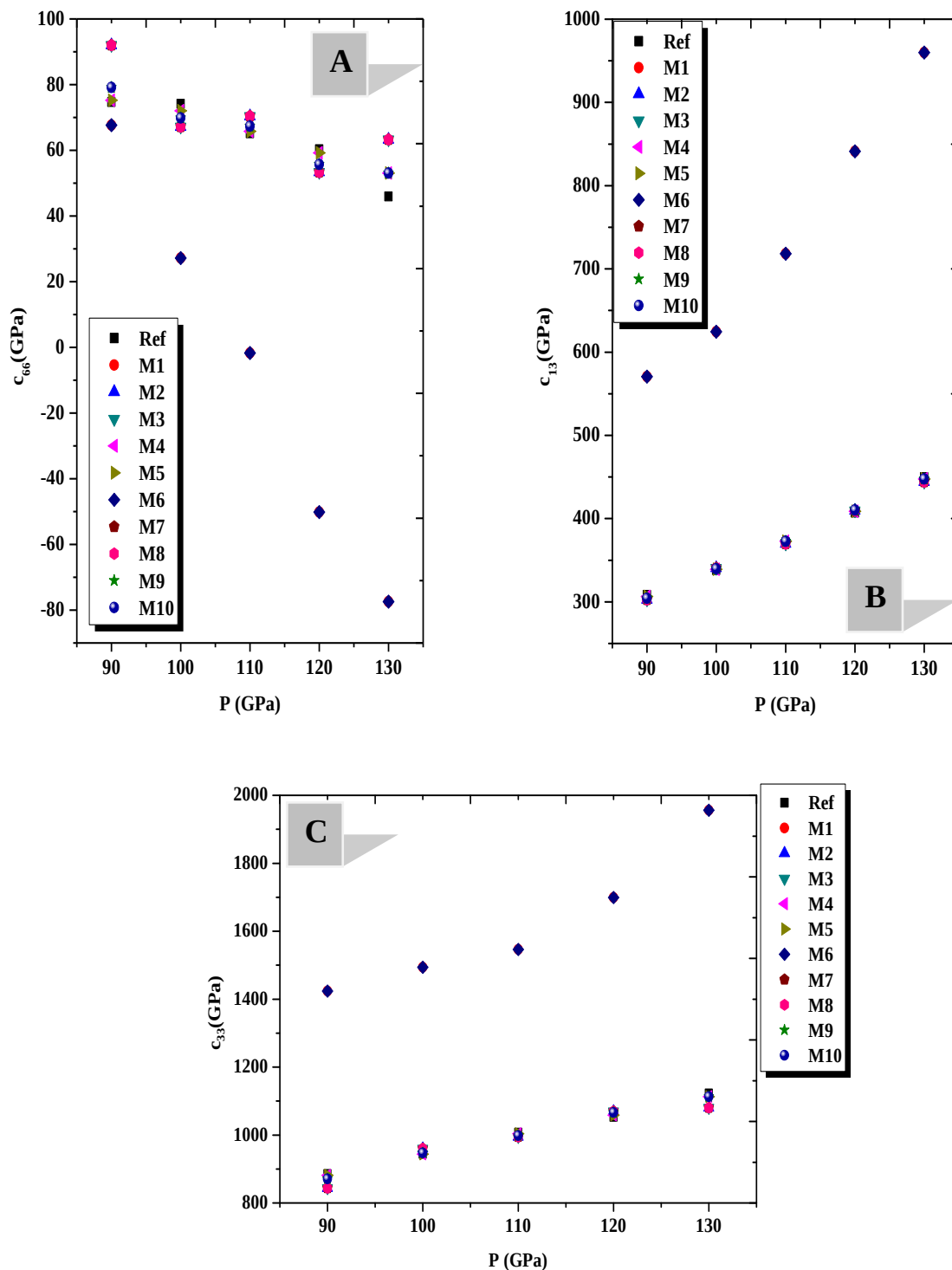


Figure (IV-11): Représentation des résultats des dix modèles proposés concernant le FeO et pour les constantes élastiques: (A) longitudinal c_{33} , (B) au loin-diagonal c_{13} (C) cisaillement c_{66} en fonction de la pression.

1- L'étude du premier modèle:

Le premier modèle donne des valeurs dont la différence avec les valeurs réelles augmente à chaque fois que la valeur de la pression augmente et ne correspond qu'à la pression de 10 GPa dans le cas de FeO ou 5 GPa dans le cas de MgO dans sa majorité.

Dans le cas de FeO, il y a 11 points identiques seulement; dont un seul appartenant à la structure hexagonale où la valeur de l'écart relatif est estimée à $89.8 \times 10^{-2} \%$ (V_s , 110 GPa), tandis que les points identiques sont répartis à parts égales entre les deux types de paramètres en phase cubique et les écarts relatifs correspondants sont limités entre les deux pourcentages $28.1 \times 10^{-2} \%$ (C_{44} , 10 GPa) et $61.8 \times 10^{-2} \%$ (C_{12} , 10 GPa) pour les paramètres de base, et entre $22.0 \times 10^{-2} \%$ (D , 10 GPa) et $57.3 \times 10^{-2} \%$ (V_f , 10 GPa) pour les paramètres complémentaires. Dans le cas du MgO, il y a 9 points identiques, y compris 5 paramètres de base dont les taux d'écarts relatifs se situent entre $17.3 \times 10^{-3} \%$ (V/V_0 , 5 GPa) et $0.719 \times 10^{-2} \%$ (V/V_0 , 10 GPa), et le reste sont des paramètres complémentaires avec des taux d'écart relatif entre $50.4 \times 10^{-3} \%$ (V_p , 5 GPa) et $42.5 \times 10^{-2} \%$ (V_f , 5 GPa) où le premier taux représente le point le plus applicable dans ce modèle.

Ainsi, il y a 185 points non-identiques; dont 50 points relatifs à la phase cubique FeO, répartis à parts égales entre les deux types de paramètres. Pour les paramètres de base, leurs taux sont entre 1.783% (C_{44} , 20 GPa) et 50.930% (C_{12} , 60 GPa) et pour les autres paramètres, ils sont entre 2.340% (V_s , 20 GPa) et 29.563% (G , 60 GPa). Dans la phase hexagonale, il y a 40 et 24 de chaque type de paramètres, respectivement. Concernant les paramètres de base, les écarts se situent entre 9.370% (C_{66} , 90 GPa) et 268.340% (C_{66} , 130 GPa) et ce dernier représente le point le plus éloigné. Et pour les paramètres complémentaires, ils se situent entre 6.913% (V_s , 100 GPa) et 44.944% (G , 90 GPa). Il y a aussi 35 et 36 pour chaque type de paramètres pour MgO, où les pourcentages des valeurs des paramètres sont limités entre 1.079% (V/V_0 , 20 GPa) et 59.332% (C_{11} , 125 GPa) et les valeurs des paramètres complémentaires entre 2.234% (D , 10 GPa) et 31.95% (G , 125 GPa).

2- L'étude du deuxième modèle:

Pour le deuxième modèle, il y a au total 102 points identiques, dont 59 relatifs au FeO et 43 relatifs au MgO. La phase cubique du FeO possède 32 points identiques dont 12 relatifs aux paramètres de base avec un taux d'écart qui se situe entre $18 \times 10^{-3} \%$ (V/V_0 , 30 GPa) et $93.7 \times$

10^{-2} % (c_{11} , 30 GPa), et les valeurs qui restent sont des paramètres complémentaires se situant entre 12×10^{-3} % (G, 40 GPa) et 70.6×10^{-2} % (V_s , 10 GPa). Dans la phase hexagonale du FeO, le taux d'écart de ses valeurs se situe entre 47×10^{-3} % (V/V_0 , 110 GPa) et 83.2×10^{-3} % (c_{66} , 100 GPa) pour le premier type de paramètres, et entre 7×10^{-3} % (V_p , 110 GPa) et 43.6×10^{-2} % (V_f , 100 GPa) pour le deuxième type de paramètres, où le premier pourcentage représente le point le plus identique dans ce modèle en faveur de ce type de paramètres.

Pour le deuxième oxyde et pour chaque type de paramètres, les taux d'écart des points identiques se situent respectivement entre 17×10^{-3} % (V/V_0 , 10 GPa) et 97.6×10^{-2} % (V/V_0 , 100 GPa), et entre 9×10^{-3} % (D, 10 GPa) et 93.5×10^{-2} % (V_p , 60 GPa). A noter que le nombre de points identiques augmente pour les paramètres de base de trois points par rapport aux paramètres complémentaires qui ont le même nombre dans la première phase de l'oxyde de fer.

Les points non-identiques qui sont en nombre de 66 relatifs au FeO, dont 28 relatifs à la phase B1, et 18 d'entre eux relatifs aux paramètres de base dont les pourcentages des valeurs se trouvent entre 1.302 % (c_{11} , 50 GPa) et 44.611 % (c_{12} , 10 GPa). Le pourcentage des valeurs du reste qui est relatif aux paramètres complémentaires sont entre 1.052 % (V_f , 40 GPa) et 4.990 % (60 GPa) pour le dernier paramètre. Pour la phase B8, Il y a 26 points relatifs au premier type de paramètre dont les pourcentages des valeurs sont limités entre 1.119 % (c_{11} , 130 GPa) et 37.735 % (c_{66} , 130 GPa), et entre 1.002 % (V_f , 130 GPa) et 8.196 % (G, 90 GPa) les pourcentages des valeurs des points restants relatifs au deuxième type de paramètres.

En ce qui concerne le deuxième oxyde qui possède 37 points non-identiques et en se basant sur le même ordre du type de paramètres dont les taux des écarts relatifs se situent entre 1.048 % (c_{12} , 40 GPa) et 44.343 % (c_{11} , 125 GPa) et entre 1.363 % (V_f , 80 GPa) et 672.386 % (V_s , 125 GPa) et le dernier taux représente le point le plus éloigné de ce modèle.

3- L'étude du troisième modèle:

Pour ce modèle, il y a une concordance en nombre et en valeurs de tous les points identiques et non-identiques avec la deuxième modèle concernant le FeO pour les deux types de paramètres, même pour le point le plus éloigné.

Quant au MgO, les nombre de points identiques est supérieur de neuf points par rapport au deuxième modèle pour ce qui est des paramètres de base dont les taux sont entre 13×10^{-3} % (V/V_0 , 60 GPa) et 95.5×10^{-2} % (c_{44} , 60 GPa). Les points non-identiques diminuent du même

nombre, car ils sont entre 1.107 % (K, 40 GPa) et 2.047 % (c_{12} , 40 GPa). Concernant les paramètres complémentaires, ils augmentent aussi de 15 points identiques et diminuent du même nombre en faveur des points non-identiques, ils se situent respectivement entre 3×10^{-3} % (D, 80 GPa) qui représente le point le plus identique et 87.7×10^{-2} % (V_s , 60 GPa), et entre 2.098 % (V_s , 60 GPa) et 7.647 % (V_s , 125 GPa).

4- L'étude du quatrième modèle:

Pour le quatrième modèle et en ce qui concerne l'Oxyde de Magnésium et pour les paramètres de base, il y a 30 points identiques qui se situent entre 10^{-2} % (K, 80 GPa) et 93.1×10^{-2} % (c_{44} , 40 GPa), et pour les paramètres complémentaires, il y a 28 points identiques dont les écarts oscillent entre 11×10^{-3} % (V_p , 10 GPa) et 94.8×10^{-2} % (G, 80 GPa).

Pour l'oxyde de fer dans la première phase, et pour les paramètres de base, il y a 17 points identiques dont les taux sont entre 29×10^{-3} % (V/V_0 , 10 GPa) et 98.4×10^{-2} % (c_{44} , 30 GPa), pour d'autres paramètres, il y a 30 points identiques dont le taux est situé entre 11×10^{-3} % (D, 10 GPa) et 96.2×10^{-2} % (V_f , 20 GPa). Dans la deuxième phase de cet oxyde et selon l'ordre précédent dans le type de paramètres, il y a respectivement 25 et 18 points identiques, et leur taux est entre 18×10^{-3} % (V/V_0 , 90 GPa) et 97.9×10^{-2} % (K, 90 GPa) et entre 10^{-2} % (D, 90 GPa) et 82.7×10^{-2} % (V_s , 100 GPa). Le premier pourcentage représente le point le plus identique dans ce modèle.

Quant aux points non-identiques de ce modèle, leur nombre pour le MgO est de 22 points. Les taux de ses valeurs sont limités entre 1.035 % (c_{12} , 100 GPa) et 5.251 % (c_{44} , 125 GPa) et entre 1.013 % (V_s , 10 GPa) et 78.945 % (V_s , 125 GPa) en 10 points pour les paramètres de base et les restants pour les paramètres complémentaires respectivement, où le dernier taux représente le point le plus éloigné de ce modèle. Avec le même nombre dans le cas de FeO dans sa phase hexagonale, ses taux varient entre 1.054 % (c_{12} , 120 GPa) et 7.656 % (c_{66} , 120 GPa) et entre 1.051 % (V_s , 90 GPa) et 3.511 % (G, 130 GPa) respectivement toujours pour 15 points de paramètres de base et le reste pour les paramètres complémentaires, tandis que leur nombre dans sa phase cubique est de 13 points dont ses taux sont entre 1.051 % (c_{44} , 20 GPa) et 7.892 % (c_{12} , 10 GPa) seulement relatifs aux paramètres de base.

5- L'étude du cinquième modèle:

Pour le cinquième modèle et pour l'Oxyde de Magnésium et les paramètres de base, il y a une augmentation de six points identiques par rapport à la modèle précédent, leur taux est entre $26 \times 10^{-3} \%$ (V/V_0 , 10 GPa) et $95.6 \times 10^{-2} \%$ (c_{12} , 5 GPa); et une diminution du même ordre dans le nombre de points non-identiques dont les écarts se limitent entre 1.228 % (c_{44} , 80 GPa) et de 1.526 % (c_{12} , 100 GPa). Pour les paramètres complémentaires, il y a une augmentation d'un seul point identique par rapport au nombre précédent où les taux d'écarts se situent entre $78 \times 10^{-3} \%$ (D , 10 GPa) et $77.49 \times 10^{-2} \%$ (G , 80 GPa), et une diminution du même ordre dans le nombre de points non-identiques, où ses taux sont entre 1.047 % (V_p , 40 GPa) et 4.263 % (V_s , 5 GPa).

Le cinquième modèle est en concordance avec le quatrième modèle en nombre et en valeurs des points identiques et non-identiques de l'Oxyde de Fer dans tous les paramètres et dans toutes ses phases, et il est également en concordance pour le point le plus identique, mais il prend un point différent moins écarté de celui montré dans le quatrième modèle et c'est le point avec un pourcentage de 15.438 % (c_{66} , 130 GPa).

6- L'étude du sixième modèle:

Pour le sixième modèle qui est conforme au premier modèle où tous les points sont parfaitement correspondants pour les paramètres de base, de sorte que le point non-identique supérieur est le même pour les deux oxydes dans ce cas, mais le pourcentage $17.3 \times 10^{-3} \%$ (V/V_0 , 5 GPa) relatif à l'Oxyde de Magnésium est le point le plus identique dans ce modèle.

Pour les paramètres complémentaires, le nombre de points identiques est inférieur d'un point pour l'Oxyde de Fer et supérieur d'un point pour l'Oxyde de Magnésium par rapport toujours au premier modèle, et le contraire pour les points non-identiques. Les taux d'écart des valeurs identiques sont entre $11.6 \times 10^{-2} \%$ (V_s , 10 GPa) et $42 \times 10^{-2} \%$ (D , 10 GPa) en faveur de la phase B1. L'oxyde de fer dans sa phase B8 présente une seule valeur dont le taux d'écart est estimée à $78 \times 10^{-2} \%$ et concerne le même paramètre et à la même pression du premier modèle, et entre $11.8 \times 10^{-2} \%$ à la même pression et qui concerne le même paramètre comme le premier modèle et $62.8 \times 10^{-2} \%$ (G , 5 GPa) en faveur de MgO. Les pourcentages des valeurs des points non-identiques entre 2 % et 33.266 % de l'Oxyde de Magnésium, 2.479 % et 31.696 % dans la structure cubique d'Oxyde de Fer, entre 5.577 % et 149.369 % dans la structure hexagonale de cette matière. En préservant la même pression et pour le même paramètre déjà mentionné sauf

pour la dernière valeur qui apparaît à la pression 130 GPa. Donc, tout simplement, on peut annuler l'usage de ce modèle ainsi que le premier, en raison du très grand nombre de points non-identiques et ses taux qui sont très considérables.

7- L'étude du septième modèle:

Le septième modèle est en concordance avec le deuxième modèle dans le nombre et les valeurs des points identiques et non-identiques pour les des deux oxydes dans tous les paramètres de base, tandis que pour les paramètres complémentaires le nombre des points identiques de l'Oxyde de Magnésium augmentent de six points, et ce nombre est inférieur pour l'autre oxyde avec cinq points dans la première phase, par contre, dans la deuxième phase, il augmente seulement d'une seule valeur, et c'est tout à fait le contraire pour les points non-identiques, et cela pour les deux oxydes. Les taux d'écarts relatifs se situent entre $3 \times 10^{-3} \%$ (V_s , 40 GPa) et $86.3 \times 10^{-2} \%$ (V_p , 50 GPa) et 1.023% (V_f , 40 GPa) et 35.318% (G, 60 GPa) pour les points identiques et non-identiques pour la phase B1 de FeO, et entre 0.036% (V_p , 110 GPa) et 0.920% (V_f , 130 GPa) et entre 1.111% (V_s , 110 GPa) et 30.266% (G, 130 GPa) pour les mêmes points toujours pour la phase B8 de la même matière. Et entre 0.003% (D, 10 GPa) et 0.988% (V_s , 60 GPa) où le premier taux représente le point le plus identique et des taux entre 1.073% (G, 40 GPa) et 49.840% (G, 125 GPa) pour les mêmes points, et respectivement toujours avec la deuxième matière, où le dernier taux représente le taux le plus éloigné dans ce modèle.

8- L'étude du huitième modèle:

Pour le huitième modèle, il est en concordance en nombre de points et identiques et non-identiques de l'oxyde de fer pour les paramètres de base avec le deuxième, le troisième et le septième modèle. En regardant le point le plus éloigné, il est aussi en concordance avec le troisième modèle juste pour les mêmes paramètres de l'Oxyde de Magnésium, et avec seulement le septième modèle pour les paramètres complémentaires dans le premier oxyde (FeO) et pour les mêmes paramètres et dans le deuxième oxyde.

Le nombre de points identiques augmente de quatre points par rapport à son nombre dans le troisième modèle. Les taux d'écart varient entre $10^{-3} \%$ (D, 10 GPa) représentant le plus de points identiques et $77.1 \times 10^{-2} \%$ (V_f , 125 GPa), alors que le nombre de points non-identiques diminue du même taux pour représenter un seul point avec un pourcentage de 1.462% (G, 125

GPa). Ces deux modèles présentent un certain nombre de points qui sont très éloignés, ce qui constitue une raison suffisante pour les annuler et ne pas les utiliser.

9- L'étude du neuvième modèle:

Pour le neuvième modèle, elle est en concordance avec la quatrième modèle en nombre et en valeurs des points identiques et non-identiques des deux oxydes pour tous les paramètres de base, tandis que pour les paramètres complémentaires, le nombre des points identiques relatifs à l'Oxyde de Magnésium augmente de huit points. Ce nombre est inférieur par rapport à l'autre oxyde avec six points dans sa première phase, dans sa deuxième phase, il augmente seulement de deux points. Et c'est tout à fait le contraire pour les points d'espacement, et pour les deux oxydes également. Les taux d'écart des valeurs se situent entre 19.906 % (G, 10 GPa) et 34.581 % (G, 90 GPa), où le dernier taux représente le point le plus éloigné pour ce modèle. Pour les paramètres de base et pour l'oxyde de fer dans sa structure B1, les taux d'écart sont entre 19×10^{-3} % (D, 50 GPa) et 77.4×10^{-2} % (V_f , 60 GPa) pour les points non-identiques et pour les points identiques sont entre 1.575 % (V_s , 130 GPa) et 22.456 % (G, 130 GPa), alors que pour la la phase B8, ils varient entre 6×10^{-3} % (V_p , 100 GPa) et 42.0×10^{-2} % (V_f , 130 GPa) pour les mêmes points. Quant à l'oxyde de magnésium, les taux d'écart sont entre 1.268 % (V_p , 125 GPa) et 5.019 % (G, 125 GPa) et entre 8×10^{-4} % (V_p , 80 GPa) et 73.8×10^{-2} % (G, 5 GPa) où le premier taux représente le point le plus identique dans ce modèle.

10- L'étude du dixième modèle:

Le dixième modèle est en concordance avec le quatrième, le cinquième et le neuvième modèle en nombre de points identiques et non-identiques de l'Oxyde de Fer, et avec le cinquième seulement pour les mêmes paramètres de l'Oxyde de Magnésium, et avec le neuvième modèle uniquement pour les taux de paramètres complémentaires dans le premier oxyde et pour les mêmes paramètres et dans le deuxième oxyde. Le nombre de points identiques augmente de cinq points par rapport au cinquième modèle où les taux d'écart varient entre $10^{-3}\%$ (V_p , 60 GPa) et $79.9 \times 10^{-2}\%$ (G, 40 GPa) où le premier représente le point le plus identique, tandis que le nombre de points éloigné diminue.

En conclusion: De ce qui a précédé, il est évident que le quatrième modèle est le plus fiable en raison du nombre de points identiques qui dépassent le nombre dans le cinquième modèle, une différence qui peut être mise à l'écart contre la déviation claire causée par les valeurs du quatrième modèle dans les paramètres de la pression 125 GPa dans le cas du MgO et de cette manière le cinquième modèle est choisi afin de déterminer avec plus de précision les valeurs manquantes.

IV-3 La comparaison entre le modèle choisi et la méthode linéaire:

Par l'application du cinquième modèle, d'autres valeurs de pression manquantes sont ajoutées aux valeurs des paramètres étudiés dans les travaux précédemment mentionnés à des et par comparaison aux valeurs trouvées par interpolation linéaire dans les tableaux (IV-1 et IV-2), on observe:

- Dans le cas de la phase cubique du FeO, des valeurs sont ajoutées pour la pression 5 GPa. La tolérance proportionnelle minimale apparaît pour la densité ρ ($14 \times 10^{-2} \%$) et la tolérance maximale apparaît pour la constante élastique au loin-diagonale c_{12} ($88 \times 10^{-2} \%$). Dans la phase hexagonale les valeurs sont ajoutées pour la pression 125 GPa de sorte que sa tolérance proportionnelle pour toutes les propriétés est moins que la pression précédente toujours. Sa valeur minimale apparaît pour la constante élastique au loin-diagonale c_{12} ($10^{-2} \%$) et la maximale apparaît dans la constante élastique de cisaillement c_{44} à ($22 \times 10^{-2} \%$).
- Quant au MgO, des valeurs sont ajoutées pour les pressions:
 - 30 GPa où les tolérances maximales apparaissent dans la constante élastique de cisaillement c_{44} (1.82 %), la densité ρ ($96 \times 10^{-2} \%$) et la vitesse de cisaillement V_s (1.30 %). Quant à sa valeur minimale elle est dans la constante élastique longitudinale c_{11} à la valeur $24 \times 10^{-2} \%$ et le maximal est dans le module élastique de cisaillement G à 2.32 %.
 - 50 GPa où les tolérances maximales apparaissent aux taux de changement de volume V/V_0 (1.81 %), dans la constante élastique longitudinale c_{11} ($98 \times 10^{-2} \%$), le module d'incompressibilité K (1.06 %), le module élastique de cisaillement G (2.34 %). La tolérance maximale à toutes les pressions et dans tous les cas de comparaison apparaissent dans la vitesse longitudinale V_p (1.53 %) et la vitesse hydrodynamique V_t (1.65 %). Quant à sa valeur minimale, elle est dans la densité ρ (0.95 %).

- 70 GPa la tolérance minimale apparaît dans le module d'incompressibilité K ($25 \times 10^{-2} \%$) et la maximale dans le module élastique de cisaillement G (1.37%) et à 90 GPa la tolérance maximale est dans la constante élastique de cisaillement c_{44} (1.56%) et sa tolérance minimale dans la constante longitudinale c_{11} ($24 \times 10^{-2} \%$) ainsi elle y apparaît une valeur de tolérance maximale spécifique de la constante élastique au loin-diagonal c_{12} (1.45%).
- 110 GPa où la plupart des tolérances sont minimales dans les propriétés : le taux de variation de volume V/V_0 ($15 \times 10^{-2} \%$), la constante élastique longitudinale c_{11} ($45 \times 10^{-3} \%$), la constante élastique de cisaillement c_{44} ($16 \times 10^{-2} \%$), la densité ρ ($4 \times 10^{-2} \%$), le module élastique de cisaillement G ($13 \times 10^{-2} \%$) est la valeur maximale pour cette pression, la vitesse longitudinale V_p ($2 \times 10^{-2} \%$) et c'est la minimale pour cette pression, la vitesse transversale V_s ($26 \times 10^{-2} \%$) et la vitesse hydrodynamique V_f ($53 \times 10^{-3} \%$). Quant à sa valeur maximale elle est dans la constante élastique au loin-diagonal c_{12} ($52 \times 10^{-2} \%$).
- A 120 et 130 GPa la tolérance maximale est dans le taux de variation de volume V/V_0 ($56 \times 10^{-2} \%$), ($73 \times 10^{-2} \%$) pour 120 et 130 GPa successivement. La tolérance minimale est dans le module d'incompressibilité K ($6 \times 10^{-3} \%$) pour 120 GPa et c'est la tolérance minimale aussi dans autres paramètres. Et à 130 GPa la tolérance minimale est dans la constante élastique au loin-diagonal c_{12} de ($18 \times 10^{-2} \%$) et dans la constante élastique longitudinal c_{11} de ($15 \times 10^{-2} \%$).
- A 140 GPa la tolérance minimale et maximale successivement sont dans les deux constantes longitudinal c_{11} ($12 \times 10^{-2} \%$) et au loin-diagonal c_{12} ($73 \times 10^{-2} \%$).

Au vue de ces valeurs, le cinquième modèle sera adopté par la suite pour le calcul et la comparaison directe des propriétés des deux oxydes.

Chapitre V:

Etude comparative des propriétés structurales, élastiques et sismiques du FeO, MgO et les composants (Mg_(1-x),Fe_x)O aux pressions correspondantes au modèle PREM

Introduction

Comme on l'a mentionné dans notre méthodologie de travail et après avoir choisi le meilleur modèle capable de décrire la variation des différents paramètres des deux oxydes au chapitre précédent, on essayera dans ce chapitre de présenter ces propriétés déterminées aux valeurs de pression conformes au modèle de structure terrestre PREM. Rappelons que ce dernier ne dispose pas de quelques propriétés étudiées dans la présente thèse. Aussi, par la suite et en utilisant les relations de Hashin & Shtrikman, on déterminera ces paramètres pour les composants formés des deux pôles purs, de sorte qu'il est possible d'étudier plusieurs composants de magnésio-wüstite au changement des valeurs de la fraction molaire du fer présente dans le composant soit de $x=1$ à $x=99$.

A cet effet, la comparaison se fera selon trois volets à savoir les propriétés structurales puis élastiques et enfin le volet se rapportant aux vitesses d'onde longitudinale, transversale ou hydrodynamique. Ainsi, Les figures (V-1) à (V-7) présentent la variation du taux volumique, la densité ρ , le module d'incompressibilité volumique K ou B , le module de cisaillement G , la vitesse d'onde longitudinale, transversale et hydrodynamique des deux oxydes et les composants (Mg_(1-x),Fe_x)O en fonction de la pression. Chaque figure représente 6018 points en rapport avec le FeO, le MgO et 99 autres composants (Mg_(1-x),Fe_x)O en plus de celle du modèle PREM.

Pour la comparaison on a préféré utiliser les écarts entre valeurs où tantôt l'oxyde de fer sera le comparant (référence) et tantôt ce sera l'Oxyde de Magnésium et tantôt ce sera par rapport au modèle PREM. Aussi, on utilisera les taux d'écarts par rapport au comparant qui seront minimum ou maximum.

V-1 Comparaison des propriétés structurales:

V-1-1 Comparaison du taux volumique:

A cause de l'absence de ce paramètre dans le modèle PREM (voir annexe A), il n'est pas possible de faire une comparaison avec notre modèle. A partir la figure (V-1), on peut observer que les valeurs du taux volumique de la wüstite à la forme cubique sont supérieures à celles de la périclase alors que pour la phase hexagonale, non seulement, elles sont très basses par rapport à la phase cubique pour le même constituant mais aussi très basses par rapport au deuxième oxyde. Aussi, de cette figure, le décroissement du taux volumique des deux oxydes en fonction de la pression est clair où son point de départ est le même à la pression 0 GPa soit 1. A partir de ce point, le décalage entre les valeurs atteint son minimum possible à la pression 0.3 GPa. Ensuite cette différence de valeurs s'accroît irrégulièrement jusqu'à la pression 21 GPa, puis diminue jusqu'à la valeur de pression 66.9 GPa. On observe qu'à la pression 80.4 GPa, la différence des valeurs du taux volumique entre les deux oxydes atteint son maximum, puis ce décalage diminue jusqu'à la dernière valeur de pression 135.8 GPa. Sachant que le taux d'écart maximal de la différence apparaît à la pression; 95.8 GPa et 101.1 GPa par rapport à la valeur du taux volumique du FeO et MgO respectivement (tableau (C-1)).

On remarque aussi de cette figure ainsi que le tableau (C-2) (voir annexe C), que les valeurs du taux volumique des composants magnésio-wüstite forment généralement une bande entre les valeurs des deux oxydes, mais elles sont supérieures à celle du FeO dans sa phase B8 et plus proches de celles du MgO par des valeurs inférieures. En comparant le taux volumique des composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ et l'Oxyde de Fer à sa phase hexagonale, on voit qu'il se rapproche de cet oxyde au fur et à mesure que la fraction molaire du Fer présente dans le composant augmente, donc il est ordonné d'une manière décroissante à partir de cet oxyde jusqu'à l'Oxyde de Magnésium, ce qui affirme que la différence entre les deux taux volumique diminuent avec la croissance des valeurs de pressions. La différence maximale des valeurs du taux volumiques entre tous les composants magnésio-wüstite et wüstite apparaît à la pression 80.4 GPa, mais le taux d'écart maximal par rapport au FeO se situe pour $x=1$ à 93 à la pression 95.8 GPa, alors que pour $x=94$, elle est à 85.5 GPa et pour $x=95$ à 99, elle est à la pression 80.4 GPa.

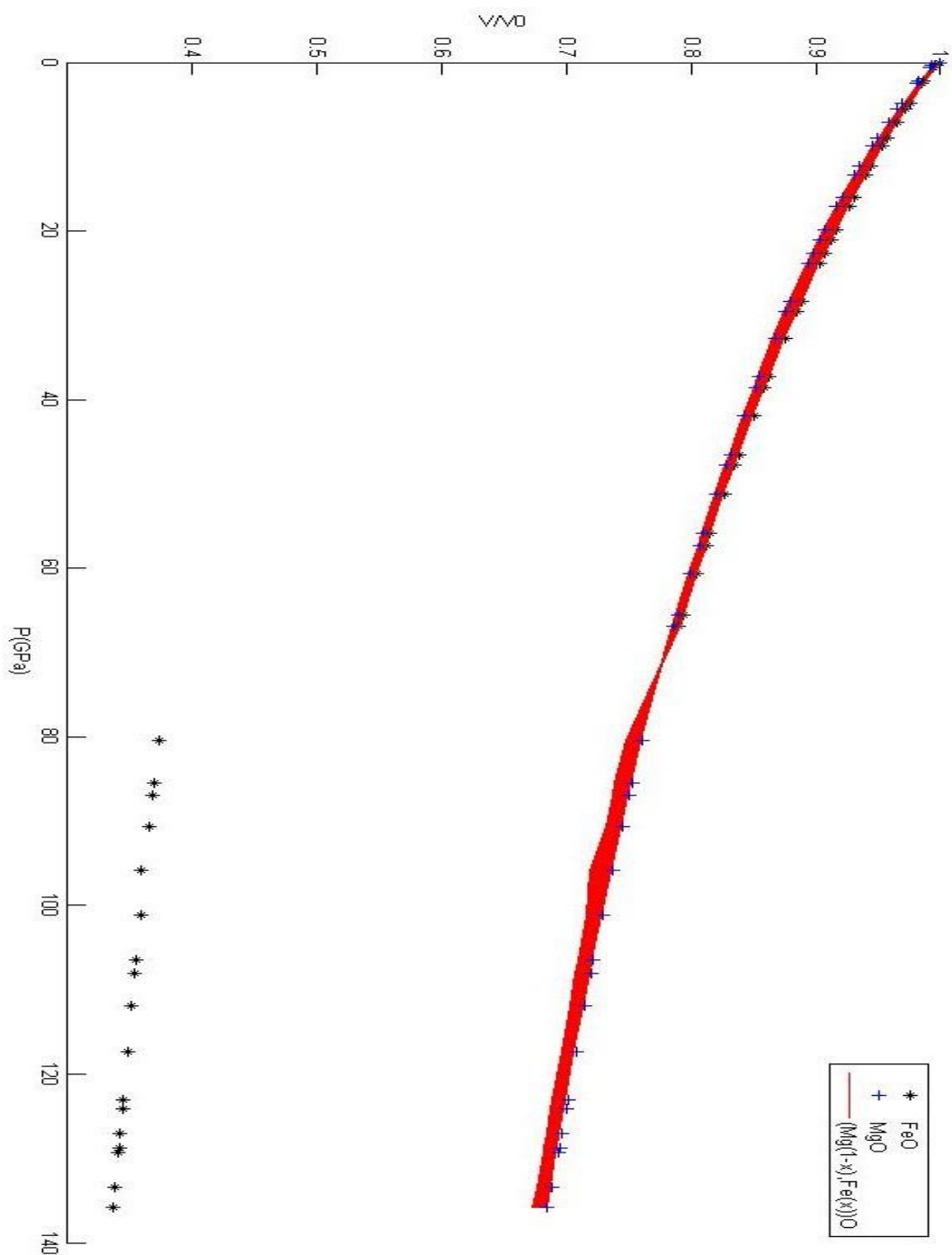


Figure (V-1): Variation du taux V/V_0 en fonction de la pression pour FeO, MgO et les composants de $(\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x)\text{O}$. Les valeurs de la pression sont celles indiquées dans le modèle PREM.

Du tableau (C-2), on relève que l'intervalle où les valeurs du taux volumique des composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ sont inférieures à celles de l'Oxyde de Fer varie selon chaque composant dont la première est toujours situées aux basses pressions. Avec cette limite, coïncide presque la différence minimale entre les deux taux volumique dans cette phase donc dans ce cas il y a deux points identiques.

En observant les tableaux (C-3, 4) (voir annexe C), on relève que l'intervalle où le taux volumique de l'Oxyde de Magnésium qui ne subit aucune transformation de phase est supérieur à celui des composants $(\text{MgO}_{(1-x)}, \text{FeO}_x)$ varie selon la fraction molaire du fer mais reste unique avec un seul point identique. L'écart et son taux sont maximums généralement aux valeurs de pression 95.8 et 123 GPa mais ils sont minimums pour des valeurs de pression variables.

V-1-2 Comparaison de la densité:

A travers la figure (V-2) et le tableau (C-5) (voir annexe C), on remarque que la densité augmente avec la pression pour les deux oxydes. Aussi, la densité de l'oxyde de fer dans ses deux phases est presque le double de celle de l'Oxyde de Magnésium, de sorte que la l'écart est toujours croissant à partir de la pression 0 GPa qui est à sa valeur minimale jusqu'à la valeur maximale à la pression 135.5 GPa. Les taux d'écart max et min sont situés aux valeurs de pression 28.3 et 95.8 GPa respectivement.

A partir de la figure (V-2), on observe que la densité des composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ forme une bande qui couvre la surface séparant les deux oxydes, fait attendu, de par la relation mathématique utilisée pour sa détermination. Aussi, il y a une proportionnalité avec la fraction molaire quant au rapprochement des deux oxydes.

Pour chaque composant la différence de densité avec n'importe quel oxyde croît avec l'augmentation de la pression de manière superposée. Pour tous les composants la valeur maximale de la différence avec les deux oxydes apparaît à la pression 135.5 GPa, cependant la valeur de la différence minimale entre tous les composants et l'Oxyde de Magnésium sera pour la pression 0 GPa mais avec la wüstite, elle l'est seulement pour les composants de $x=1$ à 19 pour cette même valeur. Alors que pour $x=20$ à 99, elle apparaît à la pression 0.3 GPa (tableau (C-6)).

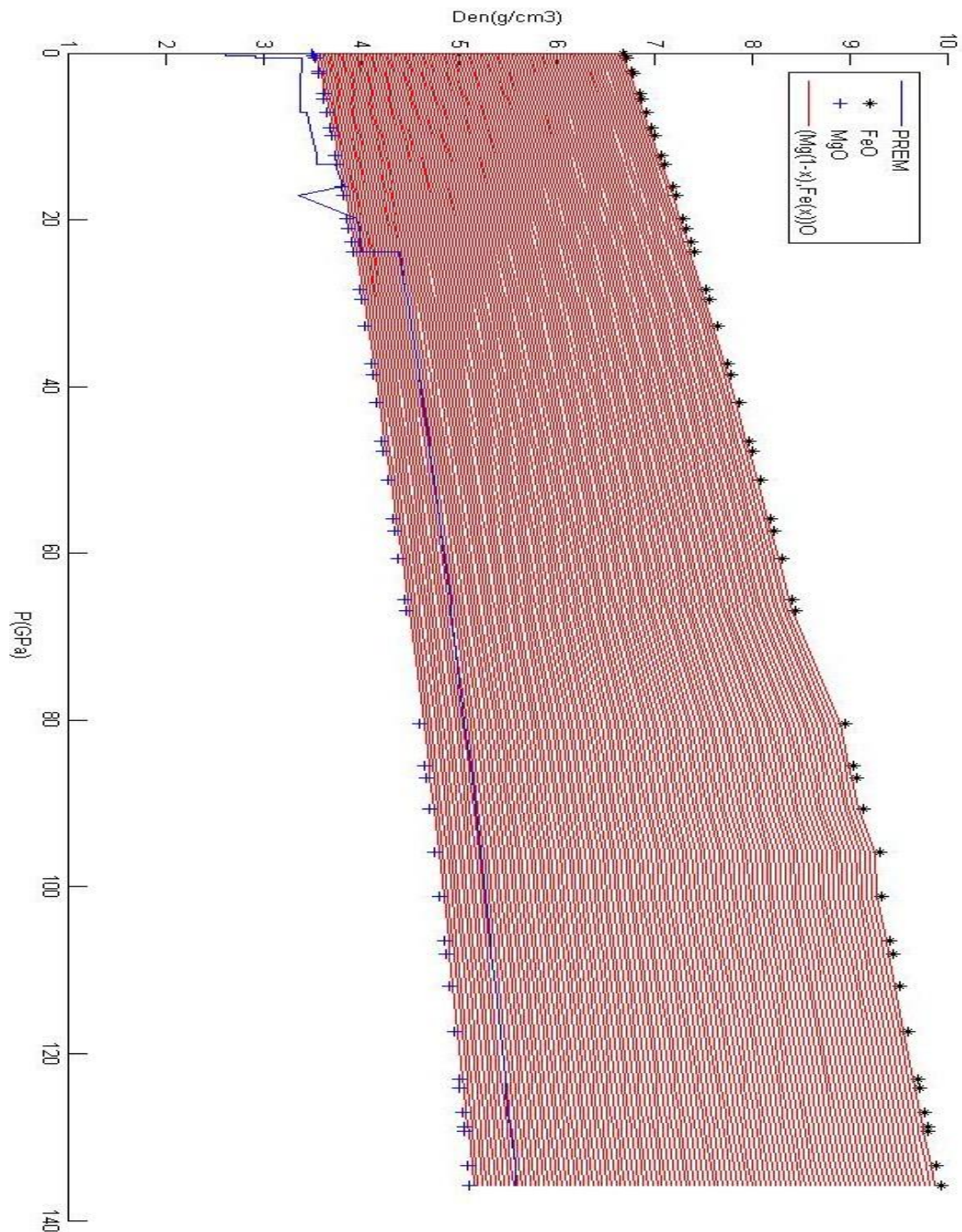


Figure (V-2): représente les variations de densité en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ et en modèle PREM.

Pour ce qui du taux d'écart par rapport aux deux oxydes, il est observé à partir du tableau (C-6) (voir annexe C), sa valeur minimale et maximale n'apparaissent pas aux mêmes pressions que la différence minimale et maximale citées plus haut c'est-à-dire à 28.3 et 95.8 GPa.

La différence et le taux d'écart entre les valeurs de la densité correspondant au modèle de la matière terrestre PREM et les valeurs obtenues pour les deux oxydes ainsi que tous les composants mangésiwüstite, à la valeur maximale toujours à la pression 0 GPa jusqu'à la profondeur 0.3 km (voir caractéristiques modèle PREM annexe A). Seulement à partir de cette valeur de pression jusqu'à 23.8 GPa pour le FeO et 16 GPa pour le MgO (coïncidant avec le début du manteau inférieur), la différence des valeurs de densité entre la matière terrestre et les deux oxydes est presque décroissante. (Les tableaux (C-7 et 8)).

La différence minimale et le taux d'écart minimal des valeurs de densité de l'oxyde de fer d'un côté et les composants $x=15$ à 99 d'un autre côté avec celles du modèle PREM, apparaissent à la pression 23.8 GPa où les valeurs de la densité de la matière terrestre sont inférieures. Alors qu'en comparant avec l'oxyde de magnésium, la différence minimale et le taux d'écart minimal seront pour le composant pour $x=1$ à la pression 16 GPa, et pour le reste des composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$, ils sont à différentes pressions mais pour la plupart, elles coïncident pour la différence et le taux d'écart. Dans ce cas les valeurs de la densité de la matière terrestre sont supérieures à celles de ces composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ avec $x=1$ à 14 dans un seul intervalle et donc un seul point identique est présent, sauf le composant pour $x=12$ où il y a deux points identiques. Enfin pour les composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ pour $x=11$ et $x=13$, on relève deux intervalles et donc, quatre points identiques (les tableaux (C-7 et 8)).

V-2 Comparaison des modules élastiques:

V-2-1 Comparaison du module d'incompressibilité:

A travers la figure (V-3) et le tableau (C-9) on observe que, ce module augmente toujours avec l'accroissement de la pression pour les deux oxydes et ses valeurs sont très proches en les comparant l'un à l'autre, où la différence maximale ici est à la pression 0.3 GPa et la minimale apparaît à la pression 46.5 GPa, quant au taux maximal de la différence, il est à 0 GPa, et le taux minimal apparaît à la pression 95.8 GPa. En plus, les valeurs de ce module pour le MgO sont inférieures à celles du FeO avant la pression 46.5 GPa et entre 90.6 et 101.1 GPa (exactement à 95.8 GPa) et, enfin, après la pression 117.4 GPa.

Aussi, cette figure et ce tableau, montrent que les valeurs du module pour les composants $(Fe_x, Mg_{(1-x)})O$ respectent ce qui a été dit pour la densité. La différence et son taux sont maximums ou minimum entre chaque oxyde et les composants magnésio-wüstite aux mêmes pressions des différences et taux d'écarts entre les deux oxydes seulement. Les valeurs de ce module des deux oxydes sont supérieures à celles des composants magnésio-wüstite dans deux intervalles pour le FeO et un seul le MgO. Mais il y a quatre points identiques (tableau (C-10)).

On ne relève que les valeurs du module pour les composants magnésio-wüstite. Alors elles s'échangent les rôles entre eux de sorte que la différence augmente entre chaque deux composants dans l'intervalle de pression [0, 0.3] GPa et diminue dans les intervalles [0.3, 46.5] GPa, ainsi que [90.6, 95.8] et [101.1, 117.4] GPa mais l'inverse est dans les autres intervalles (tableau (C-11)).

La différence ou son taux d'écart pour les valeurs de ce module pour la matière terrestre comparés à ceux des autres constituants sont similaires à ce qui a été mentionné pour la densité. Les valeurs maximales sont à 0 GPa jusqu'à la profondeur 0.3 km. La différence entre les valeurs du module d'incompressibilité de la matière terrestre et celles des deux oxydes décroît entre 0 et 23.8 GPa (fin du manteau supérieur), et entre 60.7 et 129.3 GPa pour la wüstite, alors qu'elle décroît entre 0 et 16 GPa, puis entre 17.1 et 19.9 GPa, et enfin entre 46.5 et 135.8 GPa pour l'Oxyde de Magnésium (les tableaux (C-12 et 13)).

Quant à la différence et le taux d'écart des valeurs de ce module pour la matière terrestre avec celles des autres constituants, ils sont minimums à des pressions différentes.

Ces pressions sont proches ou coïncident avec les limites des intervalles où les valeurs de ce module pour la matière terrestre sont supérieures à celles des autres constituants. Dans le cas d'un seul intervalle: pour les deux oxydes, les composants de $x=1$ à 15 et de $x=52$ à 99, pour le cas deux intervalles: pour les composants de $x=16$ à 26 et dans le cas de trois intervalles: pour les composants de $x=27$ à 51. Alors le nombre de points identiques entre la matière terrestre et l'Oxyde de Magnésium ainsi que les composants de $x=1$ à 15 est 1 et entre la matière terrestre et l'Oxyde de Fer ainsi que les composants de $x=16$ à 26 et de $x=52$ à 99, il y a deux points identiques et enfin pour les composants de $x=27$ à 51, il y a quatre points identiques (tableau (C-13)).

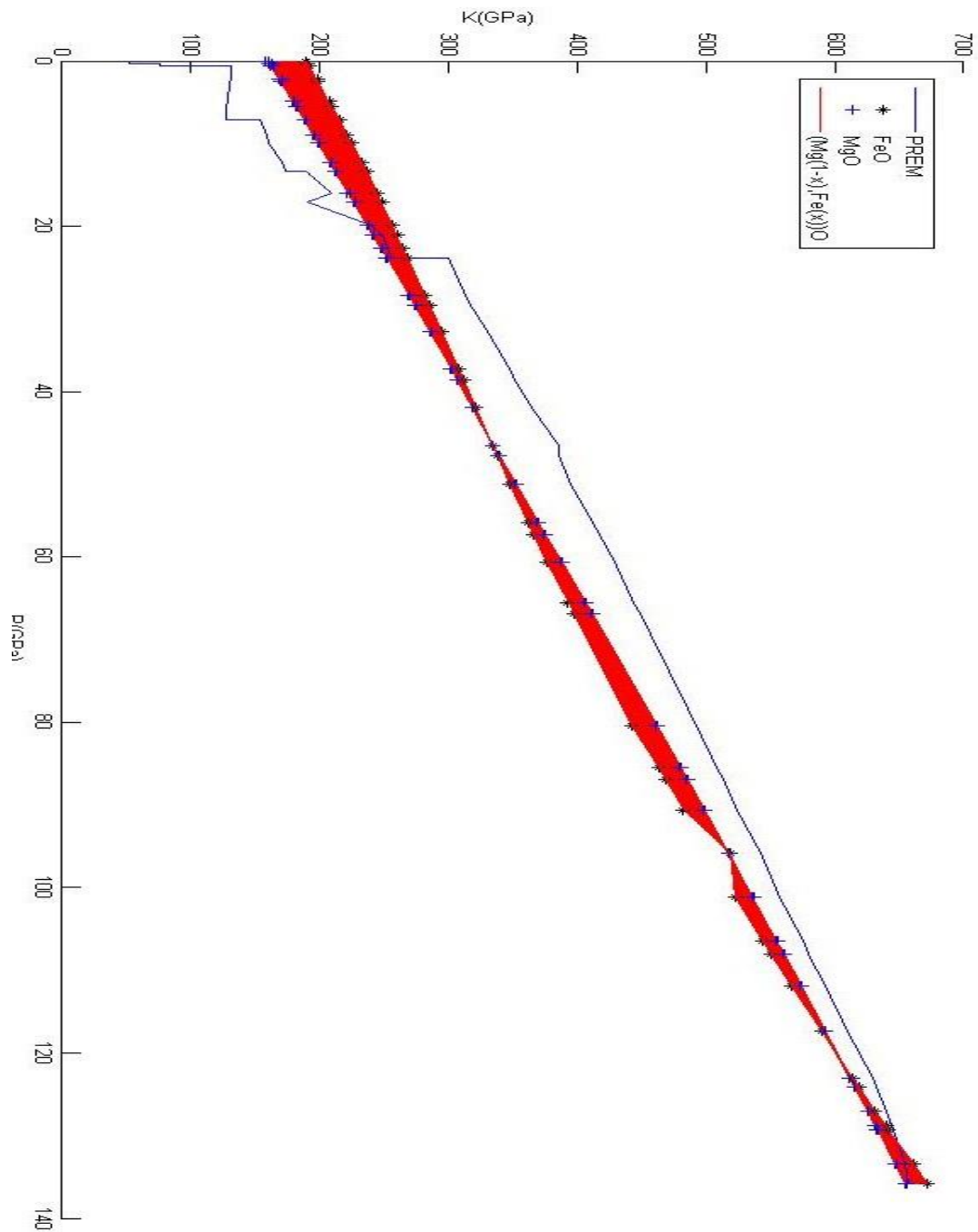


Figure (V-3): Variations de d'incompressibilité K en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}\text{Fe}_x)\text{O}$ et de modèle PREM.

V-2-2 Comparaison du module de cisaillement

La figure (V-4) et le tableau (C-14) montrent que ce module augmente toujours avec l'augmentation de la pression pour le MgO et la phase B1 du FeO et ses valeurs sont très rapprochées en les comparant les unes aux autres. Les valeurs du module de cisaillement du FeO (première phase) sont supérieures à celles du MgO et la différence entre les deux oxydes diminue à partir de la pression 0 GPa jusqu'à la valeur minimale à la pression 60.7 GPa à l'exception d'une légère augmentation à la pression 0.6 GPa; ensuite elle augmente légèrement à la pression 66.9 GPa. Le module de cisaillement augmente aussi avec la pression pour la phase B8 du FeO et le MgO, avec des valeurs plus grandes pour ce dernier. La différence augmente à partir de la pression 80.4 GPa et devient maximale à la pression 135.8 GPa. Quant au taux d'écart maximum, il sera à la pression 135.8 GPa et le taux minimal apparaît à la pression 65.5 GPa.

Les comparaisons des valeurs à partir de la figure (V-4) entre les composants et les deux oxydes et entre eux et la matière terrestre montrent qu'elles sont influencées de la même façon, et la différence augmente avec l'augmentation de la valeur de la fraction molaire x dans une seule pression comme au module précédent.

Les valeurs de ce module pour les composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ pour $x=37$ à 99 sont supérieures à celles de l'Oxyde de Fer, mais les autres composants sont supérieures à celles de l'Oxyde de Fer dans un seul intervalle seulement qui s'accroît par l'augmentation du taux de Fer dans le composant par une limite toujours constante à la pression 135.8 GPa. La différence maximale et son taux pour tous les composants magnésio-wüstite et en comparaison avec la wüstite apparaissent à la pression précédente. La différence minimale et son taux apparaissent au voisinage de la limite de l'intervalle mentionné précédemment, alors pour ces constituants, on observe un seul point identique (le tableau (C-15)).

Les valeurs de ce module pour les composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ pour $x=1$ à 13 sont supérieures à celles de l'Oxyde de Magnésium dans un seul intervalle aussi qui s'accroît en largeur presque avec l'augmentation du taux de Fer dans le composant par une limite toujours constante à la pression 135.8 GPa. Les valeurs pour les autres composants sont toujours supérieures à celles de MgO. Quant à la comparaison avec le MgO, la différence maximale et son taux apparaissent à la pression 66.9 GPa et cela pour $x=1$ à 51. Le taux maximal de cette différence reste apparent à cette pression jusqu'au composant $x=88$, mais, la différence maximale apparaît de $x=52$ jusqu'à $x=99$ à la pression 135.8 GPa. Le taux maximum de la

différence pour les composants de $x=89$ à 99 est visible à la pression 0 GPa. Aussi la différence minimale et son taux appariaissent au voisinage de la limite de l'intervalle mentionné précédemment, et on note pour ces constituants un seul point identique (le tableau (C-16)).

Les valeurs du module de cisaillement pour les composants magnésio-wüstite sont conformes généralement à ce qui a été dit à propos du module d'incompressibilité, de sorte qu'il y a un changement de rôle entre les composants. La différence s'accroît entre deux composants entre deux pressions 0 GPa et 0.3 GPa. La différence entre chaque deux composant diminue à partir de la pression 0.3 GPa jusqu'à la pression 41.9 GPa. A partir de la pression 0 jusqu'à la pression 41.9 GPa les composants se mettent en ordre croissant. La différence s'accroît entre chaque deux composants à partir de la pression 46.5 GPa jusqu'à la pression 90.6 GPa. Là, les composants se mettent en ordre décroissant. A partir de cette valeur jusqu'à la pression 95.8 GPa, les composants se mettent au même ordre que dans le premier intervalle c'est-à-dire en ordre croissant. La différence est aussi décroissante entre chaque deux composant à partir de la pression 101.1 GPa jusqu'à la pression 117.4 GPa. Dans cet intervalle, les composants se mettent en ordre décroissant. Ils se mettent en ordre croissant à nouveau à partir de la pression 123 GPa jusqu'à la pression 135.8 GPa (le tableau (C-17)).

L'écart entre les valeurs du module de cisaillement pour la matière terrestre et celui du FeO commence à diminuer de la pression 0 GPa (et son taux d'écart y est le plus grand puisque $G_{\text{PREM}} = 0$ GPa) jusqu'à une valeur minimale qui apparaît à la pression 55.9 GPa, cependant le taux minimal apparaît à la pression 65.5 GPa. Les valeurs du module de cisaillement pour cette phase du wüstite sont supérieures à celles de la matière terrestre, tandis que c'est tout à fait le contraire pour la phase hexagonale où la différence (et son taux) augmentent généralement jusqu'à ce qu'ils atteignent la valeur maximale qui apparaît à la pression 135.8 GPa. Dans cette phase les valeurs du module de cisaillement de cet oxyde sont inférieures à celles de la matière terrestre, normalement le point identique dans ce cas se situe à la zone de transition de phase de cet oxyde (les tableaux (C-18 et 19)).

L'écart entre les valeurs de ce module pour la matière terrestre et celui du MgO commence à diminuer à partir de la pression 0 GPa (et son taux qui est plus grand pour le même raison) jusqu'à une valeur minimale (et son taux) qui apparaît à la pression 29.6 GPa. Ensuite, il y a une certaine correspondance des valeurs jusqu'à la dernière pression (135.8 GPa). Les valeurs de ce module pour la matière terrestre sont supérieures à celles du MgO dans deux intervalles, donc il y a quatre points identiques (les tableaux (C-18 et 19)).

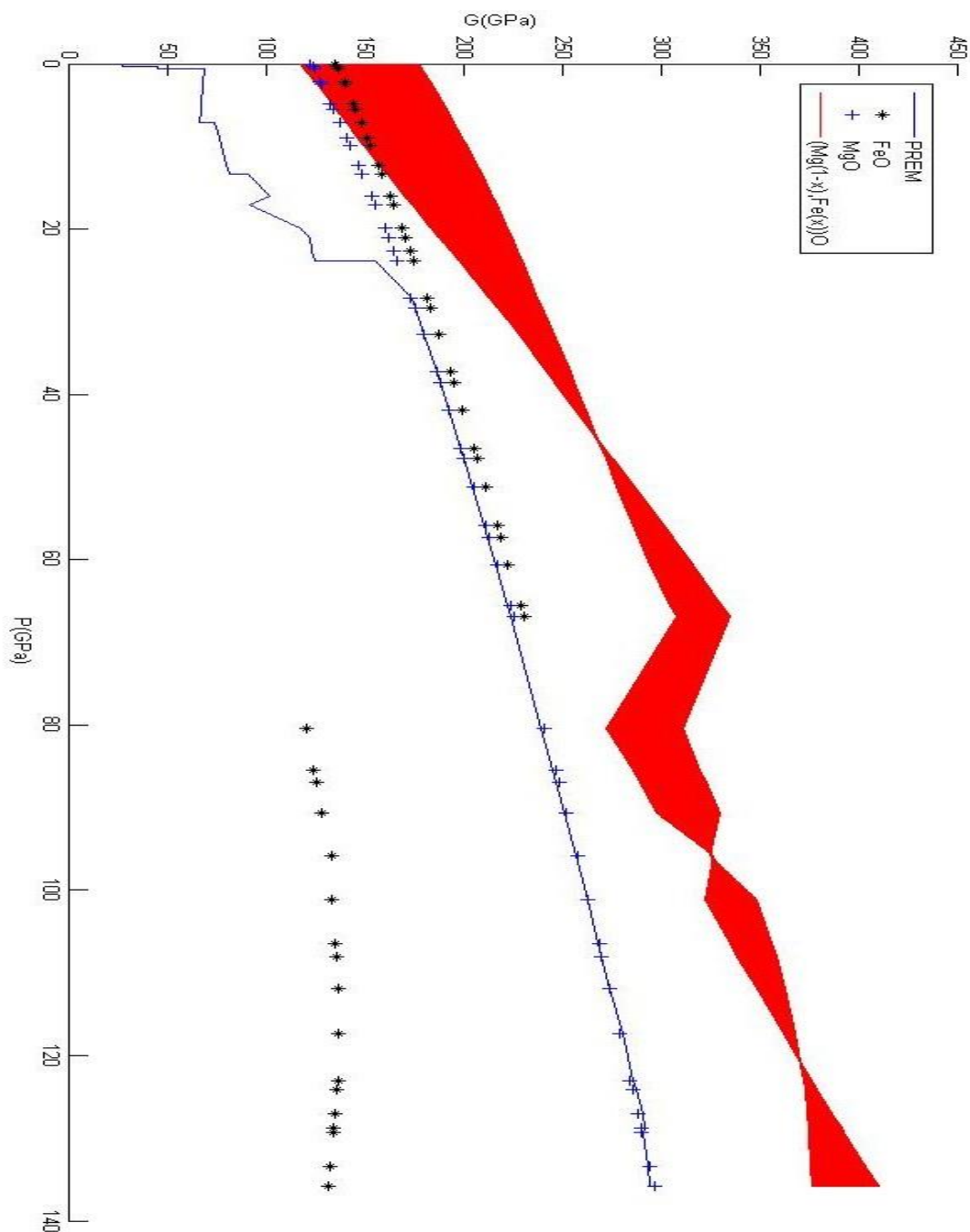


Figure (V-4): Variations du module de cisaillement G en fonction de la pression (valeurs du modèle PREM) pour FeO, MgO, les composants de $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ et le modèle PREM.

Tous les composants magnésiowüstite ont des valeurs du module de cisaillement supérieures à celles de la matière terrestre, et l'écart maximal (et son taux qui est le plus grand pour la même raison) se remarque à la même pression que pour de l'Oxyde de Magnésium. Quant à l'écart minimal et son taux, ils s'observent pour $x=1$ jusqu'à $x=52$ à la pression 28.3 GPa. Et ensuite pour $x=83$ jusqu'à $x=99$, à la pression 80.4 GPa. Pour $x=53$ jusqu'à $x=82$, l'écart minimal est observé à la pression 80.4 GPa, quant au taux minimal, il sera visible ici à la même pression précédente (28.3 GPa) (le tableau (C-19)).

V-3 Comparaison des vitesses sismiques:

V-3-1 Comparaison de la vitesse longitudinale:

A travers la figure (V-5) et le tableau (C-20) on remarque que la vitesse longitudinale augmente avec la pression pour l'oxyde de magnésium mais pour l'oxyde de fer, on relève deux domaines selon la nature de la phase présente où les valeurs dans la phase cubique (0-66.9) GPa sont supérieures à celles de la phase hexagonale (80.4-135.8) GPa néanmoins les valeurs restent toujours croissantes avec la pression dans chaque domaine. Aussi, l'écart entre les valeurs des deux oxydes est toujours croissant par des valeurs inférieures pour l'Oxyde de Fer où il prend la valeur minimum à 0 GPa jusqu'à sa valeur maximale à la pression 135.8 GPa. Et les valeurs du taux d'écart sont minima et maximum aux valeurs de pression 0 et 80.4 GPa respectivement.

A partir de cette figure aussi on voit que les valeurs de la vitesse longitudinale pour les composants (Mg_(1-x),Fe_x)O sont superposées entre eux en ordre décroissant selon la fraction molaire du fer présente dans le composant, de sorte que l'écart entre chaque deux composants s'accroît seulement dans les deux intervalles (0 à 85.5 GPa) et (95.8 à 101.1 GPa) (le tableau (C-21)).

La vitesse longitudinale de wüstite est toujours inférieure à celles des composants du magnésiowüstite, de sorte que l'écart par rapport à cet oxyde et son taux sont minimums à la pression 0.3 GPa. Par contre ils sont maximums à la pression 135.8 GPa. On remarque que pour les composants $x=45$ à 99, l'écart et le taux par rapport à la wüstite sont maximums à la même pression 135.8 GPa, alors que pour les composants $x=7$ à 44, l'écart maximum à la même pression précédente soit 135.8 GPa mais le taux est maximum à la pression 80.4 GPa. Enfin, pour les composants $x=1$ à 6, le taux d'écart est à son maximum à la pression 80.4 GPa mais pour l'écart en lui-même, deux cas se présentent où on a pour les composants $x=1$ à 4, il

est maximum à la pression 123 GPa alors que pour $x=5$ et 6, sa valeur maximale est à la pression 124.1 GPa (le tableau (C-22)).

Maintenant en comparant par rapport à la vitesse longitudinale de l'Oxyde de Magnésium, on trouve que celle des composants du magnésio-wüstite est toujours inférieure à celle-ci pour les composants $x=24$ à 99, où l'écart minimal (maximal) et le taux minimal (maximal) apparaissent à différentes pressions surtout 0.3, 23.8, 28.3, 29.6, 23.8, 66.9, 80.4 et 135.8 GPa. la vitesse de périclase est supérieure à celles des restes composants dans un seul, deux et trois intervalles avec un seul, deux et quatre points identiques pour les composants de $x=1$ à 12, de $x=15$ à 23, $x=13$ et 14 respectivement. La différence minimale (maximale) et le taux minimal (maximal) apparaissent à la plupart des valeurs de pression du modèle PREM surtout à 0.3 et 66.9 GPa (voir les tableaux (C-23 et 24)).

Par rapport aux valeurs obtenues au modèle PREM, on relève que l'écart et le taux par rapport à tous les constituants sont maximums à la pression 0 GPa jusqu'à la profondeur 0.3 km.

Pour le FeO la vitesse longitudinale est inférieure à celle de la matière terrestre seulement jusqu'à la profondeur située à la zone définie par la pression 0.6 GPa. Pour ce qui est de l'écart avec ce constituant, il décroît à partir de la valeur maximale citée auparavant jusqu'au environ le dixième de la valeur maximale correspondant à première valeur la pression 0.6 GPa. De la seconde valeur de la pression 0.6 GPa, la vitesse longitudinale du FeO est inférieure à celle de la matière terrestre mais l'écart continue à décroître le jusqu'à la valeur minimale possible apparente à la première valeur de la pression 7.1 GPa. Après, il augmente jusqu'à la pression 133.4 GPa et puis diminue jusqu'à la dernière pression 135.8 GPa (les tableaux (C-25 et 26)).

Pour le MgO, sa vitesse longitudinale est toujours supérieure à celle de la matière terrestre. L'écart entre ces valeurs décroît mais de manière irrégulière jusqu'à la zone entre les deux pressions; 19.9 et la première valeur de la pression 23.8 GPa où la différence devient presque stable. L'écart continu à se décroître jusqu'à la valeur minimale possible apparente à la pression 28.3 GPa, après, il augmente jusqu'à la dernière pression 135.8 GPa (le tableau (C-25 et 26)).

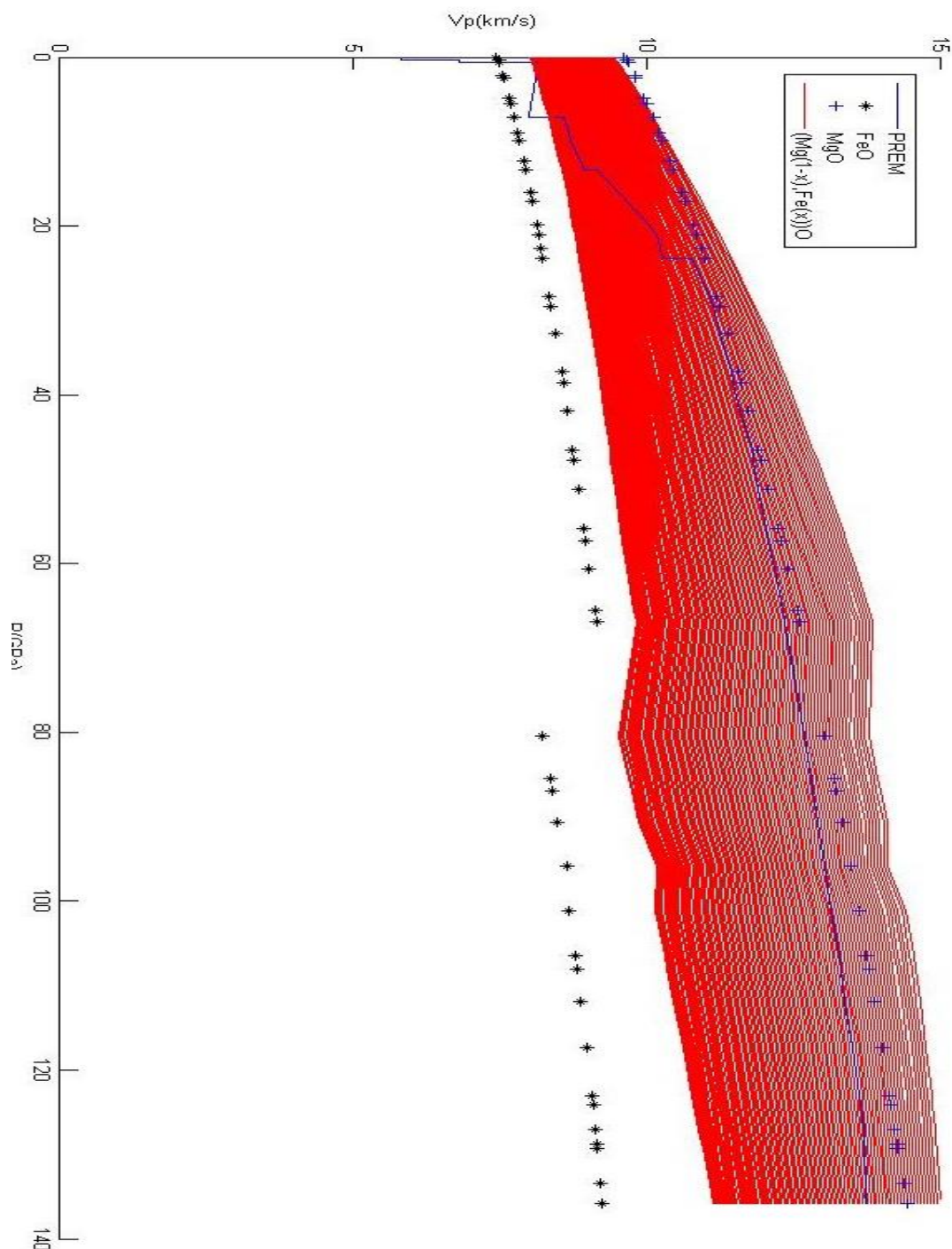


Figure (V-5): représente les variations de vitesses longitudinale V_p en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}\text{Fe}_x)\text{O}$ et en modèle PREM.

La vitesse hydrodynamique des composants de (Mg_(1-x),Fe_x)O est inférieure à celle du modèle PREM; dans un seul intervalle pour les composants x=19 par deux points identiques, de x=29 à 32, de x=55 à 75 et de x=78 à 89 par un point identique, dans deux intervalles pour les composants x=20, x=22 et x=24 par quatre points identiques, de x=25 à 28, x=33 et x=34, x=33 et x=76 et x=77 et de x=96 à 99 par trois points, dans trois intervalles pour les composants x=21 et x=23 par six points identiques. La différence minimale et le taux minimal apparaissent à différentes pressions dont la plupart sont les limites des intervalles ou au voisinage des points identiques (les tableaux (C-26 et 27).

V-3-2 Comparaison de la vitesse de cisaillement:

Pour la vitesse de cisaillement, à travers la figure (V-6) et le tableau (C-28), on observe qu'elle est toujours croissante avec l'augmentation de pression pour les deux oxydes à la phase B1 de la matière FeO. Ses valeurs dans MgO sont supérieures. De sorte que la différence est toujours croissante dans les deux phases, à partir de la pression de 0 GPa où sa valeur minimale est 0.7 km/s jusqu'à la valeur maximale à la pression 135.8 GPa. Le taux d'écart est minimum à la pression 0 GPa et maximal à 80.4 GPa pour l'Oxyde de Fer. Quant à l'Oxyde de Magnésium, elles apparaissent aux pressions 0 et 135.8 GPa.

A partir de cette figure et le tableau (C-29) les valeurs de la vitesse de cisaillement pour les composants (Mg_(1-x),Fe_x)O apparaissent superposées entre elles par un ordre décroissant de sorte que la différence s'accroît entre chaque deux composants entre les deux pressions 0 et 80.4 GPa, la différence se décroît entre chaque deux composants à partir de la pression 85.5 GPa jusqu'à la pression 135.8 GPa mais de façon plus accentuée à la pression 95.8 GPa.

La vitesse de cisaillement de la wüstite est inférieure à celle des composants de sorte que l'écart par rapport à ce constituant ainsi que son taux, sont maximums la pression 135.8 GPa. Quant à la différence minimale, elle est pour les composants du x=1 à 74 à la pression 0 GPa et pour les composants de x=75 à 99, elle est à la pression 0.3 GPa. Quant au taux minimal, il est à la pression 0.3 GPa (le tableau (C-30)).

La vitesse de cisaillement de la périclase est toujours inférieure à celle des composants de magnésiowüstite pour x=1 à 8, où la différence minimale (maximale) et le taux minimal (maximal) apparaissent aux pressions 5.5, 7.1 et 66.9 GPa. La vitesse de cet oxyde est supérieure à celles des composants pour x=83 à 99. Elle est supérieure dans un seul

intervalle pour les composants de $x=9$ à 28 et $x=50$ à 82 par un seul point identique, dans deux intervalles pour les composants $x=29$, de $x=31$ à 34 (par quatre points identiques), de $x=35$ à 49 (par trois points identiques), dans trois intervalles pour le composants $x=30$ où il apparait six points identiques. Pour le reste des composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$, la différence minimale et le taux minimal apparaissent aux pressions du modèle PREM, les valeurs maximales de la différence et le taux sont aux pressions 8.9 , 66.9 et 80.4 GPa (les tableaux (C-31, 32 et 33)).

Jusqu'à la profondeur 0.3 km, la différence de valeurs entre la matière terrestre et les autres constituants est maximale. De même pour le taux qui est très grand puisque $V_s=0$ km/s au modèle PREM (les tableaux (C-34, 35 et 36)).

Pour FeO, la vitesse de cisaillement est inférieure à celle de la matière terrestre à partir de la profondeur déterminée par la pression 7.1 GPa. La différence diminue à partir de la valeur supérieure mentionnée précédemment atteignant une valeur minimale évaluée à deux cent fois moins que celle-ci. L'écart des valeurs entre le FeO et le modèle PREM, s'accroît entre la seconde valeur de la pression 0.6 GPa jusqu'à la première valeur de la pression 7.1 GPa et entre la seconde valeur de cette dernière jusqu'à 135.8 GPa où la valeur minimale de cet écart apparait à la seconde valeur de 7.1 GPa (les tableaux (C-34 et 35)).

Pour le MgO, sa vitesse de cisaillement est toujours supérieure à celle de la matière terrestre. L'écart des valeurs avec celles du modèle PREM, s'accroît entre les pressions 127 et 135.8 GPa où la valeur minimale apparait à 127 GPa (les tableaux (C-34 et 35)).

La vitesse de cisaillement du modèle PREM est toujours inférieure à celle des composants de magnésio-wüstite pour $x=1$ à 40 , où la différence minimale et le taux minimal apparaissent aux pressions 28.3 , 80.4 et 95.8 GPa. La vitesse de ce modèle est supérieure à celles du reste des composants, dans un seul intervalle pour les composants $x=51$, 52 et de $x=65$ à 99 par un seul point identique; et dans deux intervalles pour les composants $x=41$ à 47 , $x=49$ et 50 (par deux points identiques), de $x=53$ à 64 (par trois points identiques), dans trois intervalles pour le composant $x=48$ où il apparait quatre points identiques. Pour le reste des composants, la différence minimale et le taux minimal apparaissent aux pressions du modèle PREM (les tableaux (C-35 et 36)).

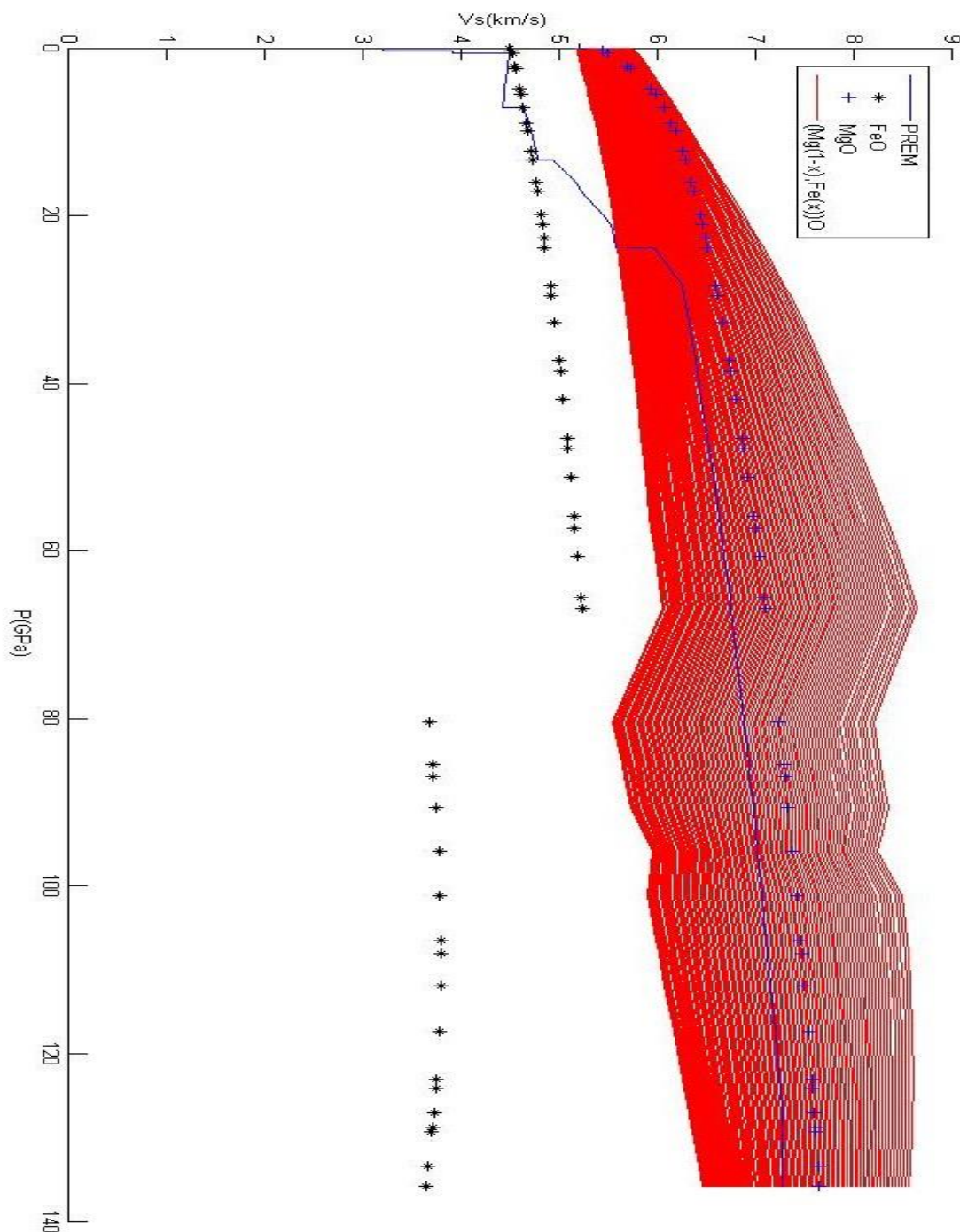


Figure (V-6): représente les variations de vitesses transversale V_s en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(Mg_{(1-x)}Fe_x)O$ et en modèle PREM.

V-3-3 Comparaison de la vitesse d'hydrodynamique:

A travers la figure (V-7) et le tableau (C-37), on observe que les valeurs de cette vitesse pour l'Oxyde de Fer sont moins de celles du deuxième oxyde. Aussi, elles augmentent avec la pression pour les deux oxydes. L'écart entre les valeurs de cette vitesse entre les deux oxydes décroît de la pression 0 GPa jusqu'à la pression 4.8 GPa, et c'est la valeur minimale. Puis, il commence à s'accroître jusqu'à la pression 135.8 GPa où il est à la valeur maximale. Néanmoins, cette augmentation est marquée par une singularité à la pression 95.8 GPa. Quant au taux de l'écart entre ces deux oxydes, il est minimum (maximum) à la pression 7.1 GPa (66.9 GPa) par rapport à l'Oxyde de Fer, mais par rapport à l'Oxyde de Magnésium il est minimum (maximum) à la pression 7.1 GPa (80.4 GPa).

La figure et le tableau (C-38) montre que les valeurs de la vitesse hydrodynamique pour les composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ sont superposées entre eux par un ordre décroissant, de sorte que la différence s'accroît entre chaque deux composants entre les deux pressions 0 et 90.6 GPa surtout en comparant $x=1$ et $x=2$ et de même pour $x=98$ et $x=99$.

La vitesse hydrodynamique de la wüstite est inférieure mais voisine à celle des composants de magnésio-wüstite sauf le pour composant $x=99$, de sorte que la différence minimale et le taux minimal pour tous les composants seront à la pression 0.3 GPa. Pour le composant $x=99$, cette vitesse est inférieure à celle de l'oxyde de fer dans un seul intervalle par deux points identiques, où la différence minimale reste à la pression précédente, cependant le taux minimal est à la pression 2.2 GPa. Quant à la différence maximale, elle est observée à deux différentes pressions où pour les composants de $x=1$ à 57, la différence maximale est à la pression 117.4 GPa tandis que pour les composants $x=58$ à 99, elle est à la pression 135.8 GPa. Pour ce qui est du taux maximum, il est à la pression 80.4 GPa pour les composants de $x=1$ à 85, mais il est à la pression 90.6 GPa pour les composants du $x=86$ à 90. Ce taux est aussi à la pression 101.1 GPa pour les composants du $x=91$ à 94 alors que pour le reste des composants, il est à la pression 135.8 GPa (le tableau (C-39)).

La vitesse hydrodynamique des composants $(Mg_{(1-x)},Fe_x)O$ est toujours inférieure à celle de la périclase, où l'écart minimal (le taux minimal) apparaît à des pressions décroissantes (croissantes) à partir 28.3 jusqu'à 4.8 GPa (à partir 127 de jusqu'à 135.8 GPa). La différence maximale apparaît à la pression 0 GPa pour les composants de $x=1$ à 11 et à la pression 135.8 GPa pour $x=12$ à 99. Par contre le taux d'écart maximal apparaît à la pression

0 GPa pour x=1 à 83, et à la pression 8.9 GPa pour x=90 à 99 et enfin à, la pression 80.4 GPa pour le composant x=84 (le tableau (C-40)).

À partir de 0 GPa jusqu'à la profondeur 0.3 km, apparait l'écart (le taux) maximum des valeurs de la vitesse hydrodynamique des composants (Mg_(1-x),Fe_x)O et les deux oxydes d'une part et entre ceux-ci et la matière terrestre d'autre part (les tableaux (C-41, 42, 43 et 44)).

Pour le FeO, sa vitesse hydrodynamique est inférieure à celle de la matière terrestre sauf avant la profondeur définie par la pression 0.6 GPa. A partir de la profondeur 0.3 km (0 GPa), l'écart des valeurs diminue jusqu'à la seconde valeur de la pression 0.3 GPa qui est la valeur minimale de cet écart. Aussi, il diminue dans l'intervalle de pression 80.4 et 135.8 GPa (le tableau (C-41 et 43)).

Pour le MgO, sa vitesse hydrodynamique est toujours supérieure à celle de la matière terrestre. La valeur d'écart entre eux diminue à partir de la valeur maximale mentionnée précédemment jusqu'à la seconde valeur de la pression 23.8 GPa (le tableau (C-42 et 43)).

La vitesse hydrodynamique des composants de (Mg_(1-x),Fe_x)O est inférieure à celle du modèle PREM dans un seul intervalle pour les composants de x=1 à 10 par deux points identiques; de x=11 à 21, de x=24 à 27 et de x=54 à 99 dans un seul intervalle mais par un seul point identique; dans deux intervalles pour les composants x=22, 23, 28 à 47 par trois points identiques; de x=48 à 53 dans deux intervalles aussi mais par deux points identiques. La différence minimale et le taux minimal apparaissent à différentes pressions dont la plupart sont les limites des intervalles ou au voisinage des points identiques (les tableaux (C-43 et 44)).

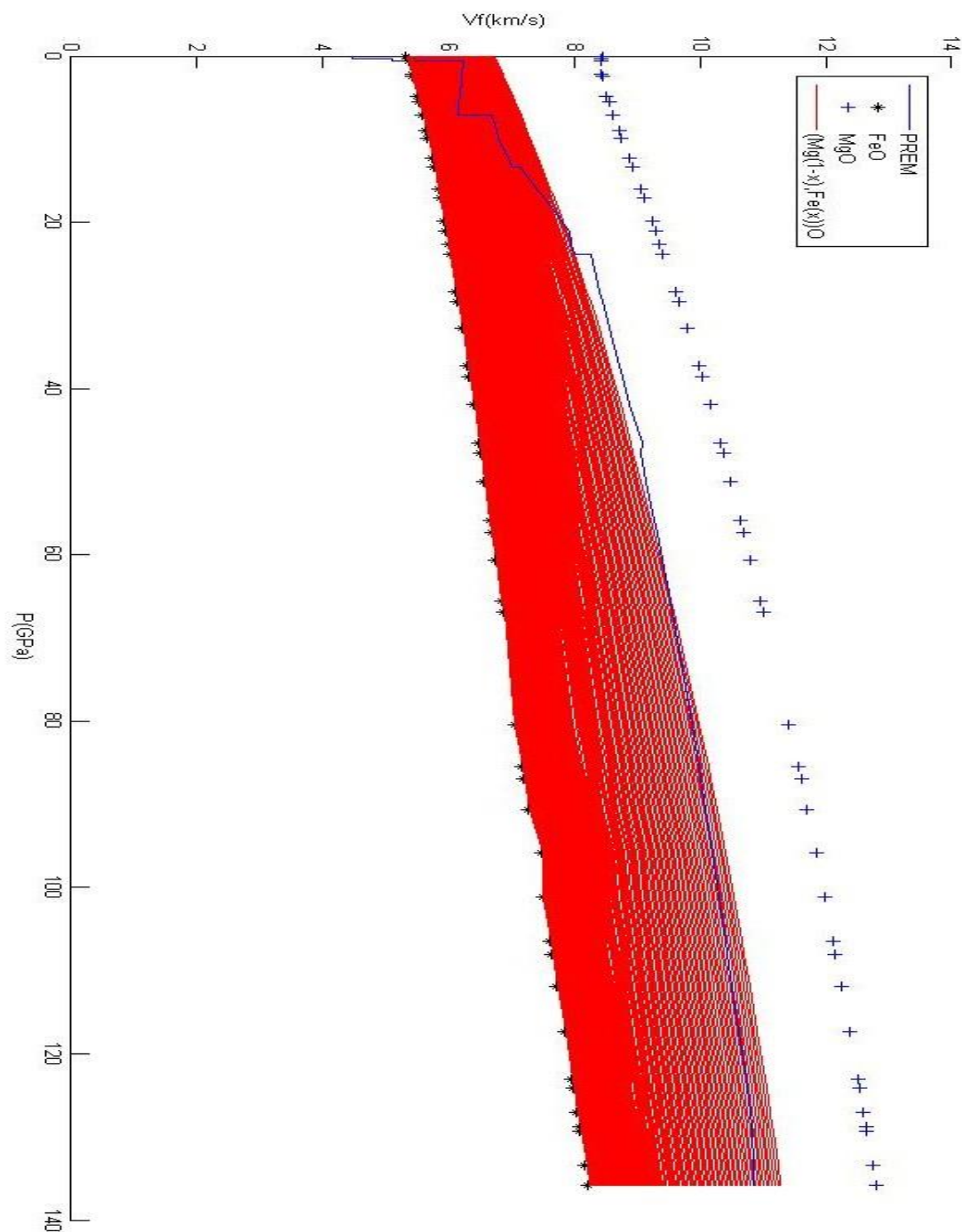


Figure (V-7): représente les variations de vitesses hydrodynamiques V_f en fonction de pression de modèle PREM pour FeO, MgO, les composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et en modèle PREM.

C*h***apitre VI:**

Comparaison des résultats avec la bibliographie

Introduction:

Dans ce dernier chapitre, on procédera à une étude comparative de nos résultats et modèles avec ceux présentés par les différents auteurs cités dans la recherche bibliographique.

Certes, ces travaux se différencient entre eux de plusieurs côtés tels que les propriétés étudiées dans chacun, le paramètre essentiel de variations du travail dont le nôtre est la pression, l'intervalle de l'étude ou la nature du composant étudié.

Pour cela et pour qu'elle soit méthodique, on la divisera notre comparaison en trois parties selon le composant traité. A noter, que lors de la comparaison, on s'est limité aux valeurs et propriétés objets de chaque étude et présentés par les auteurs, néanmoins, il est certain que la différence avec ceux-ci réside bien dans :

- La différence entre les méthodes de calcul.
- La différence entre le calcul et l'expérimentation.
- La différence dans les conditions thermodynamiques approuvées.
- La différence dans les échantillons utilisés dans l'étude.

VI-1 La comparaison aux travaux composant FeO:

- La comparaison avec l'étude de Brown et Shankland 1981 [63]:

A travers la figure (VI-1, A, B) on peut observer que le changement de phase n'apparaît pas dans l'étude de Brown et Shankland, de même pour ce qui des profils de la densité et les deux vitesses d'ondes longitudinales et transversales. Les valeurs de la densité dans nos calculs, sont à supérieures en les comparants à celles issues de l'étude de Brown et Shankland alors que leurs valeurs des vitesses d'ondes longitudinales et transversales sont supérieures à celles obtenues dans le présent à la phase B1. Quant à la deuxième phase, elles sont inférieures. Une concordance claire apparaît dans la vitesse d'onde hydrodynamique entre les deux travaux.

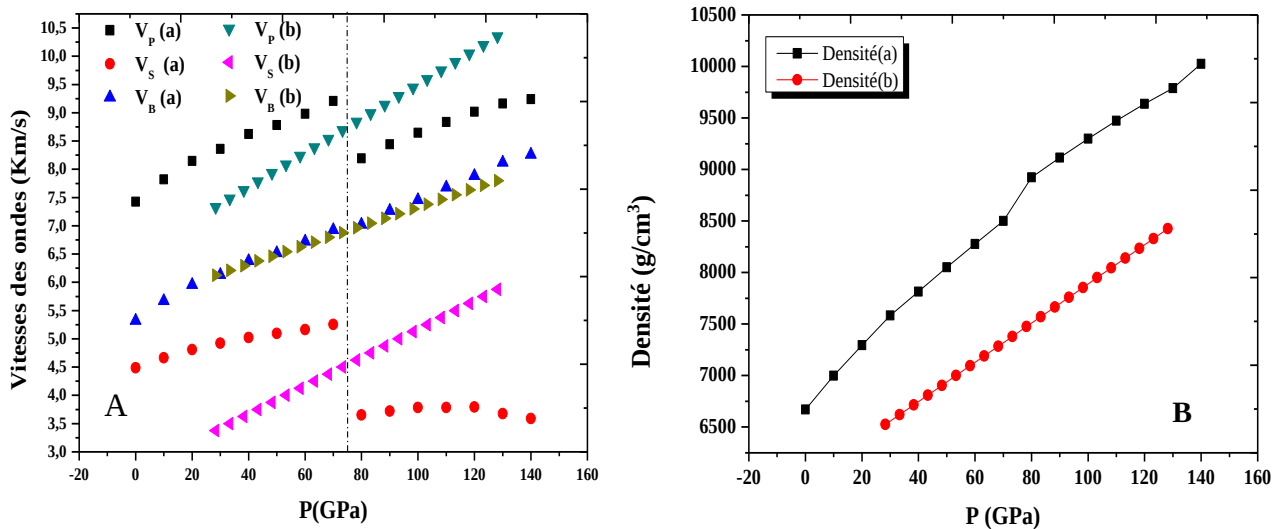


Figure (VI-1): représente le changement des vitesses d'onde (A) et de la densité (B) en fonction de la pression de l'oxyde de Fer dans notre étude (a) [18] et l'étude de Brown et Shankland (b) [63].

- La comparaison avec l'étude de T. Yagi et al 1988 [70]:

Sur la figure (VI-2), on peut remarquer que la variation des valeurs de la densité suit la évolution malgré, qu'il est évident que nos valeurs sont nettement supérieures à l'autre étude mais même au changement de phase, il y a une différence dans cette évolution où on observe que nos valeurs augmentent à l'encontre de l'autre étude où l'augmentation est moins prononcée et a tendance à se stabiliser.

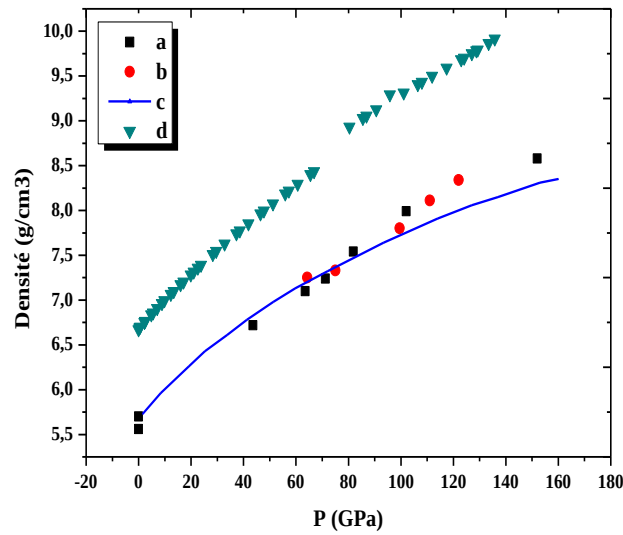


Figure (VI-2): représente le changement de la densité en fonction de la pression de l'oxyde de Fer issu; de l'étude de Jeanloz and Ahrens 1980 [62] (a), T. Yagi et al 1988 (b) [70], par calcul Hugoniot (c) et notre étude (d).

➤ La comparaison avec l'étude d'Y. Fei et H. Mao 1994 [73]:

En observant les valeurs du paramètre de la maille présentée dans le tableau (II-2), il y a une convergence claire entre le résultat de ce travail et le notre.

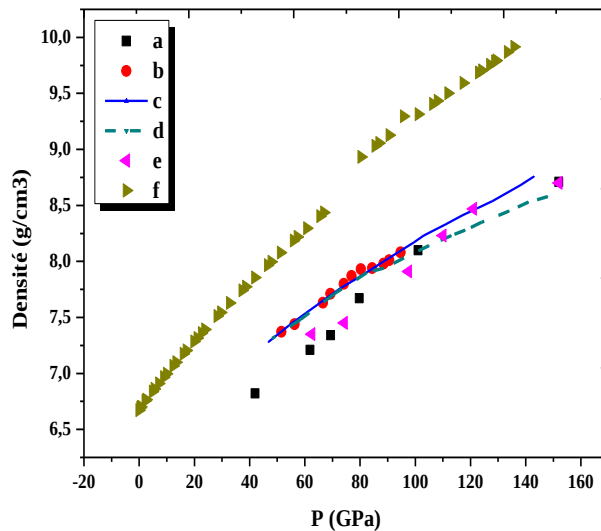


Figure (VI-3): représente le changement de la densité (B) en fonction de la pression de la phase B8 de l'oxyde de Fer issu; de Hugoniot data (a) et (e), de l'étude de Y. Fei et H. Mao 1994(b) [73], de l'étude par "shock compression" (c), de l'étude par la maximum filtration de statique compression data à 900 K(d) et notre étude (f).

En plus, à partir de la figure (VI-3), on note les mêmes remarques rapportées dans la précédente comparaison où nous observons une conformité claire dans le changement de densité avec le changement de pression entre les deux études, avec une claire supériorité dans le résultat de notre travail que celles résultant de l'autre travail avec une distinction lors du changement de phase.

➤ La comparaison avec l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 [76]:

Comme la montre le tableau (II-2), il y a une concordance concernant le paramètre de la maille entre cette étude et notre travail ainsi que le travail (20-Fei (1996)) où notre résultat fournit la valeur la plus élevée, même remarque pour ce qui est du module d'incompressibilité.

De la figure (VI-4, A, B), il existe une concordance claire dans la variation du taux volumique avec la pression entre leurs résultats et ceux de la présente étude où nos valeurs sont plus supérieures. Aussi, on observe que les valeurs du module d'incompressibilité en fonction de la fraction molaire du fer dans le FeO suivent une relation linéaire ce qui diffère de l'autre étude.

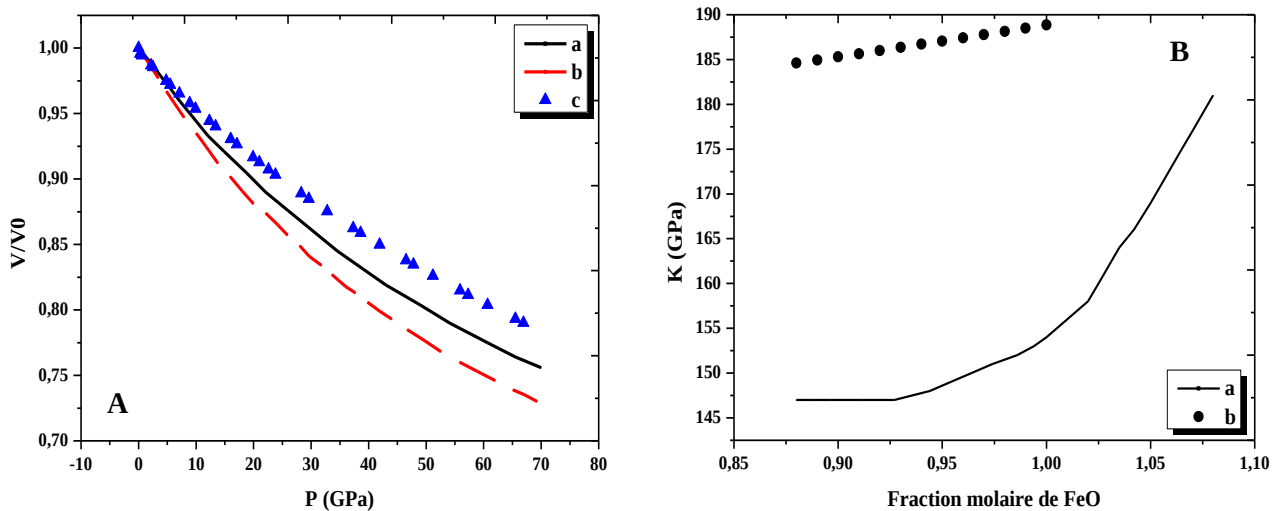


Figure (VI-4): représente (A) le changement du taux volumique en fonction de la pression de l'oxyde de Fer issu de l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 [76]; (a) pour $K_0=180$ GPa, (b) pour $K_0=150$ GPa (c) notre étude. (B) Module d'incompressibilité K en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants Magnésio-wüstite (a) tiré de l'étude de S. Stølen et F. Grønvold 1996 (b) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de M. Murakami et al 2004 [79]:

On observe à partir du tableau (II-2) que la valeur du module d'incompressibilité donnée par ce travail est absolument la plus faible comparée aux autres études et elle est très inférieure à la valeur de nos calculs.

De la figure (VI-5) la concordance entre les deux études apparaît dans la variation de taux volumique en fonction de pression, seulement jusqu'à la pression 70 GPa mais avec des valeurs supérieures et dans la phase B1, mais au changement de phase, la différence est claire où le résultat de notre calcul montre que la densité augmente à travers la transition de phase de B1 - B8 d'environ 5 %, au moment où le résultat de cette étude est de 2 % comparé à celui du travail de Jeanloz et Ahrens 1980 [62] où elle est précisée par 4%.

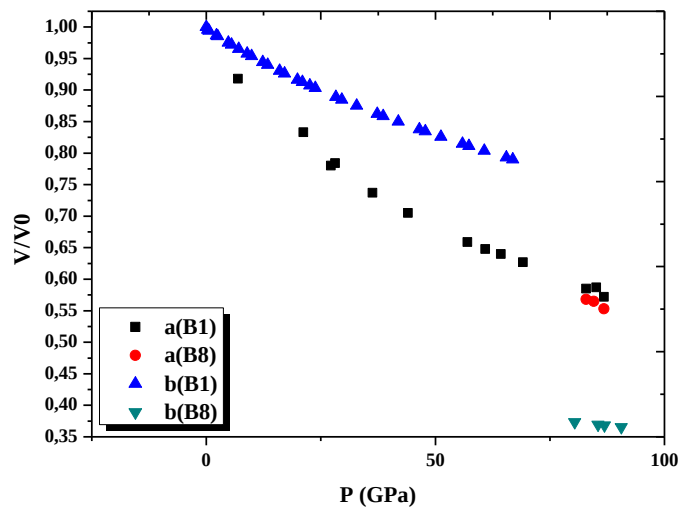


Figure (VI-5): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les deux phases de l'oxyde de Fer tirée de l'étude de M. Murakami et al 2004 [79] et notre étude (b).

- La comparaison avec l'étude de R. A. Fischer et al 2011 [83]:

La valeur du module d'incompressibilité présentée par ce travail, comme le montre le tableau (II-2) est très inférieure à celle obtenue dans notre travail.

A travers la figure (VI-6, A, B) il y a une conformité au changement de taux volumiques en fonction de la pression dans les deux phases de l'Oxyde de Fer, mais les valeurs issues de

notre étude sont supérieures pour la phase cubique et tout à fait le contraire pour la phase hexagonale.

Comme le montre la figure (VI-6, C), nos valeurs pour la densité dans la phase hexagonale sont nettement inférieures par rapport à ceux obtenues par Fischer et al, 2011 [83] malgré la concordance dans l'allure de l'évolution.

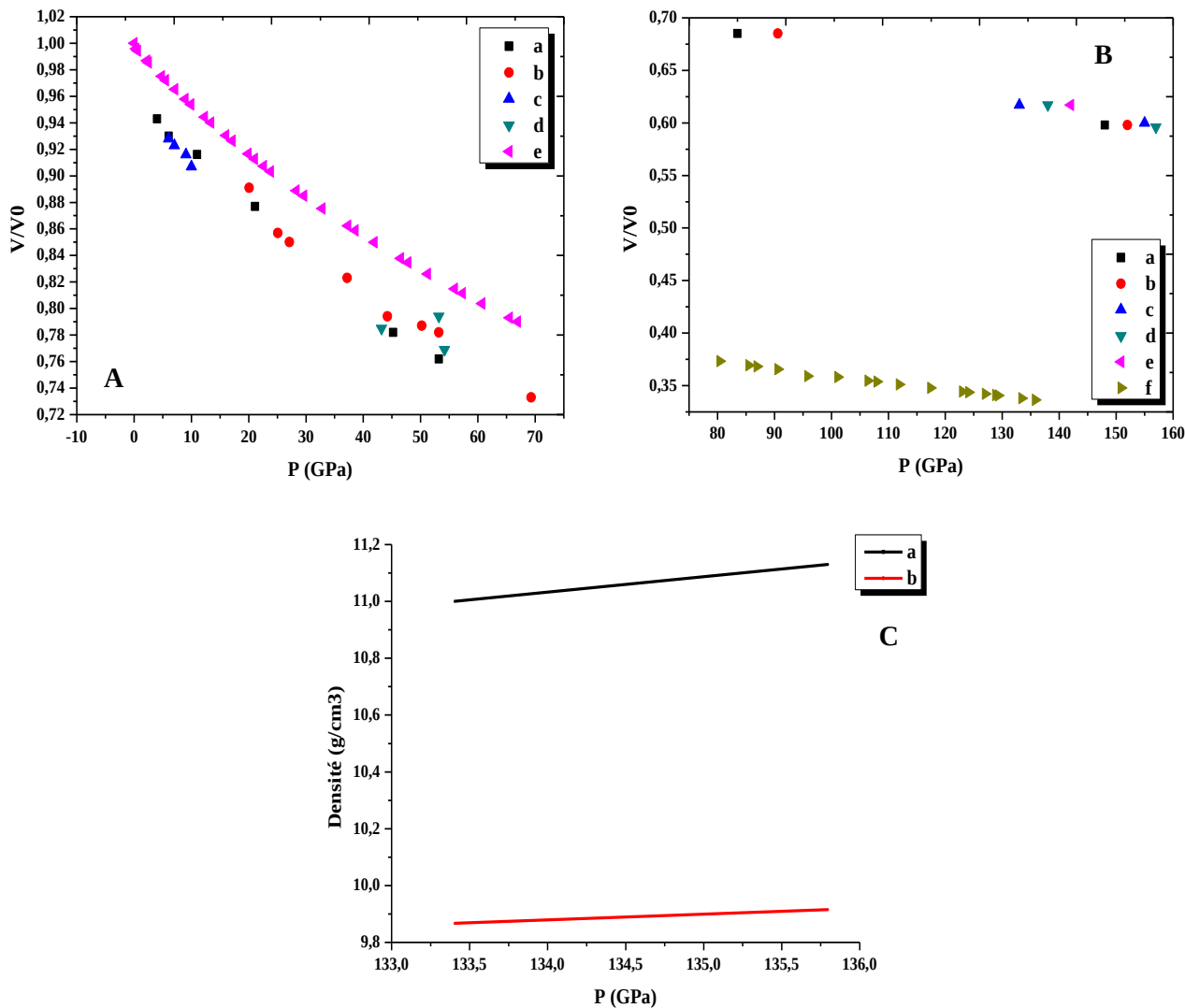


Figure (VI-6): représente(A) le changement du taux volumique dans la phase B1 en fonction de la pression de l'oxyde de Fer tiré de l'étude de R. A. Fischer et al 2011 [83]; (a) $T=1000-1500$ K, (b) $T=1500-2000$ K, (c) $T=500-1000$ K, (d) $T=2000-2500$ K (e) notre étude. (B) Dans la phase B8 tiré de l'étude de R. A. Fischer et al 2011 [83]; (a) à $T=1000-1500$ K, (b) à $T=500-1000$ K, (c) à $T=1500-2000$ K, (d) à $T=2000-2500$ K, (e) à $T=2500-3000$ K (f) notre étude; (C) variation de la densité avec la pression (a) Fischer et al, 2011 (b) notre étude.

VI-2 La comparaison aux travaux composant MgO:

- La comparaison avec l'étude de M. Liu et L. Liu 1987 [88]:

D'après la figure (VI-7), l'aspect de décroissance des valeurs est commun pour les deux études sauf que nos valeurs, elles sont inférieures par rapport à celles présentés par les auteurs pour les deux oxydes. Aussi, la valeur du module d'incompressibilité obtenue dans notre étude est proche par rapport à celle avancée par les auteurs comme on peut le constater dans le tableau (II-3).

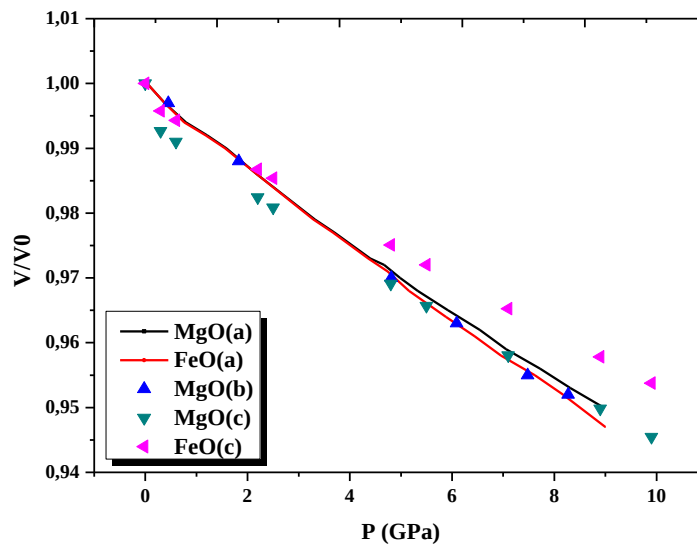


Figure (VI-7): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression du MgO et la phase B1 pour FeO issu de l'étude de M. Liu et L. Liu 1987 [88] (a), (b) et notre étude (c).

- La comparaison avec l'étude d'A. Yoneda 1990 [91]:

En observant la figure (VI-8), nos résultats concordent avec les valeurs obtenues à partir de la deuxième approximation lors de l'application de l'équation d'état de Birch-Murnaghan EOS par les auteurs pour le calcul du taux volumique où à la pression de 150 GPa les valeurs sont les plus proches. Aussi, la partie B de cette figure, montre une claire harmonie vers le sens du changement du module d'incompressibilité entre les deux travaux, mais la valeur primaire (à la pression 0 GPa) issue de notre calcul est inférieure.

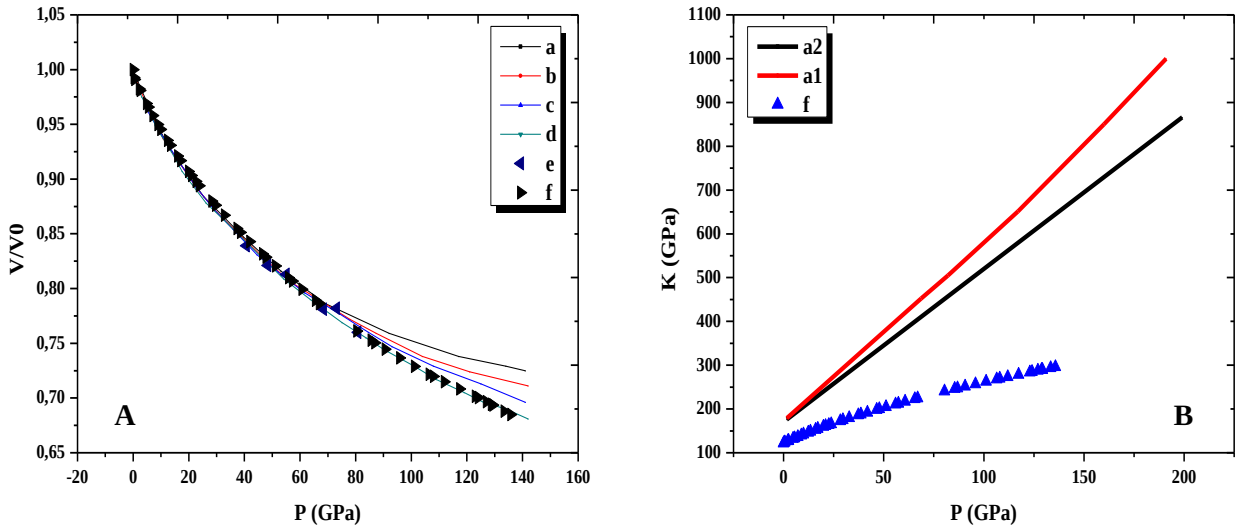


Figure (VI-8): représente(A) isothermes du changement du taux volumique en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de A. Yoneda 1990 à 300K [91]; (a) et (b) première et deuxième approximation calculées à partir de the shock-EOS pour, (c) et (d) première et deuxième approximation calculée par l'utilisation de l'équation d'état de Birch-Murnaghan EOS, (e) résultats de compression statique sur DAC de l'étude de Mao and Bell, 1979;(f) notre étude.(B) le module d'incompressibilité K en fonction de la pression (a1) et (a2) première et deuxième approximation issues de l'étude de Yoneda 1990, (f) notre étude.

➤ La comparaison avec l'étude de L. Stixrude 1998 [03]:

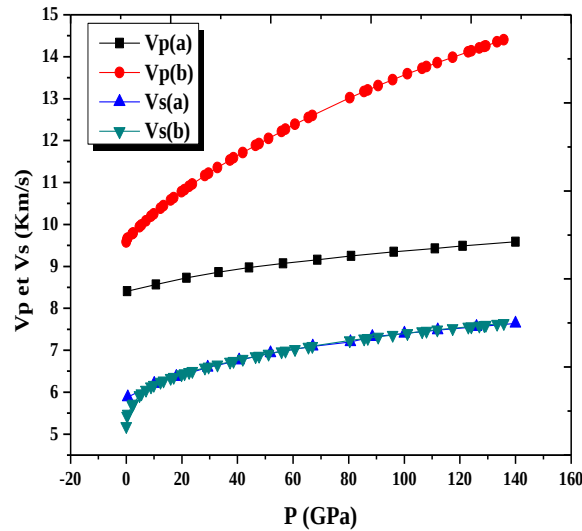


Figure (VI-9): représente le changement des deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de (a) L. Stixrude 1998 [03] (b) notre étude.

On remarque que nos valeurs pour la vitesse de l'onde longitudinale sont supérieures par rapport à celle obtenues par l'auteur à l'encontre de la vitesse de l'onde transversale où les valeurs sont intimement proches sauf pour la première valeur à 0 GPa. Aussi, la figure (VI-9) montre la différence de l'évolution de la vitesse de l'onde longitudinale dans notre travail avec l'augmentation de la pression où elle est bien prononcée aux valeurs extrêmes par rapport à l'autre étude où elle a tendance à rester stable.

➤ La comparaison avec l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 1999 [94]:

A partir de la figure (VI-10), on remarque les valeurs des deux modules sont proches dans les deux études surtout à la valeur de pression de 20 GPa ainsi que l'aspect linéaire de l'augmentation de ces valeurs en fonction de la pression. On note aussi, qu'il y a une différence qui apparait aussi dans la pression du début (0 GPa) pour le module G où notre valeur est inférieure.

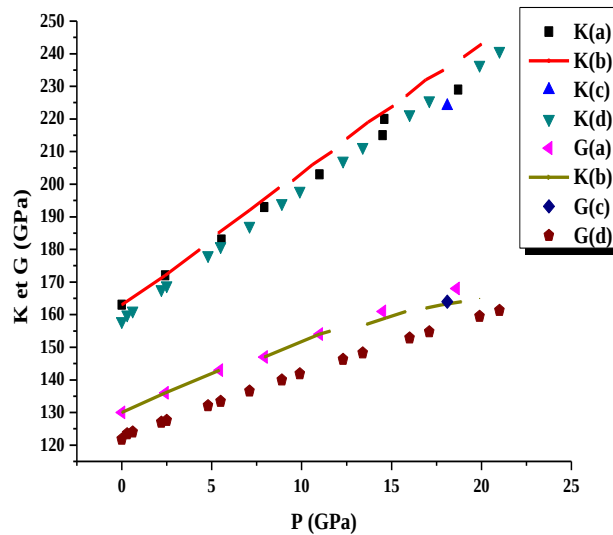


Figure (VI-10): représente le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 1999 [94]; (a) données expérimentales de Sinogeikin et Bass, 1999, (b) meilleur fitting des points par Sinogeikin et Bass, 1999, (c) extrapolation des données de A. Yoneda 1990 [91] (d) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de B. B. Karki et al 1999 [95]:

De la figure (VI-11, A, B, C), on voit que malgré la différence des valeurs, le profil de d'évolution est concordant. Aussi, on remarque que les vitesses des ondes de notre travail sont proches pour l'isotherme $T=300$ K alors que pour la densité, elles sont entre $T=1000$ K et $T=2000$ K.

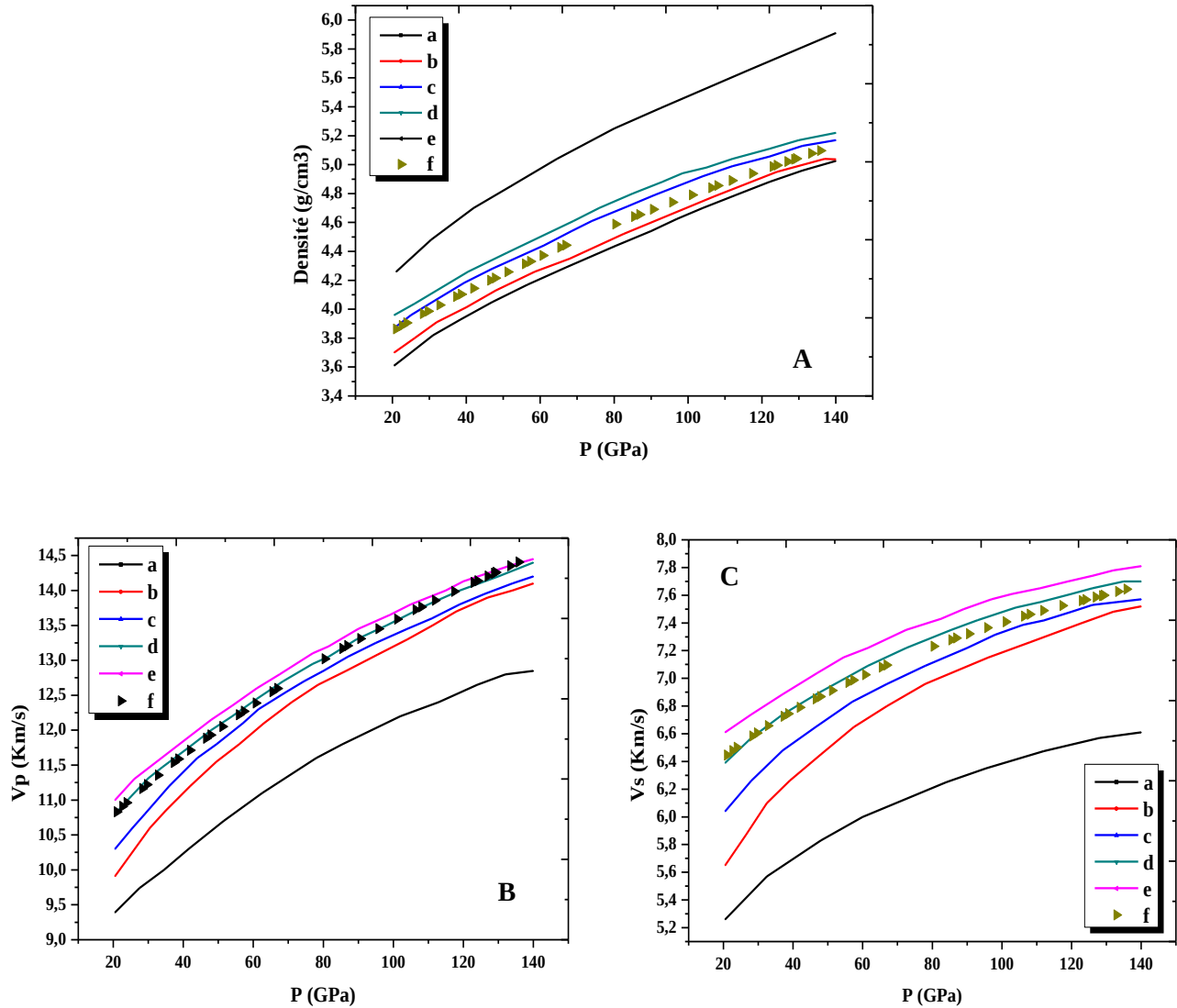


Figure (VI-11): représente (A) le changement de la densité, (B) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s (C) en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium (a) issu de l'étude de T. S. Duffy et D. L. Anderson 1989, (b) B. B. Karki et al 1999 [95]; à $T=2000$ K, (c) à $T=1000$ K, (d) à $T=300$ K, (e) à $T=3000$ K (f) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 2000 [97]:

La figure (VI-12, A, B) montre l'aspect linéaire de l'évolution de la vitesse d'onde longitudinale commun aux deux études, malgré que nos valeurs soient inférieures. Quant à la vitesse de l'onde transversale, on remarque qu'aux basses pressions, elle ne suit pas un profil linéaire et ce n'est qu'aux hautes valeurs de pression qu'elle a une évolution linéaire. Il faut signaler que nos valeurs sont toujours inférieures à celles de l'autre étude.

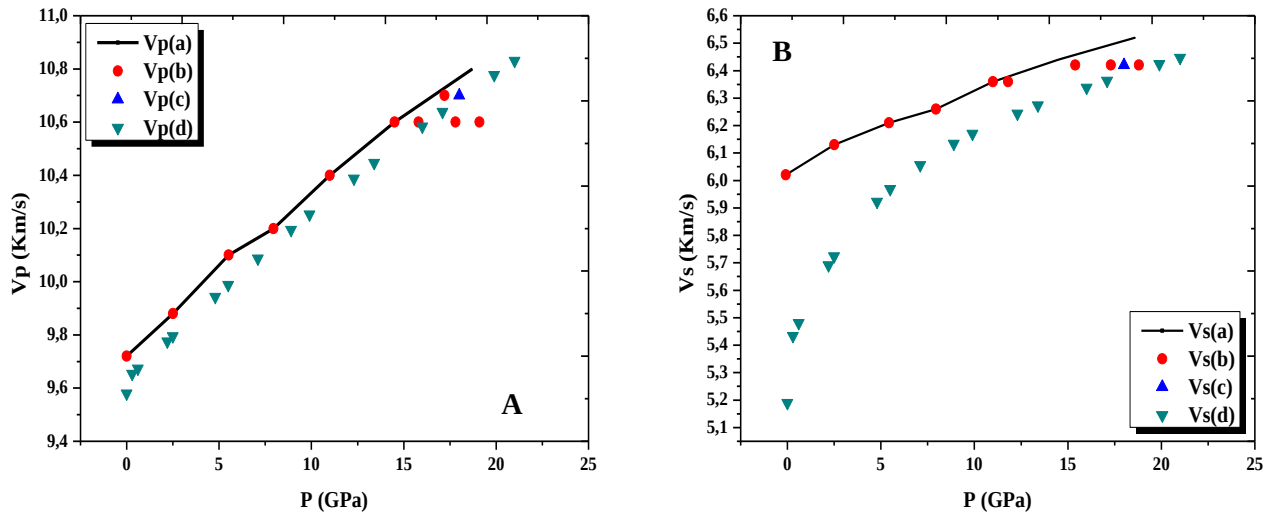


Figure (VI-12): représente (A) le changement des deux vitesses d'onde longitudinale V_p (B) transversale V_s en fonction de la pression pour l'oxyde de magnésium issu de l'étude de S. V. Sinogeikin et J. D. Bass 2000 [97]; (a) obtenues par "finite strain fits" selon les auteurs, (b) données expérimentales des auteurs, (c) données à partir de la compression non hydrostatique des mêmes auteurs (d) notre étude.

- La comparaison avec l'étude d'A. Hachemi et al 2009 [101]:

À partir de figure (VI-13, A, B), on peut observer que les valeurs du module d'incompressibilité sont proches de l'autre étude avec un profil linéaire commun aux deux travaux. Pour le module de cisaillement, on remarque qu'au-dessous de 60 GPa, le profil linéaire n'est pas bien prononcé par rapport aux valeurs de pression supérieures et que nos valeurs sont inférieures à celles de l'autre étude. Pour les vitesses des ondes longitudinale et transversale, elles sont nettement supérieures et ne présente pas une évolution linéaire aux basses pressions à l'encontre de l'autre étude.

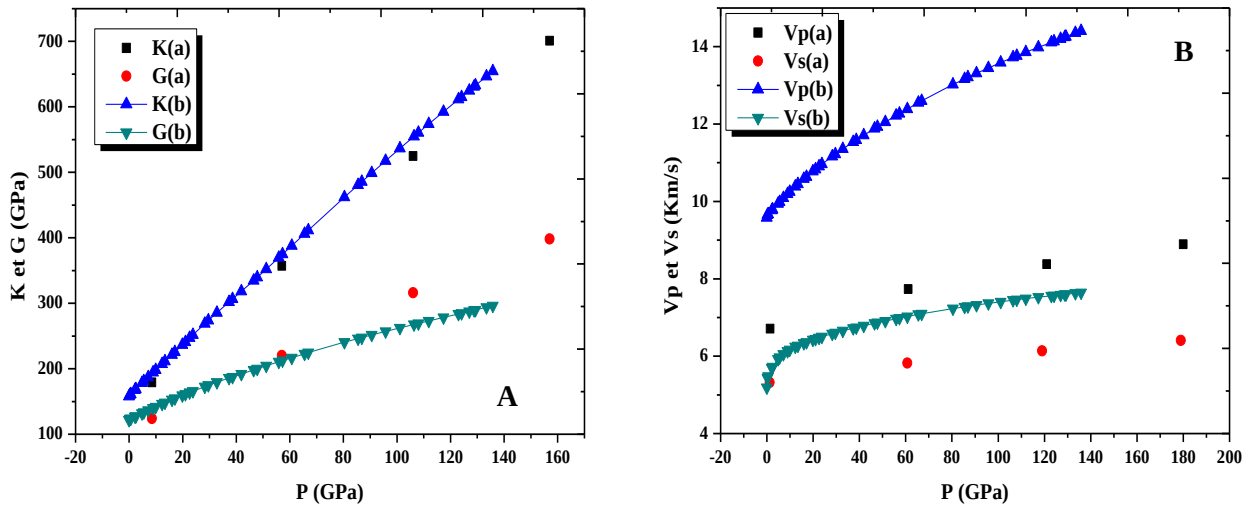


Figure (VI-13): représente (A) le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (B) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la pression pour l'Oxyde de Magnésium (a) issu de l'étude de A. Hachemi et al 2009[101] (b) notre étude.

À partir de figure (VI-13, A, B), on peut observer que les valeurs du module d'incompressibilité sont proches de l'autre étude avec un profil linéaire commun aux deux travaux. Pour le module de cisaillement, on remarque qu'au-dessous de 60 GPa, le profil linéaire n'est pas bien prononcé par rapport aux valeurs de pression supérieures et que nos valeurs sont inférieures à celles de l'autre étude. Pour les vitesses des ondes longitudinale et transversale, elles sont nettement supérieures et ne présente pas une évolution linéaire aux basses pressions à l'encontre de l'autre étude.

VI-3 La comparaison aux travaux composant magnésio-wüstite:

- La comparaison avec l'étude d'I. Jackson et al 1978 [102]:

Concernant la densité, la figure (VI-14, A) montre les différentes études présentent des valeurs cohérentes jusqu'à la fraction $x=22$ où par la suite, nos valeurs gardent leurs aspect linéaire contrairement à celles avancées par les auteurs qui deviennent nettement inférieures. Pour le module d'incompressibilité, les valeurs sont cohérentes entre elles malgré que nos résultats soient légèrement supérieurs à ceux donnés par les auteurs. Par contre, pour le module

de cisaillement, on observe un profil différent où nos valeurs augmentent linéairement avec la transition vers l'oxyde de fer tandis que les auteurs montrent l'effet inverse. Nos valeurs des vitesses d'onde longitudinale et transversale présentent le même profil de décroissance et elles sont nettement supérieures avec l'augmentation de la teneur en fer par rapport à celles obtenues par les auteurs.

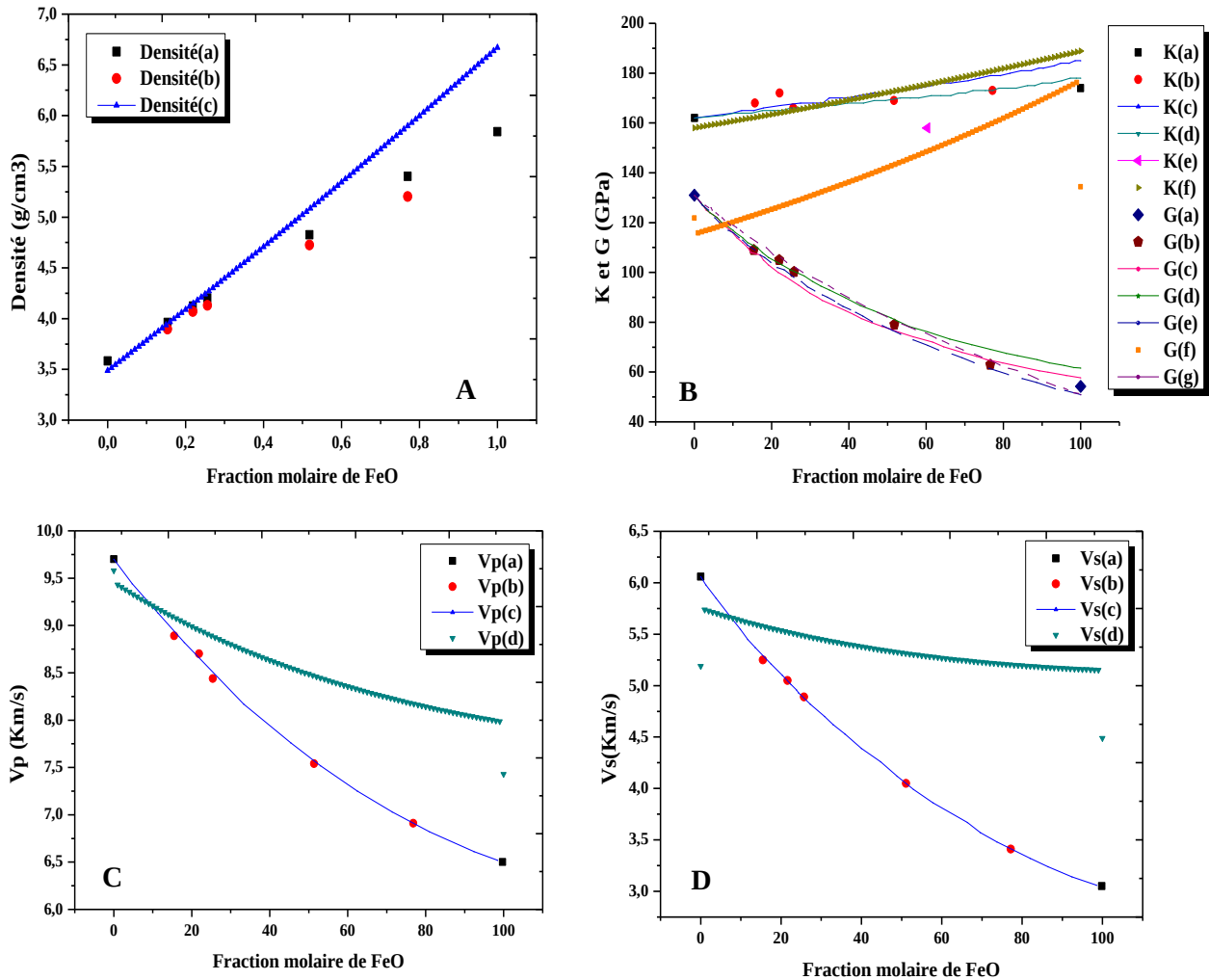


Figure (VI-14): représente (A) le changement de la densité en fonction de la fraction molaire de FeO présente dans le composant magnésioiwüstite (a) l'étude de I. Jackson et al 1978 [102]; (b) les mesures par rayons X par les auteurs, (c) notre étude. (B) Le changement du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (a) l'étude de Spetzler, 1970 pour MgO et Mizutani et al, 1972 pour FeO, (b) valeurs pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (c) courbe pour quatre composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (d) courbe pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs (e) de Rosenhauer et al 1976, (f) notre étude (g) la courbe issue de l'utilisation des bornes de Hashin-Shtrikman. (C) et (D) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s (a) pour des résultats de l'étude de Spetzler 1970 pour MgO et Mizutani et al 1972 al pour FeO selon Jackson et al 1978; (b) pour cinq composants magnésioiwüstite selon les auteurs, (c) courbe de ces composants selon les auteurs (d) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de L. J. Bonczar et E. K. Graham 1982 [103]:

A signaler que les valeurs du module de cisaillement et la vitesse des ondes transversales issues de ce travail correspondent aux valeurs de l'étude précédente, autrement dit, elle est très faible par rapport à ce que nous avons calculé, alors qu'elle est légèrement inférieure à celle de l'Oxyde de Magnésium. Quant au module d'incompressibilité et la vitesse des ondes longitudinales, les valeurs obtenues sont légèrement plus élevées que celles de Karki et al, 1997 [17]. Quant à l'Oxyde de Fer, ses valeurs sont ici inférieures à celle de notre calcul.

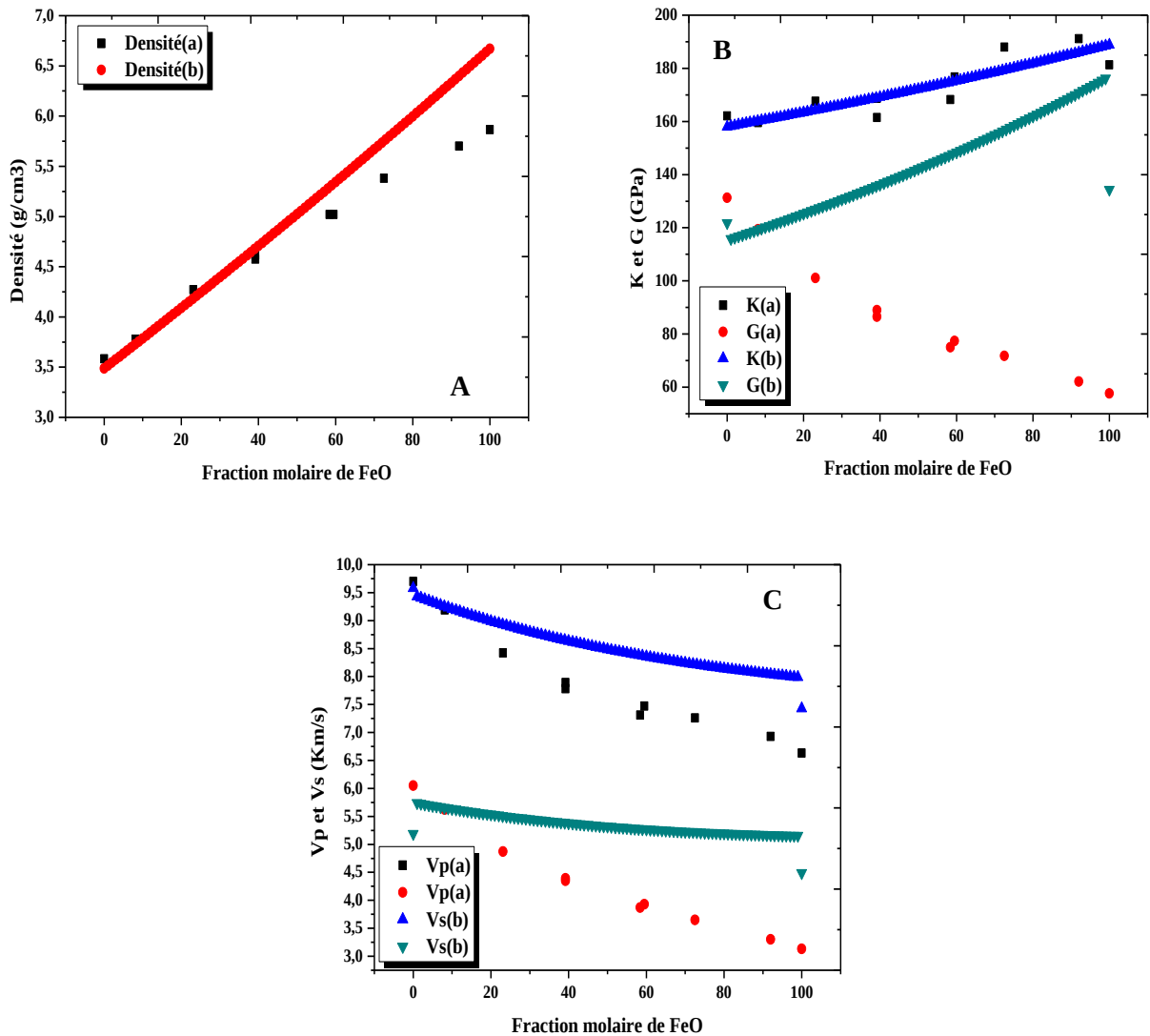


Fig (VI-15): représente (A)le changement de la densité, (B)du module d'incompressibilité K et de cisaillement G, (C) et (D) les deux vitesses d'onde longitudinale V_p et transversale V_s en fonction de la fraction molaire en présence du Fer dans les composants magnésio-wüstite, (a) issu de l'étude de L. J. Bonczar et E. K. Graham 1982 [103] (b) notre étude.

Pour la densité, on remarque que jusqu'au composant de Magnésioiwüstite $x=40$, les valeurs sont très proches à la différence de l'étude précédente où la déviation avait commencé au titre $x=22$ (voir figure (VI-15, A)). Aussi, l'évolution du module d'incompressibilité est presque la même entre les deux études.

- La comparaison avec l'étude de M. S. Vassiliou et Thomas J. Ahrens 1982 [104]:

A rappeler que ce travail a été effectué sur le composant magnésioiwüstite $x=40$ et la figure (VI-16), montre clairement que les valeurs obtenues dans notre travail sont supérieures de loin par rapport à celles avancées par ces auteurs malgré l'aspect d'évolution commun des courbes.

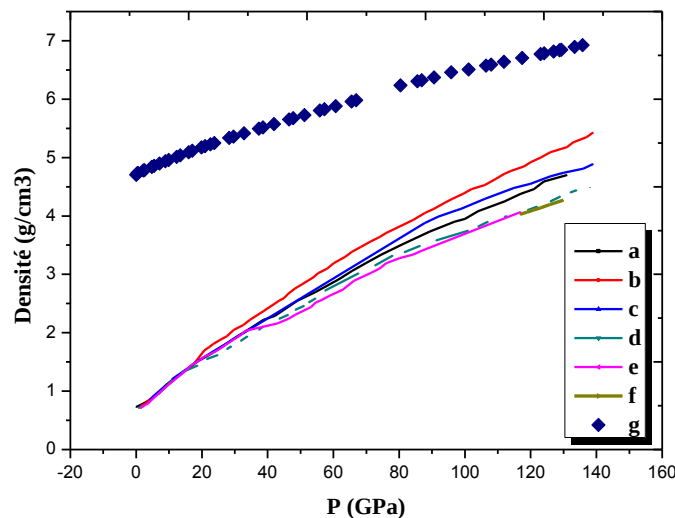


Fig (VI-16): représente le changement de la densité et en fonction de la pression pour le composant magnésioiwüstite pour; $x=40$ (a, b, c, d, e et f) valeurs issues de l'étude de A. M. S. Vassiliou et Thomas J. Ahrens 1982[104] (g) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de R. M. Hazen et R. Jeanloz 1984 [66]:

A partir de la figure (VI-17), on observe que les valeurs obtenues dans notre travail sont inférieures à celles suggérées par les auteurs pour les mêmes composants de magnésioiwüstite mais tendent à se rapprocher vers la transition à l'oxyde de fer pur.

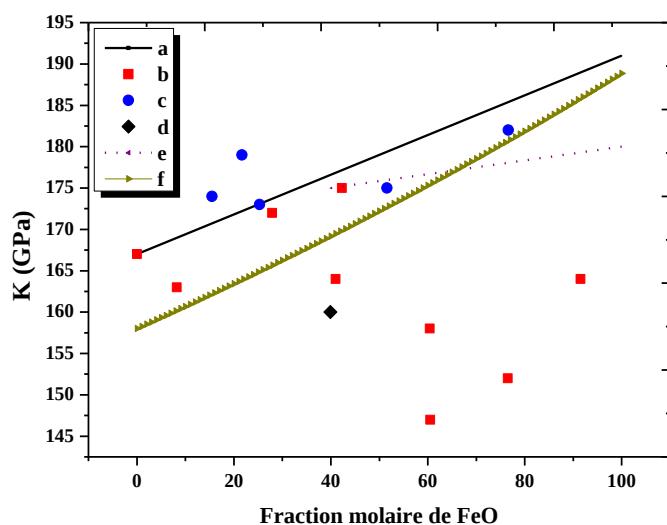


Figure (VI-17): représente le changement du module d'incompressibilité en fonction de la fraction molaire en présence du fer dans les composants magnésio-wüstite (a) issus de l'étude de Jeanloz and Thompson 1983, (b) Bonczar and Graham 1982, (c) Jackson et al 1978, (d) Rosenbauer et al 1976, (e) les déviations de l'idéalité suggérées par R. M. Hazen et R. Jeanloz 1984[66] (f) notre étude.

➤ La comparaison avec l'étude de P. Richet et al 1989 [105]:

A noter que la valeur du module d'incompressibilité avancé par cette étude pour l'Oxyde de Fer est très inférieure par rapport à notre calcul, alors qu'elle est légèrement supérieure à celle du second oxyde.

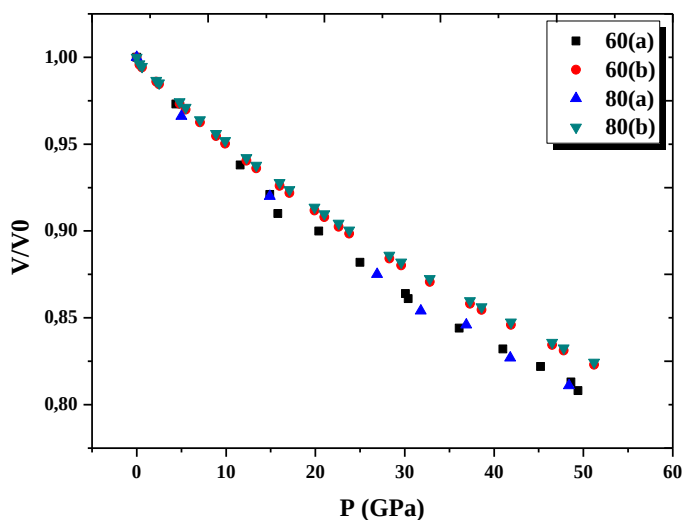


Figure (VI-18): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=60$ et $x=80$ (a) issu de l'étude de P. Richet et al 1989[105] (b) notre étude.

D'après la figure (VI-18), on observe que le taux volumique dans notre calcul est supérieur à celui présenté par les auteurs pour les deux composants magnésio-wüstite étudiés en particulier après la pression 10 GPa, car au-dessous de cette valeur, la différence est presque nulle exception pour l'anomalie à la pression 5 GPa pour le composant magnésio-wüstite pour $x=80$.

➤ La comparaison avec l'étude de J. Hama et K. Suito 1999 [106]:

A travers les valeurs données du module d'incompressibilité des composants de magnésio-wüstite dans cette étude, elles sont inférieures aux résultats de notre calcul pour $x=60$ et $x=80$ et plus grandes pour $x=20$ et $x=40$ et pour l'oxyde de magnésium.

Comme le montre la figure (VI-19, A), l'aspect général de la variation de la densité en fonction du titre du fer dans les composants de magnésio-wüstite est le même pour les deux études néanmoins nos valeurs sont plus supérieures. De même pour les isobares de la vitesse d'onde longitudinale V_p . Quant à la vitesse de l'onde transversale, c'est l'inverse qui est observé dans la figure (VI-19, C) où nos valeurs sont inférieures. Pour ce qui est de la vitesse hydrodynamique, même s'il semble que pour la pression 0 GPa, la différence est claire mais pour des valeurs supérieures de la pression ce n'est pas évident.

On remarque selon la figure (VI-20, A, B, C, D, E, F), tous les paramètres suivent le même profil dans les deux études sauf la vitesse d'onde transversale avant la limite du manteau à savoir la pression 20 GPa. Nos valeurs pour le taux volumique et la vitesse hydrodynamique sont supérieures par rapport à celles avancées par les auteurs mais pour la vitesse d'onde longitudinale, transversale, le module d'incompressibilité ainsi que le module de cisaillement, on remarque une bonne cohérence des résultats entre les deux études.

➤ La comparaison avec l'étude de S. D. Jacobsen et al 2002 [111]:

A partir de la figure (VI-21, A, B, C), on remarque que l'ensemble des valeurs du taux volumique pour tous les composants magnésio-wüstite étudiés sont situées entre les limites pour $x=99$ et $x=1$. Aussi, à travers ces figures, on observe que nos valeurs deviennent supérieures à celles avancées par les auteurs avec l'augmentation de la fraction molaire et la pression. La figure (VI-21, D) montre la concordance de nos valeurs avec les auteurs aux basses fractions molaires du fer et ce n'est qu'à partir de la valeur $x=30$ environ que nos valeurs deviennent plus

supérieures à l'autre étude. Pour le module d'incompressibilité, la figure (VI-21, E) montre que nos valeurs concordent avec celles des auteurs jusqu'au titre $x=20$ mais après elles gardent une augmentation linéaire à l'inverse des auteurs où leurs valeurs constituent un nuage de points. L'évolution du module de cisaillement présentée dans la figure (VI-21, F), montre clairement la différence entre nos valeurs et celles des auteurs sauf pour le titre $x=5$ à peu près.

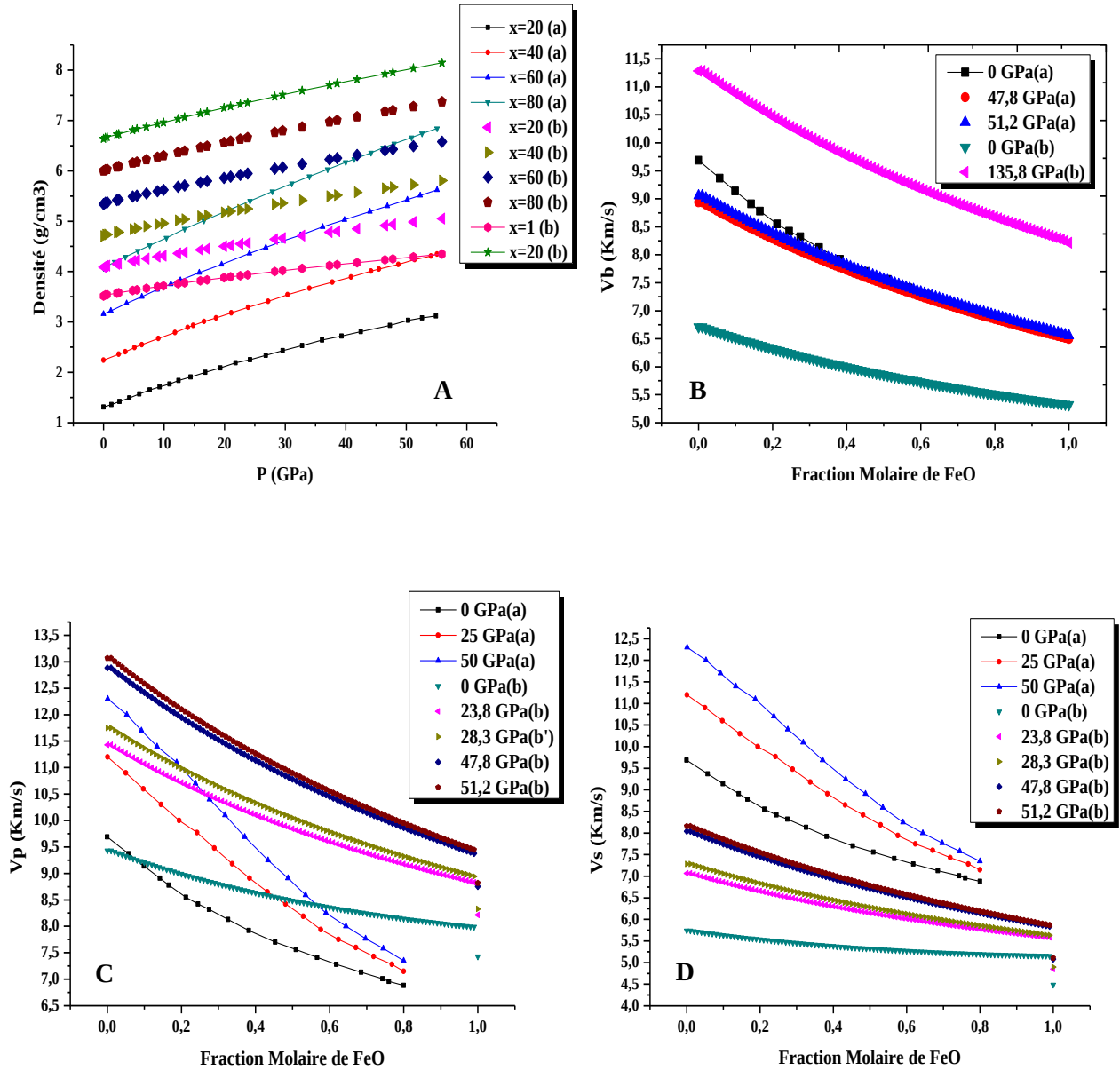


Figure (VI-19): représente le changement (A) de la densité en fonction de la pression pour les composants magnésiowüstite $x=1$, $x=20$, $x=40$, $x=60$ et $x=80$, (B) la vitesse d'onde longitudinale V_p (C) transversale V_s (D) la vitesse hydrodynamique en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants magnésiowüstite à la pression; 0, 23.8, 25, 28.3, 47.8, 50, 51.2 et 135.8 GPa respectivement : (a) issu de l'étude de J. Hama et K. Suito 1999/1061 (b) notre étude.

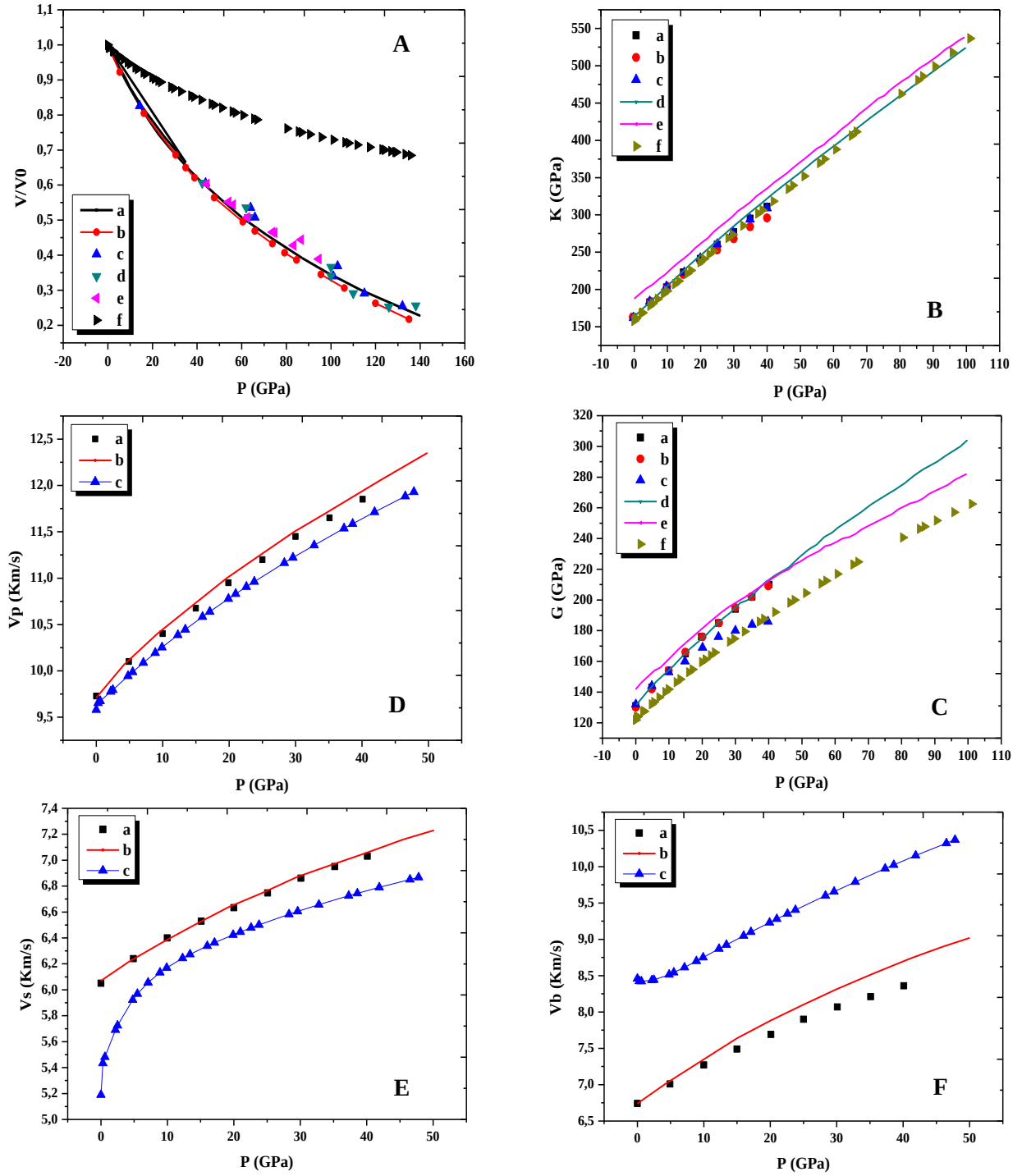


Figure (VI-20): représente (A) le changement du taux volumique suivant la pression du MgO; (B) et (C) le changement, du module d'incompressibilité K et de cisaillement G (a) issu de l'étude de Cholpelas 1996, (b) Duffy et Ahrens 1995, (c) A. Yoneda 1990 [91], (d) J. Hama et K. Suito 1999, (e) Isaak et al 1990 (f) notre étude, (D) le changement des vitesses d'onde longitudinale V_p (E) transversale V_s (F) la vitesse d'onde hydrodynamique (a) issu de l'étude de Cholpelas 1996, (b) J. Hama et K. Suito 1999 (c) notre étude.

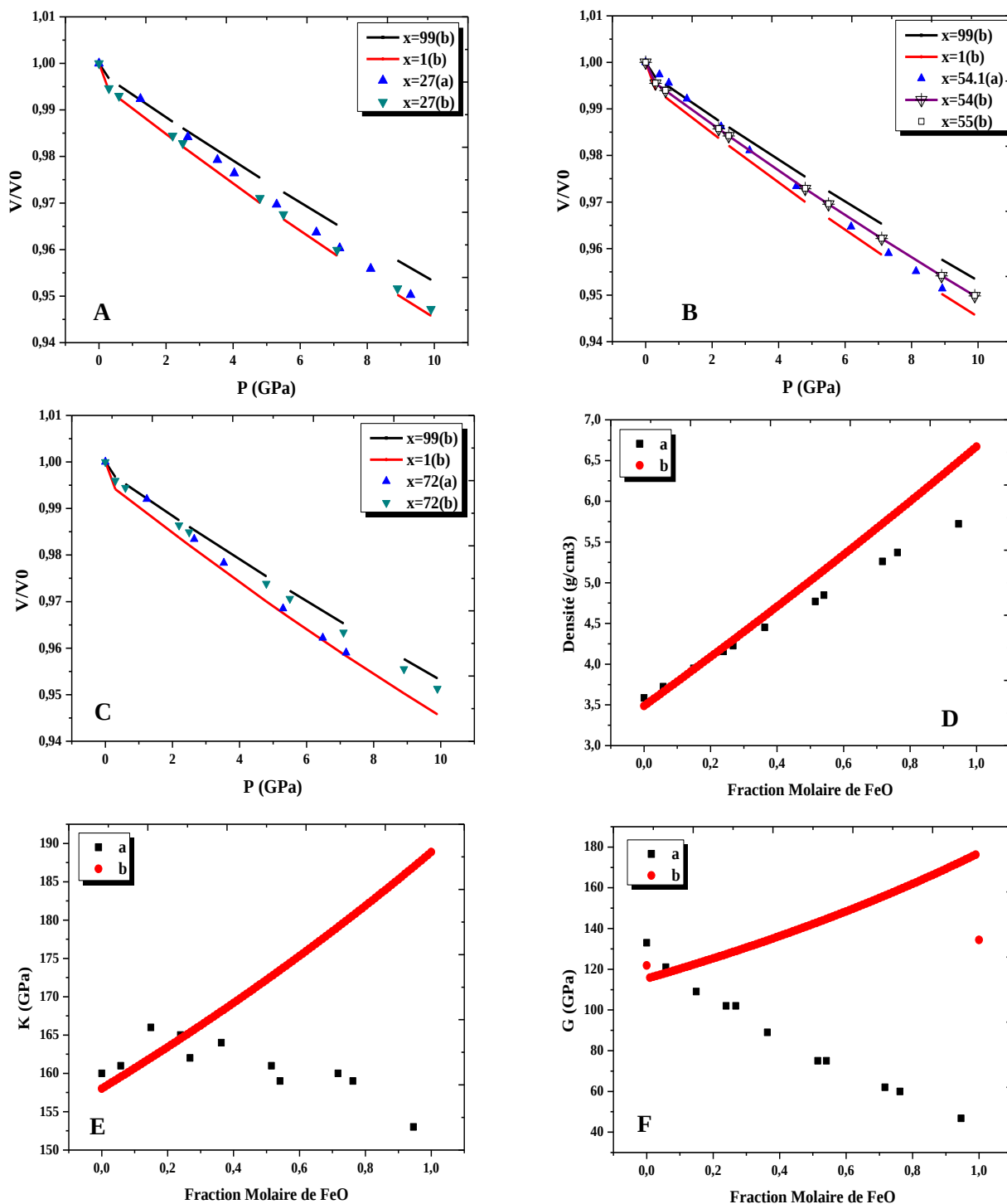


Figure (VI-21): représente (A, B et C) le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésiowüstite pour $x=1$, $x=27$, $x=54$, $x=54.1$, $x=55$, $x=72$, $x=99$, (D) de la densité, (E) du module d'incompressibilité K (F) du module de cisaillement G en fonction de la fraction molaire du fer présente dans les composants magnésiowüstite (a) issu de l'étude de S. D. Jacobsen et al 2002 [111] (b) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de S. D. Jacobsen et al 2005 [114]:

Comme on l'a déjà signalé dans la précédente comparaison, nos valeurs pour le taux volumique se situent entre les courbes des composants $x=99$ et $x=1$ comme le montre la figure (VI-22). On remarque aussi, qu'aux basses pressions, le taux volumique avancé par (S.D. Jacobsen et al 2005) est proche de notre calcul jusqu'à la pression 7 GPa pour les deux titres et même avec le changement de phase pour le titre $x=93$ au voisinage de la pression 20 GPa, nos valeurs sont supérieures. A noter que le module d'incompressibilité fourni par ce travail est inférieur à celui résultant de notre calcul, que ce soit pour le composant magnésioiwüstite pour $x=93$ ou pour $x=27$.

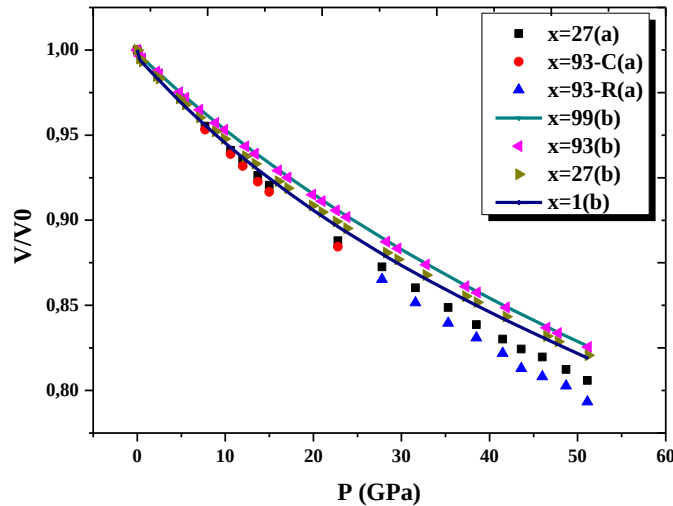


Figure (VI-22): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésioiwüstite pour $x=1$, $x=27$, $x=93$ ((C) pour la phase cubique, (R) pour la phase Rhomboédrique) et $x=99$ (a) issu de l'étude de S. D. Jacobsen et al 2005 [114] (b) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de J. Lin et al 2005 [11]:

Comme dans les travaux précédents, ce travail fournit également une valeur du module d'incompressibilité inférieur au résultat de notre travail, en particulier pour le composant magnésioiwüstite $x=17$.

D'après la figure (VI-23, A), les valeurs du taux volumique issues du travail de (J. Lin et al 2005) qui sont relatives au composant magnésioiwüstite $x=17$ sont inférieures à nos valeurs.

partir de la pression 10 GPa à peu près. Il faut signaler qu'à la pression 130 GPa, il ya un rapprochement des valeurs données par (J. Lin et al 2005 ^[11]) pour le composant magnésioiwüstite $x=17$ et celle du composant $x=99$ issue de notre travail.

En observant la figure (VI-23, B et C), on trouve qu'il ya une concordance dans la variation et les valeurs du module d'incompressibilité et la vitesse d'onde hydrodynamique, pour le composant magnésioiwüstite $x=17$ issues du travail (J. Lin et al 2005) jusqu'à la pression 60 GPa et par la suite, nos valeurs deviennent inférieures avec un aspect toujours linéaire.

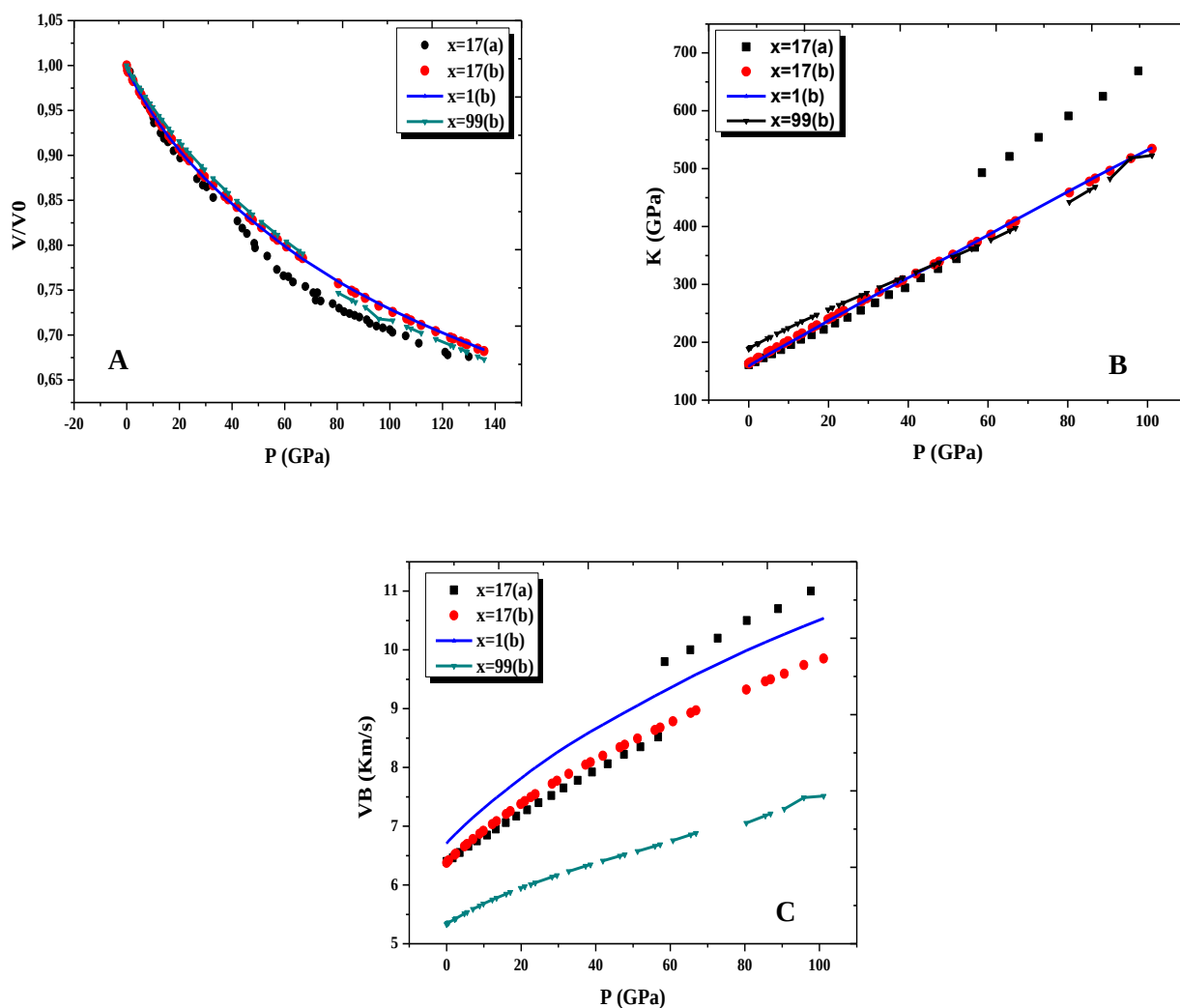


Figure (VI-23): représente (A) le changement du taux volumique, (B) du module d'incompressibilité K (C) la vitesse d'onde hydrodynamique en fonction de la pression pour les composants magnésioiwüstite pour $x=1$, $x=17$ et $x=99$ (a) issu de l'étude de J. Lin et al 2005 [11] (b) notre étude.

- La comparaison avec l'étude de S. Speziale et al 2007 [115]:

La même remarque est rapportée que précédemment à partir de la figure (VI-24) sur les valeurs du taux volumique issues du travail de (S. Speziale et al 2007 ^[115]) des deux composants magnésio-wüstite $x=17$ et $x=20$ sont concordantes avec nos résultats jusqu'à la pression 10 GPa à peu près, puis elles deviennent inférieures. Mais à la pression 130 GPa il ya une correspondance entre la valeur du taux volumique pour le composant magnésio-wüstite $x=17$ issue de travail S. Speziale et al 2007 et celle du composant pour $x=99$ issue de notre travail.

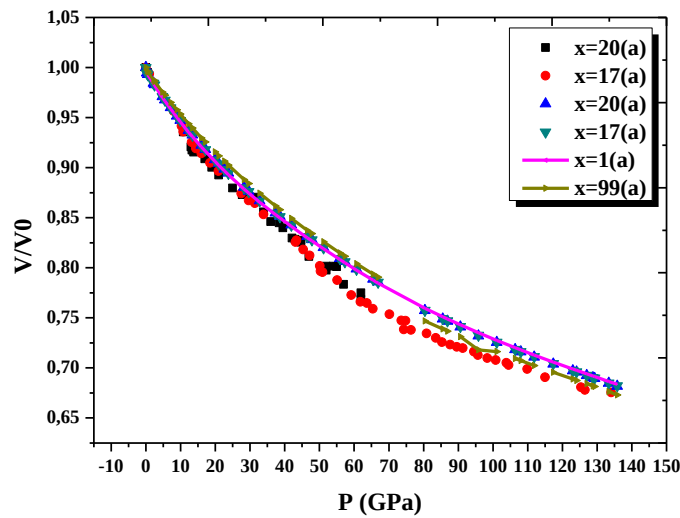


Fig (VI-24): représente le changement du taux volumique en fonction de la pression pour les composants magnésio-wüstite pour $x=1$, $x=17$, $x=20$ et $x=99(a)$ issu de l'étude de S. Speziale et al 2007 [115] (b) notre étude.

Conclusion

Notre travail a visé à établir une étude comparative des propriétés structurales, élastiques et sismiques relatives à des constituants jugés importants de la composition des couches terrestre à la limite du début du noyau externe, à savoir l'Oxyde de Fer et l'Oxyde de Magnésium ainsi que l'ensemble Magnésiowüstite. Ces propriétés ont été déterminées par calcul en utilisant des formules et relations théoriques. Vu le manque observé de travaux ayant abordé ces constituants à la fois, on s'est basé sur le travail de Karki et al, 1997 portant sur l'oxyde de Magnésium pour effectuer la présente étude. Notre travail a débuté avec l'étude de l'oxyde de fer en utilisant la méthode DFT par approximation GGA où cette partie a été couronnée par une publication scientifique.

Malgré une nette différence de la méthode de calcul adoptée entre notre première partie et celle de Karki et al, 1997 ainsi que les propriétés traitées par ceux-ci, on a relevé un facteur important qu'il fallait unifier à savoir les valeurs de pression d'étude. A cet effet, pour qu'on puisse procéder à une comparaison exacte et aussi pour déterminer ces propriétés pour l'ensemble magnésiowüstite par l'application des relations Hashin et Shtrikman aux différentes valeurs de pression, nous avons essayé de trouver un modèle mathématique capable de décrire toutes ces propriétés aux différentes valeurs de pression. Une fois, qu'on a déduit le modèle parmi d'autres, non seulement on a pu déterminer les valeurs des différentes propriétés mais on les a calculés aux pressions correspondants au modèle PREM. L'étude comparative de ces propriétés est limitée à la présentation des valeurs obtenues ainsi que l'évaluation des écarts et le taux d'écarts entre les différents constituants objets de cette étude d'une part et avec le modèle de structure terrestre PREM d'une autre part. Aussi, nous avons relevé les points identiques entre les différents constituants.

Nos résultats obtenus montrent que:

- L'influence du changement de phase de FeO apparaît clairement dans la majorité des paramètres sauf pour la densité, le module d'incompressibilité et la vitesse d'onde sismique hydrodynamique. La plupart des valeurs des propriétés de MgO sont plus grandes par rapport à celles du FeO pour la même propriété. Néanmoins, elles sont inférieures dans la phase B1 de FeO pour le taux volumique et le module de cisaillement.

- Pour le module d'incompressibilité, ses valeurs pour le FeO sont seulement inférieures entre 46.5 et 117.4 GPa et enfin pour la densité, ses valeurs pour FeO sont supérieures quelle que soit la pression par le double à peu près. On remarque, qu'avec l'augmentation de la pression, une augmentation des valeurs propriétés de manière continue pour les deux oxydes, seulement la diminution apparaît pour le taux volumique et à partir de 123 GPa pour le module d'incompressibilité, de cisaillement et la vitesse d'onde sismique transversale.

- Les valeurs des propriétés des composants magnésio-wüstite caractérisent par une superposition dans une bande et ce pour toutes les propriétés. La superposition respecte l'ordre défini par la fraction molaire du fer présente dans le composant. Et généralement, les valeurs des propriétés sont très voisines à la pression 0 GPa et l'écart progresse ou diminue d'une propriété à une autre mais de manière différente. Il faut signaler que pour les modules élastiques cette superposition n'est pas respectée entre les pressions 41.9 et 46.5 GPa et entre 117.4 et 123 GPa plus la profondeur déterminée par la pression 95.8 GPa. En ces intervalles et ce point, la valeur des modules est la même pour tous les composants.

- Les valeurs des propriétés structurales, le module d'incompressibilité et la vitesse hydrodynamique des composants magnésio-wüstite sont délimitées par les valeurs des deux oxydes, mais elles s'éloignent trop des valeurs de l'Oxyde de Fer dans sa phase hexagonale. Pour le taux volumique, elles sont plus proches aux valeurs de l'Oxyde Magnésium mais inférieures à celles-ci; alors que pour les valeurs de la vitesse hydrodynamique, on remarque qu'elles sont plus éloignées de celles de l'Oxyde de Magnésium.

- Les valeurs du module de cisaillement sont inférieures par rapport à celles de l'Oxyde de Fer pour les composants $x < 37$ de sorte qu'avec la diminution des valeurs de x et l'augmentation de la pression, le signe de l'écart entre eux change, et cela dans neuf intervalles de la pression dont la limite est généralement la fin du manteau supérieur où il est possible de trouver des valeurs identiques pour ce module. Les valeurs des deux vitesses d'onde longitudinale et transversale pour tous les composants magnésio-wüstite sont supérieures aux valeurs de l'Oxyde de Fer quel que soit la pression avec une différence qui augmente avec l'accroissement de la pression.

- Pour l'Oxyde de Magnésium, les valeurs du module de cisaillement sont supérieures aux valeurs pour les composants où $x < 14$ dans quatre intervalles de pression, où il est possible de trouver des points identiques de ce module coïncidant avec le début du manteau supérieur.

Quant aux valeurs de la vitesse d'onde longitudinale des composants magnésio-wüstite, elles sont supérieures à celles de l'Oxyde de Magnésium seulement pour $x < 24$ dans vingt intervalles différents, de sorte qu'il apparait plusieurs profondeurs ou points de conformité de un à quatre. Les valeurs de la vitesse d'onde transversale des composants des Magnésio-wüstite sont inférieures aux valeurs de l'Oxyde de Magnésium à partir de $x=9$ à $x=82$ dans trente-trois intervalles différents, chacun possède une à six profondeurs de conformité.

- Les valeurs des propriétés de l'Oxyde de Fer sont supérieures à celles de la matière terrestre seulement pour la densité quel que soit la pression, et pour le module de cisaillement dans sa phase cubique par des valeurs très proches; dans ce cas, dans la zone du manteau inférieur. Comme elles sont supérieures pour le module d'incompressibilité avant la pression 23.8 GPa représentant le début du manteau inférieur, et après la pression 129.3 GPa à la limite de la zone D''. Donc, à la fin de cette partie du manteau et ces deux zones contiennent une profondeur de conformité des valeurs de ce module. Aussi, les valeurs des vitesses d'ondes longitudinale et hydrodynamique de l'oxyde de fer sont supérieures à celles de la matière terrestre avant la pression 0.6 GPa quant à l'onde transversale, elles sont supérieures avant la pression 8.9 GPa.

- Les valeurs des propriétés de l'Oxyde de Magnésium sont inférieures aux valeurs de propriétés de la matière terrestre seulement pour la densité à la pression 16 GPa et à partir de la pression 19.9 GPa représentant la fin du manteau supérieur où il y a trois profondeurs de conformité. Ces valeurs pour la densité sont voisines et présentent une même augmentation jusqu'à la fin du manteau supérieur et dans tout le manteau inférieur. Ces valeurs pour le module d'incompressibilité, sont supérieures par rapport à celles de l'oxyde de magnésium à partir de la pression 19.9 GPa. À cette profondeur, les deux valeurs du module sont identiques où on remarque le rapprochement progressif des valeurs avec l'augmentation de la pression pour tout le manteau inférieur. Aussi, dans cette zone, il est observable la bonne conformité des valeurs du module de cisaillement entre cet oxyde et la matière terrestre de même pour la vitesse d'onde transversale aussi par un accroissement similaire. Quant aux autres vitesses d'onde, la différence s'accroît à l'augmentation de la pression même par un petit peu toujours dans cette zone, où le rapprochement des valeurs est situé à son début mais de manière très claire la vitesse d'onde longitudinale.

- Les composants de magnésio-wüstite sont caractérisés par module de cisaillement toujours supérieur à la matière terrestre, mais à l'accroissement de la pression on trouve que

ces composants se rapprochent ou s'éloignent de la matière terrestre. La densité des composants est inférieure à celle de la matière terrestre seulement pour les composants $x < 15$ dans neuf intervalles, qui se terminent généralement à la limite de la zone de transition ou au début du manteau inférieur avec une à six profondeur de conformité. Les valeurs du module d'incompressibilité de tous les composants sont inférieures à celles de la matière terrestre dans le même nombre d'intervalles que pour la densité, avec une à quatre profondeur de conformité pour ce module.

- La vitesse d'onde longitudinale de la plupart des composants magnésio-wüstite sont inférieures aux valeurs de la matière terrestre dans trente-neuf intervalles différents, à l'exception pour $x > 18$ mais avec une à six profondeurs de conformité. La vitesse transversale des composants est inférieure à celle de la matière terrestre à partir des composants pour $x=41$ dans trente-trois intervalles, avec une à trois profondeurs de conformité. La vitesse hydrodynamique des composants est inférieure aussi à sa valeur de la matière terrestre pour tous les composants, mais dans vingt-six intervalles. Au même nombre de profondeurs de conformité pour la vitesse transversale.

Malgré la possibilité qu'il y ait coïncidence des profondeurs de conformité des vitesses dans les couches terrestre, mais ceci, n'est pas valable pour l'ensemble des propriétés comme pour le module de cisaillement où ses valeurs pour les composants Magnésio-wüstite sont toujours supérieures à celle de la matière terrestre. Alors il est impossible qu'on puisse trouver ces composants de manière individuelle dans les différentes couches terrestres, de même pour les deux oxydes.

En comparant les résultats obtenus dans notre travail avec ceux issus de la bibliographie, on a observé:

Les études ayant traité l'Oxyde de Fer et qui ont abordé les propriétés structurales, le module d'incompressibilité et les trois vitesses d'onde se résument au plus à une étude. Cependant, les valeurs du module de cisaillement n'ont pas été étudiées et seulement des valeurs ont été évoquées par des travaux portant essentiellement sur les composants Magnésio-wüstite.

Quant aux travaux s'intéressants à l'Oxyde de Magnésium, ils ont discuté tous les paramètres, mais n'ont pas donné d'importance à la densité et la vitesse hydrodynamique. A l'encontre de ceux qui ont abordé les composants magnésio-wüstite, ils n'ont pas étudié la vitesse hydrodynamique.

La variation de la plupart des paramètres est conforme en sens mais de manière lente dans notre travail par rapport à la bibliographie que ce soit avec le changement de pression ou par le changement de la fraction molaire, la différence apparaît seulement pour le changement du module de cisaillement en fonction de la fraction molaire. Comme on a remarqué que les valeurs issues de notre étude sont souvent supérieures avec de rares conformités.

La déviation est due à plusieurs raisons dont les plus importantes sont; la différence entre l'expérimentation et le calcul ou la différence de méthodes de calcul, ou les conditions thermodynamiques et les échantillons utilisés dans l'étude.

Malgré que cette recherche ait atteint son objectif escompté à travers tous les résultats présentés, il n'est pas possible de négliger quelques inconvénients ou lacunes auxquelles il faudra rechercher des solutions qui seront des perspectives pour cette étude, à savoir :

- Le taux volumique n'a pas été évoqué lors de la comparaison avec le modèle PREM, car ce dernier ne lui donne pas de valeurs puisque ce taux est impossible qu'il égale le taux de la densité, parce que la masse de la matière terrestre diffère d'une profondeur à une autre. Pour la même raison, les constantes élastiques n'ont pas été comparées avec le modèle PREM, vu que ce dernier ne donne pas de valeurs pour celles-ci. D'une autre part, ces constantes n'ont pas été calculées pour les composants magnésio-wüstite car les relations mathématiques utilisées ne donnent aucune formulation.

- Aucune comparaison aux deux pressions 70.4 et 75.4 GPa parmi les pressions du modèle PREM n'a été étudiée, car elles se situent à l'intervalle du changement de phase de l'Oxyde de Fer parce que les valeurs des propriétés étudiées pour cet oxyde dans cette zone ne sont pas précises. A la pression 150 GPa il n'est pas possible de déterminer les valeurs des propriétés pour la wüstite puis qu'elle n'appartient pas l'intervalle de l'étude (0 à 140 GPa) et cela est parmi les conditions de l'interpolation mathématique. On pense qu'il existe quelques faibles déviations à quelques valeurs, par exemple aux pressions 110, 120, 130 et 140 GPa pour le MgO et 125 GPa pour le FeO, alors il est possible de suggérer de rechercher un autre modèle de variation des propriétés.

Il est possible de refaire l'étude complète par le calcul direct autrement sans se référer aux travaux sur lesquels on s'est basé au départ mais aux valeurs de pression du model PREM directement. Aussi, il est possible, de refaire l'étude mais avec des valeurs de variation de la fraction molaire du fer différentes exemple 0.1.

Il est intéressant lors de l'étude des composants magnésio-wüstite de voir d'autres formes plus complexes avec la prise en considération de la dissolution d'autres éléments tels que Ba, Ca, ...etc, en plus du Fer dans l'Oxyde de Magnésium.

L'évocation de l'influence de la température sur les valeurs des propriétés étudiées pour éclaircir son changement. Il est possible d'évoquer d'autres concepts comme l'anisotropie sismique ainsi que l'hétérogénéité du manteau intérieur, car ils sont considérés comme importants dans les observations sismologiques.

***B**ibliographies*

- [01] Anderson, O.L, and D.G. Isaak, Elastic constants of mantle minerals at high temperature. In T. J. Ahrens, editor, Mineral Physics and Crystallgraphy: A handbook of Physical Constants, p64-97. American Geophysical Union, DC, 1995.
- [02] Bass, J.D, Elasticity of minerals, glasses, and melts. In T. J. Ahrens, editor, Mineral Physics and Crystallgraphy: A handbook of Physical Constants, p45-63. American Geophysical Union, DC, 1995
- [03] Stixrude L. Elastic constants and anisotropy of MgSiO₃ perovskite, periclase, and SiO₂ at high pressure. The core-mantle boundary region. 1998:83-96.
- [04] Jeanloz, R, and E. Knittle, Density and composition of the lower mantle. Philophical Transactions of the Royal society of London Series A, 328,377-389, 1989.
- [05] Bukowinski, M. S. T., and G. H. Wolf, Thermodynamically consistent decompression: Implications for lower mantle composition, J. Geophys. Res., 1990, 95(B8), 12583–12593, doi:10.1029/JB095iB08p12583.
- [06] Wang, Y., Weidner, D.J., Liebermann, R.C., Zhao, Y., $P - V - T$ equation of state Mg,Fe SiO perovskite: constraints on composition of the lower mantle. Phys. Earth Planet. Inter. 1994, 83, 13–40.
- [07] Dziewonski AM, Anderson DL. Preliminary reference Earth model. Physics of the earth and planetary interiors. 1981;25:297-356.
- [08] Jacobsen SD, Lin J-F, Angel RJ, Shen G, Prakapenka VB, Dera P, Mao H-K, Hemley RJ. Single-crystal synchrotron X-ray diffraction study of wüstite and magnesiowüstite at lower-mantle pressures. Journal of synchrotron radiation. 2005;12:577-83.
- [09] Harris P. G., A. Reay, and I. G. White, Chemical composition of the upper mantle, J. Geophys. 1967, Res., 72, 6359-6369,.
- [10] Ringwood, A. E., Phase transformations and the constitution of the mantle, Phys. Earth Planet, Inter. 197, 03, 109-155.

- [11] Lin J-F, Struzhkin VV, Jacobsen SD, Hu MY, Chow P, Kung J, Liu H, Mao H-k, Hemley RJ. Spin transition of iron in magnesiowüstite in the Earth's lower mantle. *Nature*. 2005;436:377-80.
- [12] Mao H-k, Shu J, Fei Y, Hu J, Hemley RJ. The wüstite enigma. *Physics of the earth and planetary interiors*. 1996;96:135-45.
- [13] Dubretsev, V.A. and Pankov, V.,. On the composition of the Earth's core. *Izv., Phys. Solid Earth*, 1972, 7: 48-54.
- [14] Bullen, K.E.,. Cores of the terrestrial planets. *Nature*, 1973, 243: 68-70.
- [15] Mao, H.K.,. A discussion of the iron oxides at high pressure with implications for the chemical and thermal evolution of the earth. *Carnegie Inst. Washington Yearb.*, 1974,510-518.
- [16] Stevenson, D.J.,. Models of the Earth's core. *Science*, 1981,241: 611-619
- [17] Karki B, Stixrude L, Clark S, Warren M, Ackland G, Crain J. Structure and elasticity of MgO at high pressure. *American Mineralogist*. 1997;82:51-60.
- [18] Tlili S, Louail L, Bouguera A, Haddadi K, Medkour Y. Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations. *Phase Transitions*. 2017;90:1229-40.
- [19] Bolt B and B K. An introduction to the theory of seismology. Cambridge University Press, Cambridge U.K., 499 pp. 1985.
- [20] Poirier J-P. Introduction to the Physics of the Earth's Interior: Cambridge University Press; 2000.
- [21] Baddari K. *Éléments de sismologie*: OPU Alger 1994, 466 P; 1994.
- [22] Stein CA. The solid earth: an introduction to global geophysics. *Eos, Transactions American Geophysical Union*. 1991;72:427-8.
- [23] Pujol J. Elastic wave propagation and generation in seismology: Cambridge University Press; 2003.
- [24] Shearer PM. Introduction to seismology: Cambridge University Press; 2009.
- [25] Radi Z, Étude de l'anisotropie sismique du Nord-Est de l'Algérie, thèse Doctorat, Université Ferhat Abbas Sétif 1, 2016.
- [26] Bolt, B. A.. Nuclear Explosions and Earthquakes. The parted. Vei. W .H. Fercman San Francisco. 1976.

- [27] Kennett B. On seismological reference models and the perceived nature of heterogeneity. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2006;159:129-39.
- [28] Anderson DL. *Theory of the Earth*: Blackwell scientific publications; 1989.
- [29] Mattern E. *Composition et température dans le manteau profond: interprétations minéralogiques des observations sismologiques: École normale supérieure (Lyon)*; 2005.
- [30] Merkel S. *Elasticité et orientations préférentielles dans la terre profonde: approche expérimentale*. Doctorat de Ecole normale supérieure de lyon. umr 5570 laboratoires des sciences de la terre. Thèse. 2002.
- [31] Jackson I. *The Earth's mantle: composition, structure, and evolution*: Cambridge University Press; 2000.
- [32] Radovic M, Lara-Curzio E, Riester L. Comparison of different experimental techniques for determination of elastic properties of solids. *Materials Science and Engineering: A*. 2004;368:56-70.
- [33] Wang S-F, Hsu Y-F, Pu J-C, Sung JC, Hwa L. Determination of acoustic wave velocities and elastic properties for diamond and other hard materials. *Materials Chemistry and Physics*. 2004;85:432-7.
- [34] Ulrich TJ, McCall K, Guyer R. Determination of elastic moduli of rock samples using resonant ultrasound spectroscopy. *The Journal of the Acoustical Society of America*. 2002;111:1667-74.
- [35] Marx D, Hutter J. *Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation*. Modern methods and algorithms of quantum chemistry. 2000;1:141.
- [36] Kumar M. Application of high pressure–high temperature equation of state for elastic properties of solids. *Physica B: Condensed Matter*. 2002;311:340-7.
- [37] Kittel C, McEuen P. *Introduction to solid state physics*: Wiley New York; 1996.
- [38] Louail L, Krachni O, Bouguerra A, Sahraoui FA. Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO. *Materials Letters*. 2006;60:3153-5.
- [39] Ezziani A. Ondes dans les milieux poroélastiques-Analyse du modele de Biot. *Revue Africaine de la Recherche en Informatique et Mathématiques Appliquées*. 2006;5:95-109.
- [40] Karki B, Ackland G, Crain J. Elastic instabilities in crystals from ab initio stress-strain relations. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1997;9:8579.

- [41] Mehl M, Barry B, Papaconstantopoulos DA. Intermetallic Compounds: Principle and Practice, Volume I: Principles, JH Westbrook and RL Fleischeir, eds. John Wiley and Sons (London, 1995); 1995.
- [42] Screiber E, Anderson O, Soga N. Elastic constants and their measurements. McGrawHill, New York. 1973.
- [43] Ravindran P, Fast L, Korzhavyi PA, Johansson B, Wills J, Eriksson O. Density functional theory for calculation of elastic properties of orthorhombic crystals: application to TiSi₂. Journal of Applied Physics. 1998;84:4891-904.
- [44] Seitz F, Turnbull D, Christy R. Solid State Physics, Vol. 12: Advances in Research and Applications. American Journal of Physics. 1962;30:936-7.
- [45] Kittel C, Holcomb DF. Introduction to solid state physics. American Journal of Physics. 1967;35:547-8.
- [46] Galperin YM. Introduction to modern solid state physics. доступна pdf формат на адрес: <http://edu.ioffe.ru/lib/galperin>. 2001.
- [47] Sobolev SV, Babeyko AY. Modeling of mineralogical composition, density and elastic wave velocities in anhydrous magmatic rocks. Surveys in geophysics. 1994;15:515-44.
- [48] Karki BB, Stixrude L, Wentzcovitch RM. High-pressure elastic properties of major materials of Earth's mantle from first principles. Reviews of Geophysics. 2001;39:507-34.
- [49] Jeanloz R, Knittle E. Density and composition of the lower mantle. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1989;328:377-89.
- [50] Hashin, Z. (1962). « The Elastic Moduli of Heterogeneous Materials ». Journal of Applied Mechanics 29, p. 143–150.
- [51] Hashin, Z. et S. Shtrikman (1962). « A Variational Approach to the Theory of the Effective Magnetic Permeability of Multiphase Materials ». Journal of Applied Physics 33.10, p. 3125–3131.
- [52] Hashin, Z. et S. Shtrikman (1963). « A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials ». Journal of the Mechanics and Physics of Solids 11.2, p. 127–140.

- [53] Peselnick, Louis & Meister, Robert. (1965). Variational Method of Determining Effective Moduli of Polycrystals: (A) Hexagonal Symmetry, (B) Trigonal Symmetry. *Journal of Applied Physics*. 36. 2879 - 2884. 10.1063/1.1714598.
- [54] Berryman JG. Bounds and self-consistent estimates for elastic constants of random polycrystals with hexagonal, trigonal, and tetragonal symmetries. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2005;53:2141-73.
- [55] Mattern E.. Composition et température dans le manteau profond: interprétations minéralogiques des observations sismologiques: Ecole Normale Supérieure de Lyon; 2005.
- [56] Ita J, Stixrude L. Petrology, elasticity, and composition of the mantle transition zone. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1992;97:6849-66.
- [57] Isaak DG. Ultrahigh-pressure mineralogy: Physics and chemistry of the earth's deep interior. Russell Hemley, Editor. *Mineralogical Society of America Reviews in Mineralogy*, 1998, Volume 37, 671 pages. Washington, DC, 32(24 for MSA members). Mineralogical Society of America; 2000.
- [58] Zhao Y, Anderson DL. Mineral physics constraints on the chemical composition of the Earth's lower mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1994;85:273-92.
- [59] Hama J, Suito K. Thermoelastic models of minerals and the composition of the Earth's lower mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2001;125:147-66.
- [60] Karki BB, Stixrude L, Wentzcovitch RM. High-pressure elastic properties of major materials of Earth's mantle from first principles. *Reviews of Geophysics*. 2001;39:507-34.
- [61] Walenta K. Natürliches Eisen (II)-Oxyd (Wüstit) aus der vulkanischen Tuffbreccie von Scharnhausen bei Stuttgart. *N Jb Mineral Mh*. 1960:150-9.
- [62] Jeanloz R, Ahrens TJ. Equations of state of FeO and CaO. *Geophysical Journal International*. 1980;62:505-28.
- [63] Brown J, Shankland T. Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles. *Geophysical Journal International*. 1981;66:579-96.
- [64] Hazen R. Systematic variation of bulk modulus of wüstite with stoichiometry. *Carnegie Inst Wash Yearb*. 1981;80:280.
- [65] Yamamoto A. Modulated structure of wustite (Fe_{1-x}O)(three-dimensional modulation). *Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry*. 1982;38:1451-6.

- [66] Hazen RM, Jeanloz R. Wüstite (Fe_{1-x}O): A review of its defect structure and physical properties. *Reviews of Geophysics*. 1984;22:37-46.
- [67] Yagi T, Suzuki T, Akimoto SI. Static compression of wüstite ($\text{Fe}_{0.98}\text{O}$) to 120 GPa. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1985;90:8784-8.
- [68] Knittle E, Jeanloz R, Mitchell A, Nellis W. Metallization of $\text{Fe}_{0.94}\text{O}$ at elevated pressures and temperatures observed by shock-wave electrical resistivity measurements. *Solid state communications*. 1986;59:513-5.
- [69] Jeanloz R, Sato-Sorensen Y. Hydrostatic compression of Fe_{1-x}O Wüstite. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1986;91:4665-72.
- [70] Yagi T, Fukuoka K, Takei H, Syono Y. Shock compression of wüstite. *Geophysical Research Letters*. 1988;15:816-9.
- [71] Jackson I, Khanna S, Revcolevschi A, Berthon J. Elasticity, shear-mode softening and high-pressure polymorphism of wüstite (Fe_{1-x}O). *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1990;95:21671-85.
- [72] Knittle E, Jeanloz R. The high pressure phase diagram of $\text{Fe}_{0.94}\text{O}$: A possible constituent of the Earth's core. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1991;96:16169-80.
- [73] Fei Y, Mao H-k. In situ determination of the NiAs phase of FeO at high pressure and temperature. *Science*. 1994;266:1678.
- [74] Fei Y. Crystal chemistry of FeO at high pressure and temperature. *Mineral Spectroscopy: A Tribute to Roger G Burns*. 1996:243-54.
- [75] Fjellvåg H, Grønvold F, Stølen S, Hauback B. On the crystallographic and magnetic structures of nearly stoichiometric iron monoxide. *Journal of Solid State Chemistry*. 1996;124:52-7.
- [76] Stølen S, Grønvold F. Calculation of the phase boundaries of wüstite at high pressure. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1996;101:11531-40.
- [77] Fjellvåg H, Hauback BC, Vogt T, Stølen S. Monoclinic nearly stoichiometric wüstite at low temperatures. *American Mineralogist*. 2002;87:347-9.
- [78] Sata N, Shen G, Rivers M, Sutton S. High pressure and high temperature phase of FeO. 2002: Publisher.

- [79] Murakami M, Hirose K, Ono S, Tsuchiya T, Isshiki M, Watanuki T. High pressure and high temperature phase transitions of FeO. *Physics of the earth and planetary interiors*. 2004;146:273-82.
- [80] Kennett B. On seismological reference models and the perceived nature of heterogeneity. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2006;159:129-39.
- [81] Kantor I, Kurnosov A, McCammon C, Dubrovinsky L. Monoclinic FeO at high pressures. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*. 2008;223:461-4.
- [82] Ozawa H, Hirose K, Tateno S, Sata N, Ohishi Y. Phase transition boundary between B1 and B8 structures of FeO up to 210 GPa. *Physics of the earth and planetary interiors*. 2010;179:157-63.
- [83] Fischer RA, Campbell AJ, Shofner GA, Lord OT, Dera P, Prakapenka VB. Equation of state and phase diagram of FeO. *Earth and Planetary Science Letters*. 2011;304:496-502.
- [84] Weaver C, Paterson M. Deformation of Cube-Oriented MgO Crystals Under Pressure. *Journal of the American Ceramic Society*. 1969;52:293-302.
- [85] Paterson M, Weaver C. Deformation of polycrystalline MgO under pressure. *Journal of the American Ceramic Society*. 1970;53:463-71.
- [86] Hazen RM. Effects of temperature and pressure on the cell dimension and X-ray temperature factors of periclase. *American Mineralogist*. 1976;61:266-71.
- [87] Vassiliou M, Ahrens TJ. The equation of state of MgO. 6FeO. 4O to 200 GPa. *Geophysical Research Letters*. 1982;9:127-30.
- [88] Liu M, Liu L-g. Bulk moduli of wüstite and periclase: a comparative study. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1987;45:273-9.
- [89] C. Meade & R. Jeanloz. Yield strength of MgO to 40 GPa. *J. Geophys. Res.*, 93: 3261-3269, 1988.
- [90] Isaak DG, Anderson OL, Goto T. Measured elastic moduli of single-crystal MgO up to 1800 K. *Physics and chemistry of minerals*. 1989;16:704-13.
- [91] Yoneda A. Pressure derivatives of elastic constants of single crystal MgO and MgAl₂O₄. *Journal of Physics of the Earth*. 1990;38:19-55.
- [92] Isaak DG, Cohen RE, Mehl MJ. Calculated elastic and thermal properties of MgO at high pressures and temperatures. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1990;95:7055-67.

- [93] Chen G, Liebermann RC, Weidner DJ. Elasticity of single-crystal MgO to 8 Gigapascals and 1600 Kelvin. *Science*. 1998;280:1913-6.
- [94] Sinogeikin S, Bass J. Single-crystal elasticity of MgO at high pressure. *Physical Review B*. 1999;59:R14141.
- [95] Karki B, Wentzcovitch Rd, De Gironcoli S, Baroni S. First-principles determination of elastic anisotropy and wave velocities of MgO at lower mantle conditions. *Science*. 1999;286:1705-7.
- [96] Zha C-S, Mao H-k, Hemley RJ. Elasticity of MgO and a primary pressure scale to 55 GPa. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2000;97:13494-9.
- [97] Sinogeikin SV, Bass JD. Single-crystal elasticity of pyrope and MgO to 20 GPa by Brillouin scattering in the diamond cell. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2000;120:43-62.
- [98] Zhang J. Effect of pressure on the thermal expansion of MgO up to 8.2 GPa. *Physics and chemistry of minerals*. 2000;27:145-8.
- [99] Merkel S, Wenk HR, Shu J, Shen G, Gillet P, Mao Hk, Hemley RJ. Deformation of polycrystalline MgO at pressures of the lower mantle. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 2002;107.
- [100] Webb S, Jackson I. Anelasticity and microcreep in polycrystalline MgO at high temperature: an exploratory study. *Physics and chemistry of minerals*. 2003;30:157-66.
- [101] Hachemi A, Saoudi A, Louail L, Maouche D, Bouguerra A. Elasticity of the B2 phase and the effect of the B1–B2 phase transition on the elasticity of MgO. *Phase Transitions*. 2009;82:87-97.
- [102] Jackson I, Liebermann RC, Ringwood A. The elastic properties of (Mg_xFe_{1-x}) O solid solutions. *Physics and chemistry of minerals*. 1978;3:11-31.
- [103] Bonczar L, Graham E. The pressure and temperature dependence of the elastic properties of polycrystal magnesiowüstite. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1982;87:1061-78.
- [104] Vassiliou M, Ahrens TJ. The equation of state of Mg_{0.6}Fe_{0.4}O to 200 GPa. *Geophysical Research Letters*. 1982;9:127-30
- [105] Richet P, Mao HK, Bell PM. Bulk moduli of magnesiowüstites from static compression measurements. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 1989;94:3037-45.
- [106] Hama J, Suito K. Thermoelastic properties of periclase and magnesiowüstite under high pressure and high temperature. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 1999;114:165-79.

- [107] Fei Y. Effects of temperature and composition on the bulk modulus of (Mg, Fe) O. *American Mineralogist*. 1999;84:272-6.
- [108] Stretton I, Heidelbach F, Mackwell S, Langenhorst F. Dislocation creep of magnesiowüstite (Mg 0.8 Fe 0.2 O). *Earth and Planetary Science Letters*. 2001;194:229-40.
- [109] Yamazaki D, Karato S-i. Fabric development in (Mg,Fe)O during large strain, shear deformation: implications for seismic anisotropy in Earth's lower mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2002;131:251-67.
- [110] Kung J, Li B, Weidner DJ, Zhang J, Liebermann RC. Elasticity of (Mg 0.83, Fe 0.17) O ferropericlasite at high pressure: ultrasonic measurements in conjunction with X-radiation techniques. *Earth and Planetary Science Letters*. 2002;203:557-66.
- [111] Jacobsen SD, Reichmann HJ, Spetzler HA, Mackwell SJ, Smyth JR, Angel RJ, McCammon CA. Structure and elasticity of single-crystal (Mg,Fe) O and a new method of generating shear waves for gigahertz ultrasonic interferometry. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 2002;107.
- [112] Kondo T, Ohtani E, Hirao N, Yagi T, Kikegawa T. Phase transitions of (Mg,Fe) O at megabar pressures. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2004;143:201-13.
- [113] Jacobsen SD, Spetzler H, Reichmann HJ, Smyth JR. Shear waves in the diamond-anvil cell reveal pressure-induced instability in (Mg,Fe)O. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. 2004;101:5867-71.
- [114] S. Jacobsen, H. Spetzler, H. Reichmann, & J. Smyth. Shear waves in the diamond-anvil cell reveal pressure-induced instability in (Mg,Fe)O. *Proc. Nat. Acad.Sc.* 101 (16), 5867-5871, 2004.
- [115] Speziale S, Lee V, Clark S, Lin J, Pasternak M, Jeanloz R. Effects of Fe spin transition on the elasticity of (Mg, Fe) O magnesiowüstites and implications for the seismological properties of the Earth's lower mantle. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 2007;112.
- [116] McDonough W. Compositional model for the earth's core. *Treat Geochem.* 2003;2:568.
- [117] Frost DJ, McCammon CA. The redox state of earth's mantle. *Annu Rev Earth Planet Sci.* 2008;36:389-420.
- [118] Segall M, Lindan P, Probert M, Pickard C, Hasnip P, Clark S, Payne M. Materials Studio CASTEP Version 2.2 (2002);(b) M. Segall, P Linda, M Probert, C Pickard, P Hasnip, S Clark, M Payne, *J Phys: Condens Matter*. 2002;14:2717-44.

- [119] Clark SJ, Segall MD, Pickard CJ, et al. First principles methods using CASTEP. *Zeitschrift Kristallogr Cryst Mater.* 2005;220:567–570.
- [120] Kohanoff J. *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods.* Cam-bridge University Press;2006.
- [121] Kohn W, Sham LJ. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys Rev.* 1965;140:A1133.
- [122] Payne MC, Teter MP, Allan DC, et al. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Rev Mod Phys.*1992;64:1045.
- [123] Monkhorst HJ, Pack JD. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys Rev B.*1976;13:5188.
- [124] Perdew JP, Chevary JA, Vosko SH, et al. Atoms, molecules, solids, and surfaces: applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Phys Rev B.*1992;46:6671.

Annexe A

Les données du modèle PREM utilisés dans la comparaison

Dans le tableau ci-dessous sont exposés les plus importantes valeurs employées dans la présente thèse spécifiques au modèle PREM en fonction de la profondeur à savoir la densité de la matière, les modules élastiques et les vitesses des ondes sismiques sachant que la vitesse hydrodynamique se calcule selon la relation (I-3) du premier chapitre, mais à la limite de noyau terrestre externe.

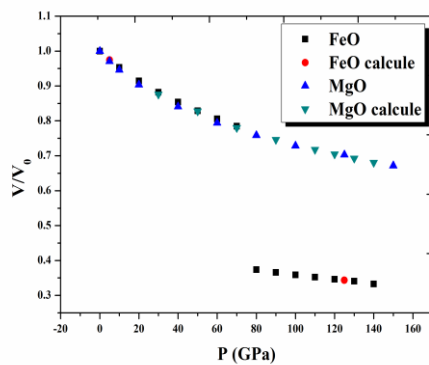
Profondeur (Km)	P(GPa)	K(GPa)	den(g/cm ³)	G(GPa)	V _p (Km/s)	V _s (Km/s)	V _φ (Km/s)
0	0	2.15	1.02	0	1.45	0	1.45
0.3	0	2.15	1.02	0	1.45	0	1.45
0.3	0	51.97	2.6	26.62	5.8	3.2	4.47
15	0.3	51.97	2.6	26.62	5.8	3.2	4.47
15	0.3	75.28	2.9	44.11	6.8	3.9	5.10
24.4	0.6	75.28	2.9	44.11	6.8	3.9	5.10
24.4	0.6	131.45	3.38	68.14	8.11	4.49	6.24
71.0	2.2	130.62	3.38	67.54	8.08	4.47	6.22
80.0	2.5	130.23	3.37	67.34	8.08	4.47	6.22
80.0	2.5	130.23	3.37	67.34	8.08	4.47	6.22
150	4.8	128.72	3.37	66.44	8.03	4.44	6.18
171.0	5.5	127.80	3.36	66.24	8.02	4.44	6.17
220	7.1	126.98	3.36	65.64	7.99	4.42	6.15
220	7.1	154.16	3.44	73.43	8.56	4.62	6.70
271.0	8.9	158.90	3.47	76.00	8.66	4.68	6.77
300	9.9	160.30	3.48	76.90	8.69	4.7	6.79
371.0	12.3	170.28	3.53	79.65	8.85	4.75	6.95
400	13.4	173.64	3.54	80.55	8.91	4.77	7.00
400	13.4	189.54	3.72	90.42	9.13	4.93	7.14
471.0	16	208.60	3.81	101.44	9.5	5.16	7.40
500	17.1	190.25	3.35	91.30	9.65	5.22	7.54
571.0	19.9	239.90	3.94	116.17	10.01	5.43	7.80
600	21	249.14	3.98	121.27	10.16	5.52	7.91
600	21	249.14	3.98	121.27	10.16	5.52	7.91

Profondeur (Km)	P(GPa)	K(GPa)	den(g/cm ³)	G(GPa)	V _p (Km/s)	V _s (Km/s)	V _φ (Km/s)
640	22.6	252.25	3.98	122.60	10.22	5.55	7.96
640	22.6	252.25	3.98	122.60	10.22	5.55	7.96
670	23.8	255.78	3.99	123.79	10.27	5.57	8.01
670	23.8	299.41	4.38	155.07	10.75	5.95	8.27
771.0	28.3	313.59	4.44	172.88	11.07	6.24	8.40
800	29.6	317.47	4.46	174.78	11.11	6.26	8.44
871.0	32.8	329.62	4.5	179.17	11.24	6.31	8.56
971.0	37.3	347.22	4.56	185.61	11.42	6.38	8.73
1000	38.6	351.37	4.58	187.60	11.46	6.4	8.76
1071.0	41.9	364.05	4.62	191.61	11.58	6.44	8.88
1171.0	46.5	385.80	4.68	197.73	11.78	6.5	9.08
1200	47.8	384.99	4.69	199.37	11.78	6.52	9.06
1271.0	51.2	395.34	4.73	204.17	11.88	6.57	9.14
1371.0	55.9	412.17	4.79	209.92	12.02	6.62	9.28
1400	57.3	417.67	4.81	211.43	12.06	6.63	9.32
1471.0	60.7	428.57	4.84	215.33	12.16	6.67	9.41
1571.0	65.5	444.20	4.9	221.94	12.29	6.73	9.52
1600	66.9	449.07	4.91	223.05	12.33	6.74	9.57
1871.0	80.4	492.88	5.05	238.34	12.67	6.87	9.88
1971.0	85.5	508.34	5.11	244.70	12.78	6.92	9.97
2000	86.9	513.63	5.12	245.89	12.82	6.93	10.02
2071.0	90.6	524.44	5.16	250.68	12.9	6.97	10.08
2171.0	95.8	541.84	5.21	256.02	13.02	7.01	10.20
2271.0	101.1	557.24	5.26	262.18	13.13	7.06	10.29
2371.0	106.4	575.33	5.31	267.68	13.25	7.1	10.41
2400	108	579.64	5.32	268.94	13.28	7.11	10.44
2471.0	111.9	592.37	5.36	273.25	13.36	7.14	10.51
2571.0	117.4	610.15	5.41	279.68	13.48	7.19	10.62
2671.0	123	629.33	5.46	285.41	13.6	7.23	10.74
2700	124.1	632.41	5.47	286.72	13.62	7.24	10.75
2741.0	127	640.53	5.49	290.16	13.68	7.27	10.80
2771.0	128.8	644.37	5.51	291.22	13.69	7.27	10.81
2780	129.3	645.44	5.51	290.42	13.69	7.26	10.82
2850	133.4	654.34	5.56	293.05	13.71	7.26	10.85
2885	135.8	657.05	5.57	293.58	13.72	7.26	10.86

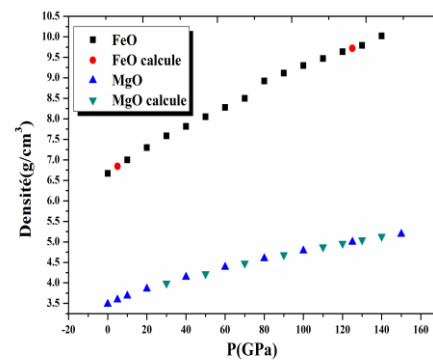
Annexe B

Présentation des différentes propriétés de l'oxyde de fer et de magnésium à partir de notre calcul

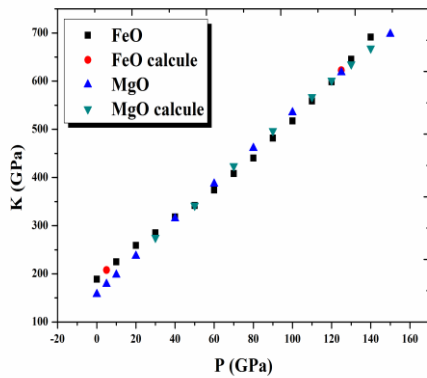
Dans de cet annexe, les valeurs des propriétés structurales, élastiques et sismiques pour l'oxyde de Fer à partir du travail Tlili et al, 2017 et l'oxyde de Magnésium à partir du travail de Karki et al, 1997 sont présentés en fonction de la pression plus les valeurs déduites du modèle choisi.



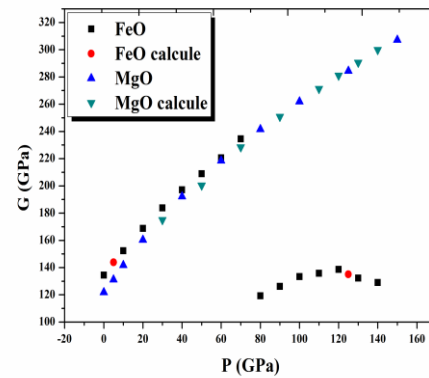
Le taux volumique V/V_0



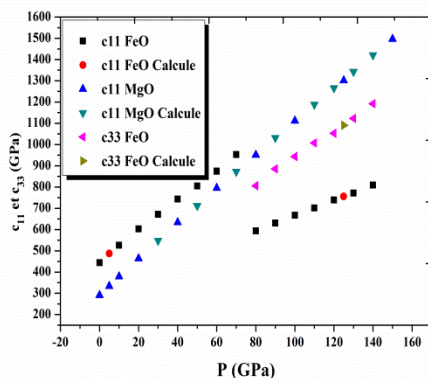
La densité ρ



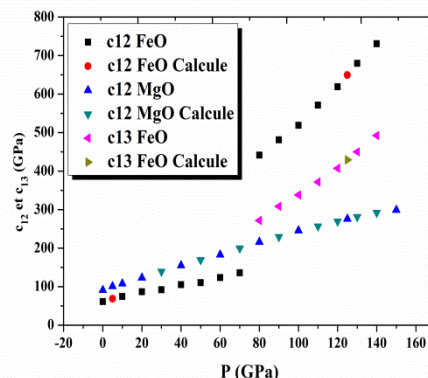
Le module d'incompressibilité K



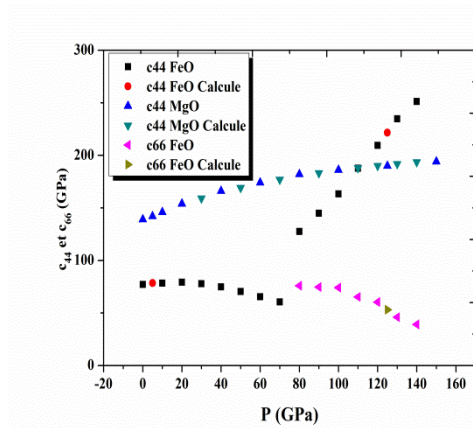
Le module de cisaillement G



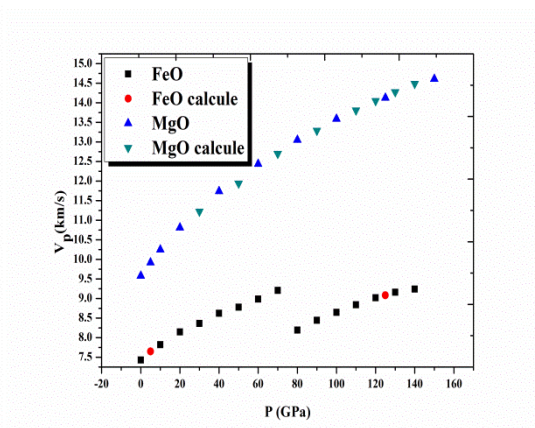
Les constantes élastiques c_{11} et c_{33}



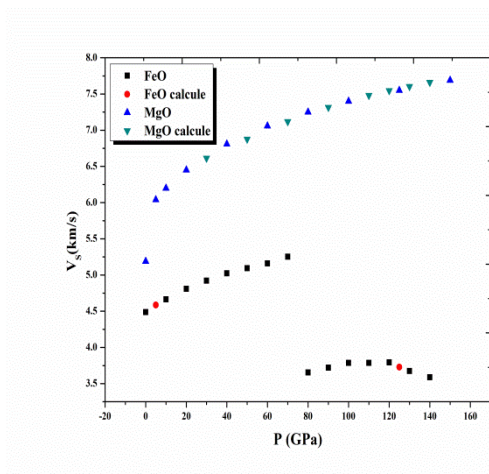
Les constantes élastiques c_{12} et c_{13}



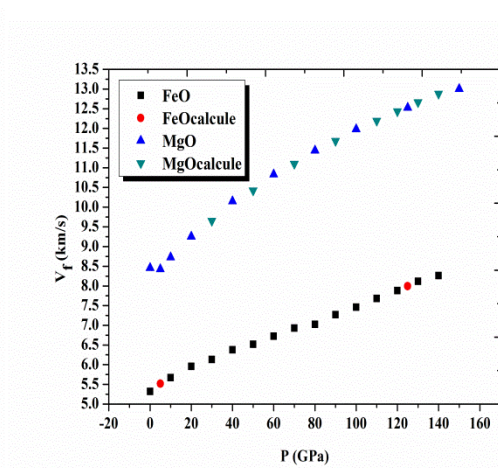
Les constantes élastiques c_{44} et c_{66}



La vitesse longitudinale V_p



La vitesse de cisaillement V_s



La vitesse de cisaillement V_f

Annexe C

Présentation de l'étude comparative des différentes propriétés des constituants objets de cette étude

Pour faciliter au lecteur la compréhension des résultats présentés, le sens des différentes notations utilisées est comme suit:

- D (unité): l'écart ou la différence entre valeurs comparées prend l'unité du paramètre objet de la comparaison.
- DMax(unité): l'écart ou différence maximum entre valeurs comparées prend l'unité du paramètre objet de la comparaison.
- DMin (unité): l'écart ou différence minimum entre valeurs comparées prend l'unité du paramètre objet de la comparaison.
- TD (%): taux d'écart relatif par rapport au constituant de référence.
- TD (%/FeO): taux d'écart relatif où le constituant de référence est le FeO.
- TD (%/MgO): taux d'écart relatif où le constituant de référence est le MgO.
- TDMax (%): taux d'écart relatif maximum par rapport au constituant de référence.
- TDMin (%): taux d'écart relatif minimum par rapport au constituant de référence.
- N-V: nature de la valeur max ou min.
- I-V-S: intervalle où les valeurs du constituant de référence sont supérieures.
- I-P-I: intervalle de points identiques.

C-1 Comparaison des propriétés structurales:

C-1-1 Comparaison du taux volumique:

Le tableau (C-1) présente l'écart des valeurs du taux volumique (V/V_0) et son taux relatif par rapport au FeO et MgO à certaines pressions.

P(GPa)	D	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	0	/	0	/	0	/
0.3	3.13E-3	Min	3.15E-5	Min	3.16E-5	Min
21	9.61E-3	/	10.53E-5	/	10.64E-5	/
66.9	3.72E-3	/	4.71E-5	/	4.74E-5	/
80.4	0.39	Max	10.39E-3	/	5.10E-3	/
95.8	0.38	/	10.37E-3	/	5.13E-3	Max
101.1	0.37	/	10.53E-3	Max	50.86E-4	/
135.8	3.48	/	10.35E-3	/	50.88E-4	/

Tableau (C-2) présentant les écarts max et min et le taux d'écart entre les valeurs du taux volumique (V/V_0) de certains composants Magnésio-wüstite par rapport au FeO.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	38.63E-2(80.4)	38.63E-2(95.8)	16.10E-4(0.3)	16.17E-5(0.3)	0.3-66.9	0-0.3//66.9-80.4
x=63	37.85E-2(80.4)	10.19E-3(95.8)	1.04E-5(0.3)	10.4E-7(0.3)	0.3-66.9	0-0.3//66.9-80.4
x=64	37.84E-2(80.4)	10.18E-3(95.8)	1.66E-5(0.3)	8.72E-7(0.6)	0.6-66.9	0.3-0.6//66.9-80.4
x=65	37.82E-2(80.4)	10.177E-3(95.8)	4.36E-5(0.3)	5.83E-7(0.6)	0.6-66.9	0.3-0.6//66.9-80.4
x=66	37.81E-2(80.4)	10.172E-3(95.8)	2.91E-5(0.6)	2.93E-7(0.6)	0.6-66.9	0.3-0.6//66.9-80.4
x=67	37.80E-2(80.4)	10.167E-3(95.8)	2.86E-7(0.6)	2.88 E-9(0.6)	0.6-66.9	0.3-0.6//66.9-80.4
x=68	37.78E-2(80.4)	10.162E-3(95.8)	2.85E-5(0.6)	2.87E-7(0.6)	0.6-66.9	0.3-0.6//66.9-80.4
x=74	37.70E-2(80.4)	10.14E-3(95.8)	2.32E-4(0.6)	2.04E-4(0.6)	2.2-66.9	0.6-2.2//66.9-80.4
x=75	37.69E-2(80.4)	10.13E-3(95.8)	2.32E-4(0.6)	2.49E-4(2.2)	2.2-66.9	0.6-2.2//66.9-80.4
x=76	37.68E-2(80.4)	10.12E-3(95.8)	2.06E-4(2.2)	2.09E-4(2.2)	2.2-66.9	0.6-2.2//66.9-80.4
x=81	37.61E-2(80.4)	10.095E-3(95.8)	6.78E-6(2.2)	6.87 E-8(2.2)	2.2-66.9	0.6-2.2//66.9-80.4
x=82	37.60E-2(80.4)	10.090E-3(95.8)	3.33E-5(2.2)	3.37E-7(2.2)	2.5-66.9	2.2-2.5//66.9-80.4
x=83	37.58E-2(80.4)	10.085E-3(95.8)	2.20E-6(2.5)	2.23E-8(2.5)	2.5-66.9	2.2-2.5//66.9-80.4
x=84	37.57E-2(80.4)	10.080E-3(95.8)	4.01E-5(2.5)	4.10E-7(2.5)	4.8-66.9	2.5-4.8//66.9-80.4
x=88	37.51E-2(80.4)	10.06E-3(95.8)	4.87E-4(66.9)	6.16E-7(66.9)	4.8-66.9	2.5-4.8//66.9-80.4
x=89	37.50E-2(80.4)	10.050E-3(95.8)	1.65E-5(66.9)	2.09E-7(66.9)	4.8-65.5	2.5-4.8//65.5-66.9
x=90	37.49E-2(80.4)	10.050E-3(95.8)	2.14E-5(65.5)	2.70E-7(65.5)	4.8-65.5	2.5-4.8//65.5-66.9
x=91	37.47E-2(80.4)	10.044E-3(95.8)	10.50E-5(4.8)	5.70E-7(65.5)	4.8-60.7	2.5-4.8//60.7-65.5
x=92	37.46E-2(80.4)	10.039E-3(95.8)	4.67E-5(4.8)	4.79E-7(4.8)	4.8-60.7	2.5-4.8//60.7-65.5
x=93	37.45E-2(80.4)	10.033E-3(95.8)	1.18E-5(4.8)	1.21E-7(4.8)	5.5-60.7	4.8-5.5//60.7-65.5
x=94	37.43E-2(80.4)	10.023E-3(85.5)	4.22E-5(60.7)	4.58E-7(5.5)	5.5-60.7	4.8-5.5//60.7-65.5
x=95	37.42E-2(80.4)	10.024E-3(80.4)	1.84E -5(5.5)	1.90E -7(5.5)	7.1-57.3	5.5-7.1//57.3-60.7
x=97	37.39E-2(80.4)	10.016E-3(80.4)	2.92E-5(57.3)	2.92E-7(57.3)	7.1-57.3	5.5-7.1//57.3-60.7
x=98	37.38E-2(80.4)	10.013E-3(80.4)	3.89E-6(7.1)	4.03E-8(7.1)	7.1-55.9	5.5-7.1//55.9-57.3
x=99	37.36E-2(80.4)	10.009E-3(80.4)	5.18E-5(55.9)	5.13E-7(55.9)	8.9-51.2	7.1-8.9//51.2-55.9

Tableau (C-3) présentant les écarts max et min et le taux d'écart entre les valeurs du taux volumique (V/V_0) de certains composants Magnésio-wüstite x=1 à 20 par rapport au MgO.

	DMax	TDMax (%)	DMin	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	2.62E-3(123)	3.73E-5(123)	1.23E-5(13.4)	1.33E-5(13.4)	13.4 –135.8	12.3 –13.4
x=3	2.81E-3(123)	4.00E-5(123)	10.91E-5(16)	11.84E-7(16)	16 –135.8	13.4 –16
x=5	3.00E-3(123)	4.28E-5(123)	4.59E-5(17.1)	5.01E-5(17.1)	16 –135.8	16 –17.1
x=6	3.10E-3(123)	4.42E-5(123)	4.23E-5(17.1)	4.61E-7(17.1)	19.9 –135.8	17.1 –19.9
x=9	3.39E-3(123)	4.83E-5(123)	3.71E-5(19.9)	4.09E-5(19.9)	21 –135.8	19.9 –21
x=10	3.49E-3(123)	4.97E-5(123)	2.51E-5(21)	2.78E-7(21)	22.6 –135.8	21 –22.6
x=11	3.59E-3(123)	5.11E-5(123)	2.61E-5(22.6)	2.90E-7(22.6)	22.6 –135.8	21 –22.6
x=12	3.68E-3(123)	5.25E-5(123)	3.43E-5(21)	3.84E-5(23.8)	23.8 –135.8	22.6 –23.8
x=16	4.08E-3(123)	5.81E-5(123)	3.67E-5(28.3)	4.19E-5(28.3)	29.6 –135.8	28.3 –29.6
x=17	4.18E-3(123)	5.95E-5(123)	1.80E-5(29.6)	2.16E-5(29.6)	32.8 –135.8	29.6 –32.8
x=19	4.47E-3(95.8)	6.23E-5(123)	6.27E-5(32.8)	7.23E-7(32.8)	37.3–135.8	32.8 –37.3
x=20	4.64E-3(95.8)	6.37E-5(123)	2.01E-5(37.3)	2.35E-7(37.3)	37.3–135.8	32.8 –37.3

Tableau (C-4) présentant les écarts max et min et le taux d'écart entre les valeurs du taux volumique (V/V_0) de certains composants Magnésioiwüstite $x=21$ à 99 par rapport au MgO.

	DMax	TDMax (%)	DMin	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=21	4.81E-3(95.8)	6.53E-5(95.8)	1.93E-5(38.6)	2.27E-7(38.6)	41.9–135.8	38.6 –41.9
x=22	6.76E-3(95.8)	6.76E-3(95.8)	7.15E-6(41.9)	8.44E-8(41.9)	41.9–135.8	38.6 –41.9
x=23	6.99E-3(95.8)	6.99E-3(95.8)	7.05E-5(41.9)	8.37E-7(41.9)	46.5–135.8	41.9 –46.5
x=24	7.22E-3(95.8)	7.22E-3(95.8)	4.37E-7(46.5)	5.28E-9(46.5)	46.5–135.8	41.9 –46.5
x=25	5.49E-3(95.8)	7.45E -5(95.8)	3.22E-7(47.8)	3.89E-7(47.8)	51.2–135.8	47.8 –51.2
x=26	5.49E-3(95.8)	7.68E -5(95.8)	7.86E-6(51.2)	9.58E-8(51.2)	55.9–135.8	51.2-55.9
x=27	5.49E-3(95.8)	7.91E -5(95.8)	2.21E-5(55.9)	2.72E-7(55.9)	55.9–135.8	51.2-55.9
x=28	6.00E-3(95.8)	8.14E-5(95.8)	1.30E-5(60.7)	1.62E-7(60.7)	60.7–135.8	57.3 –60.7
x=29	8.38E-3(95.8)	8.38E-5(95.8)	7.92E-6(66.9)	1.01E-7(66.9)	66.9–135.8	65.5 –66.9
x=90	1.71E-2(95.8)	2.32E-4(95.8)	3.81E-5(66.9)	3.89E-5(0.3)	80.4-135.8	66.9 –80.4
x=92	1.75E-2(95.8)	2.37E-4(95.8)	3.92E-5(0.3)	3.95E-5(0.3)	80.4-135.8	66.9 –80.4
x=99	18.78E-3(95.8)	25.5E-5(95.8)	41.20E-7(0.3)	41.20E-7(0.3)	80.4-135.8	66.9 –80.4

C-1-2 Comparaison de la densité:

Tableau (C-5) présente l'écart et son taux pour les valeurs de la densité du FeO et MgO à certaines pressions.

P(GPa)	D(g/cm ³)	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	3.19	Min	47.74E-4	/	91.37E-4	/
28.3	3.54	/	47.17E-4	Min	88.34E-4	Min
95.8	4.55	/	49.00E-4	Max	95.02E-4	Max
135.8	4.82	Max	48.59E-4	/	93.50E-4	/

Tableau (C-6) présente l'écart max et min des valeurs de la densité des composants Magnésioiwüstite par rapport au FeO et MgO.

	DMax(g/cm ³)	TDMax (%)	DMin(g/cm ³)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	x=1	4.77 (135.8)	4.86E-1(95.8)	3.16(0)	4.67E-3(28.3)	0-135.8 /
	x=19	3.97(135.8)	4.04 E-3(95.8)	2.61(0)	3.86E-3(28.3)	0-135.8 /
	x=20	3.92 (135.8)	3.99E-3(95.8)	2.58(0.3)	3.82E-3(28.3)	0-135.8 /
	x=99	5.25E-2(135.8)	5.38E-5(95.8)	3.41E-2(0,3)	5.00E-5(28.3)	0-135.8 /
MgO	x=1	4.42E-2(135.8)	8.74E-5(95.8)	2.97E-2(0)	8.41E-5(28.3)	/ /
	x=99	4.77E-2(135.8)	9.50E-3(95.8)	3.15(0)	8.83E-3(28.3)	/ /

Tableau (C-7) présente l'écart et son taux pour les valeurs de la densité du FeO et MgO par rapport au modèle PREM.

	P(GPa)	D(g/cm ³)	N-V	TD(%)	N-V
FeO	0	5.65	Max	5.54E-2	Max
	23.8	3.41	/	0.85E-2	/
	23.8	3.01	Min	0.69E-2	Min
	129.3	4.28	/	0.78E-2	/
	133.4	4.31	/	0.77E-2	/
	135.8	4.35	/	0.78E-2	/
MgO	0	2.47	Max	2.42E-2	Max
	0.3	0.91	/	0.35E-2	/
	0.3	0.61	/	0.21E-2	/
	13.4	0.20	/	0.06E-2	/
	13.4	0.025	/	0.07E-3	/
	16	0.023	Min	0.06E-3	Min
	17.1	0.45	/	0.14E-2	/
	135.8	0.47	/	8.49E-4	/

Tableau (C-8) présente les écarts max et min et les taux pour les valeurs de la densité du FeO, MgO et certains composants Magnésio-wüstite par rapport au modèle PREM.

	DMax(g/cm ³)	TDMax (%)	DMin(g/cm ³)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	5.65(0)	5.54E-2(0)	3.01(23.8)	0.69E-2(23.8)	/	/
MgO	2.47(0)	2.42E-2(0)	0.023(16)	0.06E-3(16)	16-135.8	17.1-19.9
x=1	2.50(0)	2.45E-2(0)	8.69E-3(16)	2.28E-5(16)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=2	2.53(0)	2.48E-2(0)	19.49E-3(23.8)	4.88E-5(23.8)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=3	2.56(0)	2.51E-2(0)	4.35E-3(19.9)	1.10E-5(19.9)	21-135.8	19.9-21
x=4	2.58(0)	2.53E-2(0)	13.90E-3(21)	3.49E-5(21)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=5	2.61(0)	2.56E-2(0)	46.57E-3(21)	1.17E-4(21)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=6	2.64(0)	2.59E-2(0)	79.27E-3(21)	1.99E-4(21)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=7	2.67(0)	2.62E-2(0)	11.20E-2(21)	2.81E-4(21)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=8	2.70(0)	2.65E-2(0)	11.70E-2(135.8)	21.01E-5(135.8)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=9	2.73(0)	2.68E-2(0)	72.25E-3(135.8)	12.97E-5(135.8)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=10	2.76(0)	2.71E-2(0)	27.39E-3(135.8)	4.91E-5(135.8)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=11	2.79(0)	2.74E-2(0)	0.76E-3(108)	0.14E-5(108)	23.8-106.4 111.9-111.9	23.8-23.8//106.4-108 108-111.9//111.9-117.4
x=12	2.82(0)	2.77E-2(0)	13.96E-3(66.9)	2.84E-5 (66.9)	23.8-66.9	23.8-23.8//66.9-80.4
x=13	2.86(0)	2.80E-2(0)	0.41E-3(55.9)	8.61E-7 (55.9)	23.8-51.2 57.3-57.3	23.8-23.8//51.2-55.9 55.9-57.3//57.3-60.7
x=14	2.89(0)	2.83E-2(0)	0.81E-3(28.3)	1.82E-6 (28.3)	23.8-29.6	23.8-23.8//29.6-32.8
x=15	2.92(0)	2.86E-2(0)	21.61E-3(23.8)	4.93E-5 (23.8)	/	/
x=99	5.62(0)	5.51E-2(0)	2.97E-3(23.8)	4.93E-5 (23.8)	/	/

C-2 Comparaison des propriétés élastiques:

C-2-1 Comparaison du module d'incompressibilité:

Tableau (C-9) présente l'écart et sont taux pour les valeurs du module d'incompressibilité (K) pour le FeO et MgO à certaines pressions.

P(GPa)	D(GPa)	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	30.86	/	16.34E-4	Max	19.53E-4	Max
0.3	30.96	Max	16.21E-4	/	19.35E-4	/
46.5	0.69	Min	2.06E-5	/	2.06E-5	/
90.6	16.59	/	34.38E-5	/	33.24E-5	/
95.8	0.77	/	1.49E-5	Min	1.50E-5	Min
101.1	13.73	/	26.25E-5	/	25.58E-5	/
117.3	3.16	/	5.36E-5	/	5.34E-5	/
135.8	17.26	/	25.69E-5	/	26.37E-5	/

Tableau (C-10) présente l'écart max et min et le taux d'écart max et min des valeurs du module d'incompressibilité (K) pour certains composants Magnésio-wüstite par rapport au FeO et MgO.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	x=1 30.70(0.3)	16.2E-4(0)	68.17E-2(46.5)	1.48E-5(95.8)	0-41.9 95.8-95.8 123-135.8	41.9-46.5//90.6-95.8 95.8-101.1//117.4-123
	x=99 0.36(0.3)	1.92E-5(0)	7.31E-3(46.5)	1.64E-7(95.8)	0-41.9 95.8-95.8 123-135.8	41.9-46.5//90.6-95.8 95.8-101.1//117.4-123
MgO	x=1 26.49E-2(0.3)	1.67E-5(0)	6.48E-3(46.5)	1.36E-7(95.8)	46.5-90.7 101.1-117.4	41.9-46.5//90.6-95.8 95.8-101.1//117.4-123
	x=99 30.60(0.3)	19.30E-4(0)	0.68 (46.4)	14.8E-6(95.8)	46.5-90.7 101.1-117.4	41.9-46.5//90.6-95.8 95.8-101.1//117.4-123

Tableau (C-11) présente la différence de valeurs du module d'incompressibilité (K) pour deux composants Magnésio-wüstite consécutifs à certaines pressions.

P(GPa)	Entre x=1 et x=2	Entre x=98 et x=99
0	26.4E-2	36.05E-2
0.3	26.6E-2	36.05E-2
41.9	26.7E-3	30.4E-3
46.5	6E-3	7E-3
95.8	7E-3	9E-3
123	19E-3	46E-3
135.8	15.6E-2	39.8E-3

Tableau (C-12) présente l'écart et son taux pour le module d'incompressibilité (K) entre le FeO, MgO et ses valeurs au modèle PREM.

	P(GPa)	D(GPa)	N-V	TD(%)	N-V
FeO	0	186.72	Max	87.07E-2	Max
	23.8	12.48	/	5E-4	/
	23.8	31.18	/	10.41E-4	
	60.7	51.94	/	12.12E-4	/
	129.3	3.63	Min	5.63E-5	Min
	133.4	6.36	/	9.72E-5	/
	135.8	14.72	/	22.40E-5	
MgO	0	155.86	Max	72.68E-2	Max
	13.4	37.75	/	21.74E-4	/
	13.4	21.86	/	11.53E-4	/
	16	12.83	/	6.15E-4	/
	17.1	35.44	/	18.63E-4	/
	19.9	3.30	/	1.38E-4	/
	46.5	50.97	/	13.21E-4	/
	135.8	2.54	Min	3.87E-5	Min

Tableau (C-13) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs du module d'incompressibilité (K) entre le FeO, MgO et certains composants Magnésio-wüstite avec ceux du modèles PREM.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	186.72(0)	87.07E-2(0)	3.63(129.3)	5.63E-5(129.3)	23.8-129.3	23.8-23.8//129.3-133.4
MgO	155.96(0)	72.68E-2(0)	2.54(135.8)	3.87E-5(135.8)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=1	156.12(0)	72.80E-2(0)	2.39(135.8)	3.63E-5(135.8)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=16	160.16(0)	74.68E-2(0)	1.76E-2(135.8)	2.68E-7(135.8)	19.9-133.4	17.1-19.9//133.4-135.8
x=17	160.44(0)	74.81E-2(0)	14.29E-2(135.8)	2.18E-6(19.9)	19.9-133.4	17.1-19.9//133.4-135.8
x=18	160.72(0)	74.94E-2(0)	12.88E-3(19.9)	5.37E-7(19.9)	19.9-133.4	17.1-19.9//133.4-135.8
x=19	160.99(0)	75.07E-2(0)	17.33E-2(19.9)	7.23E-6(19.9)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=20	161.27(0)	75.20E-2(0)	0.36(19.9)	9.54E-6(135.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=21	161.55(0)	75.33E-2(0)	0.55(19.9)	1.20E-5(135.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=22	161.83(0)	75.46E-2(0)	0.68(23.8)	1.45E-5(135.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=23	161.11(0)	75.59E-2(0)	0.52 (23.8)	1.69E-5(135.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=24	162.39(0)	75.72E-2(0)	0.37(23.8)	1.43E-5(23.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=25	162.68(0)	75.86E-2(0)	0.21(23.8)	0.81E-5(23.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=26	162.96(0)	75.99E-2(0)	0.05(23.8)	0.20E-5(23.8)	21-133.4	19.9-21//133.4-135.8
x=27	163.25(0)	76.12E-2(0)	0.11(23.8)	0.42E-5(23.8)	21-22.6 23.8-133.4	19.9-21//22.6-23.8 23.8-23.8//133.4-135.8
x=29	163.82(0)	76.39E-2(0)	0.41(22.6)	0.61E-5(22.6)	21-22.6 23.8-133.4	19.9-21//22.6-23.8 23.8-23.8//133.4-135.8
x=31	164.39(0)	76.66E-2(0)	70.44E-3(22.6)	0.28E-5(22.6)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=32	164.68(0)	76.79E-2(0)	98.50E-3(22.6)	0.39E-5(22.6)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=37	166.14(0)	77.47E-2(0)	94.81E-2(22.6)	3.76E-5(22.6)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=38	166.44(0)	77.61E-2(0)	1.12(22.6)	4.21E-5(133.4)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=39	166.73(0)	77.75E-2(0)	1.29(22.6)	4.00E-5(133.4)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=40	167.03(0)	77.89E-2(0)	1.14(21)	3.79E-5(133.4)	21-22.6 23.8-133.4	19.9-21//22.6-23.8 23.8-23.8//133.4-135.8
x=41	167.33(0)	78.02E-2(0)	0.95(21)	3.58E-5(133.4)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=42	167.63(0)	78.16E-2(0)	0.77(21)	3.08E-5(21)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=46	168.83(0)	78.72E-2(0)	21E-3(21)	8.25E-7(21)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=47	169.13(0)	78.87E-2(0)	16.70E-2(21)	0.67E-5 (21)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=48	169.44(0)	79.01E-2(0)	35.5E-2(21)	1.43E-5(21)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=49	169.74(0)	79.15E-2(0)	54.36E-2(21)	1.87E-5(133.4)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=51	170.35(0)	79.44E-2(0)	92.16E-2(21)	1.44E-5(133.4)	21-21 23.8-133.4	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8//133.4-135.8
x=52	170.66(0)	79.58E-2(0)	79.86E-2(133.4)	1.22E-5(133.4)	23.8-133.4	23.8-23.8//133.4-135.8
x=57	172.22(0)	80.31E-2(0)	8.55E-2(133.4)	0.13E-5(133.4)	23.8-133.4	23.8-23.8//133.4-135.8
x=58	172.53(0)	80.45E-2(0)	5.80E-2(133.4)	8.86E-7(133.4)	23.8-133.4	23.8-23.8//133.4-135.8
x=89	182.80(0)	85.24E-2(0)	4.66(133.4)	7.12E-5(133.4)	23.8-129.3	23.8-23.8//129.3-133.4
x=90	183.15(0)	85.40E-2(0)	4.62(129.3)	7.15E-5(129.3)	23.8-129.3	23.8-23.8//129.3-133.4
x=99	186.35(0)	86.90E-2(0)	3.37(129.3)	5.78E-5(129.3)	23.8-129.3	23.8-23.8//129.3-133.4

C-2-2 Comparaison du module de cisaillement:

Tableau (C-14) présente l'écart et son taux pour les valeurs du module de cisaillement (G) entre le FeO et MgO à certaines pressions.

P(GPa)	D(GPa)	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	12.59	/	93.66E-5	/	10.33E-4	/
0.6	12.13	/	89.11E-5	/	9.78E-4	/
60.7	5.14	Min	23.13E-5	/	2.37E-4	/
65.5	5.21	/	22.81E-5	Min	2.33E-4	Min
66.9	5.34	/	23.28E-5	/	2.38E-4	/
80.4	120.36	/	1.00E-2	/	50.01E-4	/
135.8	165.47	Max	1.27E-2	Max	55.87E-4	Max

Tableau (C-15) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs du module de cisaillement (G) entre le FeO et certains composants Magnésio-wüstite.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	244.95(135.8)	18.74E-3(135.8)	0.37(12.3)	2.35E-5(12.3)	0-9.9	9.9 -12.3
x=4	245.85(135.8)	18.81E-3(135.8)	1.64(12.3)	10.50E-5(12.3)	0-9.9	9.9 -12.3
x=5	246.15(135.8)	18.84E-3(135.8)	1.73(9.9)	11.37E-5(9.9)	0-9.9	9.9 -12.3
x=8	247.06(135.8)	18.90E-3(135.8)	0.39(9.9)	2.56E-5(9.9)	0-9.9	9.9 -12.3
x=9	247.37(135.8)	18.93E-3(135.8)	0.06(9.9)	0.40E-5(9.9)	0-8.9	8.9 -9.9
x=10	247.67(135.8)	18.95E-3(135.8)	0.51(9.9)	3.37E-5(9.9)	0-8.9	8.9 -9.9
x=11	247.98(135.8)	18.98E-3(135.8)	0.50(8.9)	3.36E-5(8.9)	0-8.9	8.9 -9.9
x=12	248.29(135.8)	19.00E-3(135.8)	0.05(8.9)	0.30E-5(8.9)	0-8.98	8.9 -9.9
x=13	248.60(135.8)	19.02E-3(135.8)	0.42(8.9)	2.78E-5(8.9)	0-7.1	7.1 -8.9
x=14	248.91(135.8)	19.05E-3(135.8)	0.88(8.9)	5.87E-5(8.9)	0-7.1	7.1 -8.9
x=17	249.84(135.8)	19.12E-3(135.8)	0.25(7.1)	1.70E-5(7.1)	0-7.1	7.1 -8.9
x=18	250.15(135.8)	19.19E-3(135.8)	0.23(7.1)	1.57E-5(7.1)	0-5.5	5.5 -7.1
x=19	250.47(135.8)	19.19E-3(135.8)	0.72(5.5)	4.85E-5(7.1)	0-5.5	5.5 -7.1
x=20	250.78(135.8)	19.19E-3(135.8)	1.03(5.5)	7.09E-5(5.5)	0-5.5	5.5 -7.1
x=22	251.41(135.8)	19.24E-3(135.8)	0.03(5.5)	0.22E-5(5.5)	0-5.5	5.5 -7.1
x=23	251.73(135.8)	19.26E-3(135.8)	0.47(5.5)	3.23E-5(5.5)	0-4.8	4.8 -5.5
x=24	252.05(135.8)	19.29E-3(135.8)	0.42(4.8)	2.38E-7(4.8)	0-4.8	4.8 -5.5
x=25	252.37(135.8)	19.31E-3(135.8)	0.51(4.8)	3.52E-5(4.8)	0-2.5	2.5 -4.8
x=27	253.01(135.8)	19.36E-3(135.8)	1.53(4.8)	10.64E-5(4.8)	0-2.5	2.5 -4.8
x=30	253.98(135.8)	19.43E-2(135.8)	0.15(2.5)	1.05E-5(2.5)	0-2.5	2.5 -4.8
x=31	254.30(135.8)	19.45E-2(135.8)	0.04(2.2)	1.05E-5(2.5)	0-2.2	2.2 -2.5
x=32	254.63(135.8)	19.48E-2(135.8)	0.50(2.2)	0.30E-5(2.2)	0-0.6	0.6 -2.2
x=33	254.95(135.8)	19.51E-2(135.8)	1.04(2.2)	3.60E-5(2.2)	0-0.6	0.6 -2.2
x=34	255.28(135.8)	19.53E-2(135.8)	0.72(0.6)	7.50E-5(0.6)	0-0.6	0.6 -2.2
x=35	255.61(135.8)	19.56E-2(135.8)	0.16(0.3)	5.28E-5(0.6)	0-0.6	0.6 -2.2
x=36	255.94(135.8)	19.58E-2(135.8)	0.03(0.3)	1.16E-5(0.6)	0-0.3	0.3 -0.6
x=37	256.27(135.8)	19.61E-2(135.8)	0.13(0)	0.99E-5(0)	/	/
x=99	278.77(135.8)	21.33E-2(135.8)	41.87(0)	31E-4(0)	/	/

Tableau (C-16) présente l'écart max et min et le taux max et min des valeurs du module de cisaillement (G) entre le MgO et certains composants Magnésio-wüstite.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-I	I-P-I
x=1	109.81(66.9)	4.89E-3(66.9)	0.45(4.8)	3.38E-5(4.8)	0-2.5	2.5-4.8
x=3	109.26(66.9)	4.86E-3(66.9)	1.37(4.8)	10.38E-5(4.8)	0-2.5	2.5-4.8
x=4	108.99(66.9)	4.85E-3(66.9)	1.24(2.5)	9.72E-5(2.5)	0-2.5	2.5-4.8
x=6	108.43(66.9)	4.82E-3(66.9)	0.28(2.5)	2.23E-5(2.5)	0-2.5	2.5-4.8
x=7	108.16(66.9)	4.81E-3(66.9)	0.20(2.5)	1.54E-5(2.5)	0-2.2	2.2-2.5
x=8	107.88(66.9)	4.80E-3(66.9)	0.25(2.2)	1.95E-5(2.2)	0-0.6	0.6-2.2
x=10	107.33(66.9)	4.78E-3(66.9)	1.22(2.2)	9.63E-5(2.2)	0-0.6	0.6-2.2
x=11	107.05(66.9)	4.76E-3(66.9)	0.76(0.6)	6.12E-5(0.6)	0-0.6	0.6-2.2
x=12	106.77(66.9)	4.75E-3(66.9)	0.26(0.6)	2.08E-5(0.6)	0-0.6	0.6-2.2
x=13	106.49(66.9)	4.74E-3(66.9)	0.11(0)	0.93E-5(0.6)	0-0.6	0.3-0.6
x=14	106.22(66.9)	4.73E-3(66.9)	0.26(0.3)	2.08E-5(0)	/	/
x=51	95.89(66.9)	42.66E-4(66.9)	20.92(0.3)	16.94E-4(0.3)	/	/
x=52	95.87(135.8)	42.54E-4(66.9)	21.54(0.3)	17.44E-4(0.3)	/	/
x=56	97.63(135.8)	42.04E-4(66.9)	24.65(0.3)	19.46E-4(0.3)	/	/
x=57	97.61(135.8)	41.91E-4(66.9)	24.65(0.3)	19.84E-4(80.4)	/	/
x=66	100.81(135.8)	40.78E-4(66.9)	30.47(0.3)	18.51E-4(80.4)	/	/
x=67	101.17(135.8)	40.66E-4(66.9)	31.14(0)	18.17E-4(80.4)	/	/
x=78	105.20(135.8)	39.27E-4(66.9)	38.68(0)	16.33E-4(80.4)	/	/
x=79	105.58(135.8)	39.15E-4(66.9)	38.90(80.4)	16.17E-4(80.4)	/	/
x=89	109.38(135.8)	38.34E-4(0)	34.87(80.4)	14.49E-4(80.4)	/	/
x=99	113.30(135.8)	44.05E-4(0)	30.84(80.4)	12.81E-4(80.4)	/	/

Tableau (C-17) présente l'écart des valeurs du module de cisaillement (G) entre deux composants Magnésio-wüstite consécutifs.

P(GPa)	Entre x=1 et x=2	Entre x=98 et x=99
0	47.7E-2	76.64E-2
0.3	48.1E-2	79.58E-2
41.9	53E-3	61E-3
46.5	13E-3	15E-3
90.6	32.4E-3	34E-2
95.8	14E-3	17E-3
101.1	26.5E-2	28.5E-2
117.3	59E-3	68E-3
123	38E-3	46E-3
135.8	3E-3	39.8E-3

Tableau (C-18) présente l'écart et son taux des valeurs du module de cisaillement (G) entre le FeO, MgO et ses valeurs dans le modèle PREM.

	P(GPa)	D(GPa)	N-V	TD(%)	N-V
FeO	0	134.39	/	Très grand	Max
	55.9	6.22	Min	29.63E-5	/
	65.5	6.28	/	28.27E-5	Min
	135.8	162.90	Max	55.07E-5	/
MgO	0	121.8	Max	Très grand	Max
	23.8	42.03	/	3.40E-3	/
	23.8	10.57		0.70E-3	
	29.6	13.14E-3	Min	7.5E-7	Min
	32.8	0.3	/	1.65E-5	/
	108	0.46	/	1.71E-5	/
	111.9	62.67E-3	/	0.23E-5	/
	129.3	0.62	/	2.14E-5	/
	133.4	0.77	/	2.64E-5	/
	135.8	2.57	/	8.76E-5	/

Tableau (C-19) présente l'écart max et min et les taux max et min entre les valeurs du module de cisaillement (G) pour le FeO, MgO et certains composants Magnésioiwüstite avec ses valeurs dans le modèle PREM.

	DMax(GPa)	TDMax (%)	DMin(GPa)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	162.90(135.8)	Très grand	6.22(55.9)	28.27E-5(65.5)	80.4-135.8	66.9-80.4
MgO	121.8(0)	Très grand	13.14E-3(29.6)	7.5E-7(29.6)	28.3-28.3 111.9-129.3	23.8-28.3//29.6-32.8 108-111.9//129.3-133.4
x=1	115.8(0)	Très grand	39.45(28.3)	22.82E-4(28.3)	/	/
x=38	135.09(0)	Très grand	48.21(28.3)	28.03E-4(28.3)	/	/
x=52	143.36(0)	Très grand	51.71(28.3)	29.91E-4(28.3)	/	/
x=53	143.98(0)	Très grand	51.66(80.4)	30.06E-4(28.3)	/	/
x=82	163.33(0)	Très grand	40.00(80.4)	34.49E-4(28.3)	/	/
x=83	164.06(0)	Très grand	39.60(80.4)	16.61E-4(80.4)	/	/
x=99	176.25(0)	Très grand	33.14(80.4)	13.91E-4(80.4)	/	/

C-3 Comparaison des vitesses sismiques:

C-3-1 Comparaison de la vitesse d'onde longitudinale:

Tableau (C-20) présente l'écart et son taux pour les valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_P) entre le FeO et MgO à certaines pressions.

P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	2.15	Min	2.90E-3	Min	2.25E-3	Min
80.4	4.80	/	5.85E-3	Max	3.96E-3	Max
95.8	4.81	/	5.56E-3	/	3.57E-3	/
135.8	5.18	Max	5.62E-3	/	3.60E-3	/

Tableau (C-21) présente l'écart des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_P) en (km/s) entre deux composants Magnésio-wüstite consécutifs.

P(GPa)	Entre x=1 et x=2	Entre x=98 et x=99
0	26.11E-3	08.05E-3
85.5	64.33E-3	31.19E-3
95.8	60.60E-3	28.78E-3
101.1	64.95E-3	31.32E-3
135.8	60.53E-3	27.81E-3

Tableau (C-22) présente les écarts max, min et les taux max et min pour les valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_P) entre le FeO et certains composants Magnésio-wüstite.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	5.78(123)	67.45E-4(80.4)	2.00(0.3)	26.76E-4(0.3)	/	/
x=4	5.59(123)	65.12E-4(80.4)	1.92(0.3)	25.72E-4(0.3)	/	/
x=5	5.53(124.1)	64.36E-4(80.4)	1.90(0.3)	25.39E-4(0.3)	/	/
x=6	5.47(124.1)	63.61E-4(80.4)	1.87 (0.3)	25.06E-4(0.3)	/	/
x=7	5.42(135.8)	62.87E-4(80.4)	1.85 (0.3)	24.73E-4(0.3)	/	/
x=45	3.62(135.8)	39.26E-4(135.8)	1.12(0.3)	15.05E-4(0.3)	/	/
x=99	1.89(135.8)	20.47 E-4(135.8)	0.55 (0.3)	7.38E-4(0.3)	/	/

Tableau (C-23) présente l'écart max, min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_P) entre le MgO et certains composants Magnésio-wüstite x=1 à 16

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	1.23(66.9)	9.81E-4(66.9)	1.04E-2(7.1)	1.03E-5(7.1)	0-5.5	5.5-7.1
x=2	1.17(66.9)	9.32 E-4(66.9)	2.01E-2(8.9)	1.97E-5(8.9)	0-7.1	7.1-8.9
x=3	1.11(66.9)	8.84 E-4(66.9)	1.11E-2(9.9)	1.08E-5(9.9)	0-8.9	8.9-9.9
x=4	1.05(66.9)	8.36 E-4(66.9)	2.04E-2(9.9)	1.99E-5(9.9)	0-9.9	9.9-12.3
x=5	0.99(66.9)	7.89 E-4(66.9)	0.24E-2(12.3)	0.22E-5(12.3)	0-9.9	9.9-12.3
x=6	0.93(66.9)	7.42 E-4(66.9)	0.40E-2(13.4)	0.39E-5(13.4)	0-13.4	13.4-16
x=7	0.88(66.9)	6.95E-4(66.9)	2.64E-2(16)	2.50E-5(16)	0-13.4	13.4-16
x=8	0.82(66.9)	6.50E-4(66.9)	0.72E-2(16)	0.68E-5(16)	0-16	16-17.1
x=9	0.76(66.9)	6.04E-4(66.9)	1.41E-2(17.1)	1.32E-5(17.1)	0-17.1	17.1-19.9
x=10	0.41(0.3)	5.59E-4(66.9)	1.88E-2(19.9)	1.75E-5(19.9)	0-17.1	17.1-19.9
x=11	0.44(0.3)	5.15E-4(66.9)	0.86E-2(135.8)	0.60E-5(135.8)	0-19.9	19.9-21
x=12	0.46(0.3)	4.76E-4(0.3)	0.89E-2(22.6)	0.81E-5(22.6)	0-21	21-22.6
x=13	0.48(0.3)	5.00E-4(0.3)	0.23E-2(23.8)	0.21E-5(23.8)	0-23.8 95.8-95.8 127-135.8	23.8-28.3//90.6-95.8 95.8-101.1//124.1-127
x=14	0.50(0.3)	5.23E-4(0.3)	0.33E-2(108)	0.24E-5(108)	0-23.8 80.4-95.8 111.9-135.8	23.8-28.3//65.5-66.9 95.8-101.1//108-111.9
x=15	0.53(0.3)	5.45E-4(0.3)	0.50E-2(28.3)	0.45E-5(28.3)	0-23.8 80.4-135.8	23.8-28.3//66.9-80.4
x=16	0.55(0.3)	5.68E-4(0.3)	1.32E-2(29.6)	1.18E-5(29.6)	0-29.6 80.4-135.8	29.6-32.8//66.9-80.4

Tableau (C-24) présente les écarts max, min et les taux max, min des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_p) entre le MgO et certains composants Magnésio-wüstite x=17 à 99.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMIn(%)	I-V-I	I-P-I
x=17	0.57(0.3)	5.90E-4(0.3)	0.89E-2(32.8)	0.78E-5(32.8)	0-32.8 80.4-135.8	32.8-37.3//66.9-80.4
x=18	0.60(0.3)	6.11E-4(0.3)	0.19E-2(37.3)	0.17E-5(37.3)	0-32.8 80.4-135.8	32.8-37.3//66.9-80.4
x=19	0.61(0.3)	6.33E-4(0.3)	0.60E-2(41.9)	0.50E-5(41.9)	0-38.6 80.4-135.8	38.6-41.9//66.9-80.4
x=20	0.63(0.3)	3.42E-4(0.3)	5.88E-3(46.5)	0.28E-5(46.5)	0-41.9 80.4-135.8	41.9-46.5//66.9-80.4
x=21	0.65(0.3)	3.60E-4(0.3)	3.11E-3(51.2)	0.29E-5(51.2)	0-47.8 80.4-135.8	47.8-51.2//66.9-80.4
x=22	0.67(0.3)	3.78E-4(0.3)	5.00E-3(55.9)	0.30E-5(55.9)	0-55.9 80.4-135.8	55.9-57.3//66.9-80.4
x=23	0.69(0.3)	3.96E-4(0.3)	9.78E-3(65.5)	0.32E-5(65.5)	0-60.7 80.4-135.8	60.7-65.5//66.9-80.4
x=24	0.71(0.3)	4.14E-4(0.3)	3.10E-2(66.9)	0.33E-5(66.9)	/	/
x=25	0.73(0.3)	4.31E-4(0.3)	7.99E-2(66.9)	0.35E-5(66.9)	/	/
x=26	0.75(0.3)	4.50E-4(0.3)	1.28E-1(66.9)	0.36E-5(66.9)	/	/
x=27	0.80(135.8)	4.68E-4(0.3)	1.76E-1(66.9)	0.38E-5(66.9)	/	/
x=38	1.28(135.8)	9.92E-4(0.3)	0.67(66.9)	5.36E-4(66.9)	/	/
x=39	1.32(135.8)	10.10E-4(80.4)	0.72(66.9)	5.71E-4(66.9)	/	/
x=41	1.40(80.4)	10.79E-4(80.4)	0.80(66.9)	6.39E-4(66.9)	/	/
x=45	1.58(80.4)	12.13E-4(80.4)	0.97(66.9)	7.70E-4(66.9)	/	/
x=46	1.62(80.4)	12.46E-4(80.4)	1.01(32.8)	8.03E-4(66.9)	/	/
x=47	1.67(80.4)	12.79E-4(80.4)	1.04(32.8)	8.35E-4(66.9)	/	/
x=48	1.71(80.4)	13.12E-4(80.4)	1.06(29.6)	8.67 E-4(66.9)	/	/
x=49	1.75(80.4)	13.43E-4(80.4)	1.08(0)	8.98E-4(66.9)	/	/
x=60	2.19(80.4)	16.82E-4(80.4)	1.22(0)	12.30E-4(66.9)	/	/
x=61	2.23(80.4)	17.12E-4(80.4)	1.23(0)	12.58E-4(32.8)	/	/
x=62	2.27(80.4)	17.41E-4(80.4)	1.25(0)	12.80E-4(29.6)	/	/
x=63	2.30(80.4)	17.70E-4(80.4)	1.26(0)	13.03E-4(28.3)	/	/
x=64	2.34(80.4)	17.99E-4(80.4)	1.27(0)	13.24E-4(23.8)	/	/
x=65	2.38(80.4)	18.27E-4(80.4)	1.28(0)	13.38E-4(0)	/	/
x=99	3.51(80.4)	26.95E-4(80.4)	1.58(0)	16.61E-4(0)	/	/

Tableau (C-25) présente les écarts max, min et les taux max, min des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_p) entre le FeO, MgO et celles du modèle PREM.

	P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%)	N-V
FeO	0	5.98	Max	4.12E-2	Max
	0.6	0.68	/	99.56E-5	/
	0.6	0.63	/	78.05E-5	
	7.1	0.27	Min	33.58E-5	Min
	7.1	0.84	/	97.93E-5	
	135.8	4.5	/	32.78E-4	/
MgO	0	8.13	Max	5.61	Max
	19.9	0.77	/	76.67E-5	/
	23.8	0.69	/	67.42E-5	/
	23.8	0.21	/	19.75E-5	/
	28.3	94.87E-3	Min	8.59E-5	Min
	135.8	0.69	/	8.76E-5	/

Tableau (C-26) présente les écarts max, min et les taux max, min des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_p) entre le FeO, MgO, certains composants Magnésio-wüstite $x = 1$ à 32 avec celles du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-I	I-P-I
FeO	5.98(0)	4.12E-2(0)	26.83E-2(7.1)	3.35E-4(7.1)	0.6-135.8	0.6-0.6
MgO	8.13(0)	5.61E-2(0)	9.49E-2(28.3)	8.57E-5(28.3)	/	/
x=1	7.98(0)	5.50E-2(0)	0.68(28.3)	6.11E-4(28.3)	/	/
x=17	7.60(0)	5.24E-2(0)	0.025(28.3)	0.02E-2(28.3)	/	/
x=18	7.58(0)	5.23E-2(0)	0.013(28.3)	0.01E-2(28.3)	/	/
x=19	7.56(0)	5.21E-2(0)	0.001(23.8)	8.98E-7(28.3)	23.8-29.6	23.8-23.8//29.6-32.8
x=20	7.54(0)	5.20E-2(0)	0.009(32.8)	0.08E-4(32.8)	23.8-32.8 80.4-80.4	23.8-23.8//32.8-37.3 66.9-80.4//80.4-85.5
x=21	7.52(0)	5.19E-2(0)	0.002(37.3)	0.02E-4(37.3)	23.8-37.9 80.4-86.9 95.5-95.4	23.8-23.8//37.3-38.6 66.9-80.4//86.9-90.6 90.6-95.8//95.8-101.1
x=22	7.50(0)	5.17E-2(0)	0.013(41.9)	0.11E-4(41.9)	23.8-38.6 80.4-95.8	23.8-23.8//38.6-41.9 66.9-80.4//95.8-101.1
x=23	7.48(0)	5.16E-2(0)	0.0007(108)	5.40E-7(108)	23.8-46.5 80.4-108 123-127	23.8-23.8//46.5-47.8 66.9-80.4//108-111.9 117.4-123//127-128.8
x=24	7.46(0)	5.15E-2(0)	0.006(47.8)	0.05E-4(47.8)	23.8-47.8 80.4-129.8	23.8-23.8//47.8-51.2 66.9-80.4//129.3-133.4
x=25	7.44(0)	5.13E-2(0)	0.003(51.2)	0.02E-4(51.2)	23.8-51.2 80.4-135.8	23.8-23.8//51.2-55.9 66.9-80.4
x=26	7.42(0)	5.12E-2(0)	0.011(55.9)	0.09E-4(55.9)	23.8-51.2 80.4-135.8	23.8-23.8//51.2-55.9 66.9-80.44
x=27	7.40(0)	5.11E-2(0)	0.017(57.3)	0.14E-4(57.3)	23.8-57.3 80.4-135.8	23.8-23.8//57.3-60.7 66.9-80.4
x=28	7.38(0)	5.09E-2(0)	0.026(60.7)	0.21E-4(60.7)	23.8-60.7 80.4-135.8	23.8-23.8//60.7-65.5 66.9-80.4
x=29	7.37(0)	5.08E-2(0)	0.003(66.9)	0.24E-5(60.7)	23.8-135.8	23.8-23.8
x=32	7.31(0)	5.04E-2(0)	1.50E-2(21)	1.50E-5(21)	23.8-135.8	23.8-23.8

Tableau (C-27) présente les écarts max, min et les taux max, min des valeurs de la vitesse d'onde longitudinale (V_P) pour certains composants Magnésio-wüstite $x = 33$ à 99 avec celles du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=33	7.30(0)	5.03E-2(0)	1.32E-2(21)	1.30E-5(21)	21-21 23.8-135.8	19.9-21//21-22.6 23.8-23.8
x=34	7.28(0)	5.02E-2(0)	0.59E-2(23.8)	0.58E-5(23.8)	21-22.6 23.8-135.8	19.9-21//22.6-23.8 23.8-23.8
x=35	7.26(0)	5.01E-2(0)	1.85E-2(19.9)	1.85E-5(19.9)	21-135.8	19.9-21
x=36	7.25(0)	5.00E-2(0)	0.82E-2(19.9)	0.82E-5(19.9)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=43	7.14(0)	4.92E-2(0)	2.00E-2(17.1)	0.20E-4(17.1)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=44	7.12(0)	4.91E-2(0)	0.32E-2(17.1)	0.03E-4(17.1)	19.9-135.8	17.1-19.9
x=46	7.09(0)	4.89E-2(0)	4.17E-2(16)	0.44E-4(16)	17.1-135.8	16-17.1
x=47	7.08(0)	4.88E-2(0)	1.97E-2(16)	0.20E-4(16)	17.1-135.8	16-17.1
x=48	7.06(0)	4.87E-2(0)	0.22E-2(16)	0.22E-5(16)	16-135.8	13.4-16
x=49	7.05(0)	4.86E-2(0)	2.37E-2(16)	0.25E-4(16)	16-135.8	13.4-16
x=59	6.92(0)	4.77E-2(0)	1.48E-2(13.4)	0.16E-2(13.4)	16-135.8	13.4-16
x=60	6.91(0)	4.76E-2(0)	3.50E-3(13.4)	3.80E-6(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=72	6.77(0)	4.68E-2(0)	1.11E-2(13.4)	1.24E-5(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=73	6.76(0)	4.67E-2(0)	4.94E-3(13.4)	0.55E-5(13.4)	13.4-135.8	12.3-13.4
x=74	6.75(0)	4.66E-2(0)	8.68E-3(12.3)	0.98E-5(12.3)	12.3-135.8	9.9-12.3
x=75	6.74(0)	4.65E-2(0)	1.20E-2(8.9)	1.38E-5(8.9)	12.3-135.8	9.9-12.3
x=76	6.73(0)	4.64E-2(0)	1.79E-3(8.9)	0.20E-5(8.9)	8.9-8.9 12.3-135.8	7.1-8.9//8.9-9.9 9.9-12.3
x=77	6.72(0)	4.63E-2(0)	0.37E-3(9.9)	4.24E-5(9.9)	7.1-8.9 12.3-135.8	7.1-7.1//8.9-9.9 9.9-12.3
x=78	6.71(0)	4.62E-2(0)	1.35E-3(9.9)	1.56E-5(9.9)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=79	6.70(0)	4.62E-2(0)	2.63E-3(7.1)	3.08E-5(7.1)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=81	6.68(0)	4.60E-2(0)	5.12E-2(7.1)	0.60E-4(7.1)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=82	6.67(0)	4.59E-2(0)	5.99E-2(0.6)	0.74E-4(0.6)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=88	6.62(0)	4.57E-2(0)	6.39E-3(0.6)	0.79E-5(0.6)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=89	6.61(0)	4.56E-2(0)	2.11E-3(0.6)	0.26E-5(0.6)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=96	6.56(0)	4.52E-2(0)	44.23E-3(2.2)	2.39E-5(2.2)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6//0.6-2.2 7.1-7.1
x=99	6.54(0)	4.51E-2(0)	19.36E-3(2.2)	2.39E-5(2.2)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6//0.6-2.2 7.1-7.1

C-3-2 comparaison de la vitesse d'onde transversale

Tableau (C-28) présente l'écart et son taux des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_S) entre le FeO et MgO à certaines pressions

P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(€/FeO)	N-V	TD(€/MgO)	N-V
0	0.70	Min	15.36E-4	Min	13.52E-4	Min
80.4	3.56	/	97.09E-4	/	49.26E-4	/
135.8	4.01	Max	11.05E-3	Max	52.50E-4	Max

Tableau (C-29) présente l'écart des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) en (km/s) entre deux composants Magnésioiwüstite consécutifs.

P(GPa)	Entre x=1 et x=2	Entre x=98 et x=99
0	12.35E-3	16E-4
80.4	40.3E-3	18.9E-3
85.5	39.8E-3	18.6E-3
95.8	35E-3	16E-3
135.8	33.2E-3	14.1E-3

Tableau (C-30) présente les écarts max, min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) pour le FeO et certains composants Magnésioiwüstite.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	4.91(135.8)	1.35(135.8)	1.25(0)	0.27(0.3)	/	/
x=74	3.20(135.8)	0.88(135.8)	0.726(0)	0.161(0.3)	/	/
x=75	3.18(135.8)	0.87(135.8)	0.723(0.3)	0.160(0.3)	/	/
x=99	2.81(135.8)	0.77(135.8)	0.66(0.3)	0.15(0.3)	/	/

Tableau (C-31) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) entre le MgO et certains composants Magnésioiwüstite x=1 à 23.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	1.55(66.9)	21.78E-4(66.9)	11.76E-2(5.5)	1.96E-4(7.1)	/	/
x=2	1.50(66.9)	21.22E-4(66.9)	10.25E-2(5.5)	1.70E-4(7.1)	/	/
x=3	1.47(66.9)	20.67E-4(66.9)	8.74E-2(7.1)	1.44E-4(7.1)	/	/
x=4	1.43(66.9)	20.12E-4(66.9)	7.20E-2(7.1)	1.19E-4(7.1)	/	/
x=5	1.39(66.9)	19.60E-4(66.9)	5.70E-2(7.1)	0.93E-4(7.1)	/	/
x=6	1.35(66.9)	19.05E-4(66.9)	4.20E-2(7.1)	0/69E-4(7.1)	/	/
x=7	1.31(66.9)	18.52E-4(66.9)	2/73E-2(7.1)	0.45E-4(7.1)	/	/
x=8	1.28(66.9)	18.00E-4(66.9)	1.28E-2(7.1)	0.21E-4(7.1)	/	/
x=9	1.24(66.9)	17.5E-4(66.9)	0.15E-2(7.1)	0.02E-4(7.1)	7.1-7.1	5.5-7.1//7.1-8.9
x=10	1.20(66.9)	16.97E-4(66.9)	1.86E-3(4.8)	0.31E-5(4.8)	4.8-8.9	2.5-4.8//8.9-9.9
x=11	1.17(66.9)	16.46E-4(66.9)	4.44E-3(9.9)	0.72E-5(9.9)	4.8-9.9	2.5-4.8//9.9-12.3
x=12	1.13(66.9)	15.96E-4(66.9)	19.28E-3(9.9)	3.13E-5(9.9)	4.8-9.9	2.5-4.8//9.9-12.3
x=13	1.10(66.9)	15.47E-4(66.9)	7.47E-3(12.3)	1.20E-5(12.3)	4.8-9.9	2.5-4.8//9.9-12.3
x=14	1.06(66.9)	14.97E-4(66.9)	8.00E-3(12.3)	1.28E-5(12.3)	4.8-12.3	2.5-4.8//12.3-13.4
x=15	1.03(66.9)	14.49E-4(66.9)	1.00E-3(13.4)	0.16E-5(13.4)	4.8-13.4	2.5-4.8//13.4-16
x=16	0.99(66.9)	14.01E-4(66.9)	1.47E-3(2.5)	0.25E-5(2.5)	4.8-13.4	2.2-2.5//13.4-16
x=17	0.96(66.9)	13.53E-4(66.9)	3.61E-3(2.2)	0.63E-5(2.2)	2.5-13.4	2.2-2.5//13.4-16
x=18	0.93(66.9)	13.06E-4(66.9)	6.92E-3(2.2)	1.22E-5(2.2)	2.5-13.4	0.6-2.2//13.4-16
x=19	0.89(66.9)	12.59E-4(66.9)	7.58E-3(16)	1.20E-5(16)	2.2-16	0.6-2.2//16-17.1
x=20	0.86(66.9)	12.12E-4(66.9)	0.76E-3(17.1)	0.12E-5(17.1)	2.2-16	0.6-2.2//16-17.1
x=21	0.82(66.9)	11.67E-4(66.9)	15.52E-3(17.1)	2.44E-5(17.1)	2.2-17.1	0.6-2.2//17.1-19.9
x=22	0.80(66.9)	11.21E-4(66.9)	29.66E-3(19.9)	4.62E-5(19.9)	2.2-17.1	0.6-2.2//17.1-19.9
x=23	0.76(66.9)	10.76E-4(66.9)	12.47E-3(19.9)	1.94E-5(19.9)	2.2-17.1	0.6-2.2//17.1-19.9

Tableau (C-32) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) entre le MgO et certains composants Magnésio-wüstite $x=24$ à 55.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=24	0.73(66.9)	10.31E-4(66.9)	4.53E-3(19.9)	0.71E-5(19.9)	2.2-19.9	0.6-2.2//19.9-21
x=25	0.70(66.9)	09.87E-4(66.9)	1.41E-3(21)	0.22E-5(21)	2.2-19.9	0.6-2.2//19.9-21
x=26	0.67(66.9)	09.43E-4(66.9)	15.72E-3(21)	2.44E-5(21)	2.2-21	0.6-2.2//21-22.6
x=27	0.64(66.9)	09.00E-4(66.9)	1.26E-3(22.6)	0.20E-5(22.6)	2.2-22.6	0.6-2.2//22.6-23.8
x=28	0.61(66.9)	08.57E-4(66.9)	3.93E-3(23.8)	0.61E-5(23.8)	2.2-22.6	0.6-2.2//22.6-23.8
x=29	0.58(66.9)	08.14E-4(66.9)	6.62E-3(85.5)	0.91E-5(85.5)	2.2-23.8 80.4-80.4	0.6-2.2//23.8-28.3 66.9-80.4//80.4-85.5
x=30	0.55(66.9)	7.71E-4(66.9)	5.88E-3(0.6)	1.07E-5(0.6)	2.2-23.8 80.4-86.9 95.8-95.8	0.6-2.2//23.8-28.3 66.9-80.4//86.9-90.6 90.6-95.8//95.8-101.1
x=31	0.52(66.9)	7.30E-4(66.9)	1.99E-3(0.6)	0.36E-5(0.6)	0.6-23.8 80.4-95.8	0.3-0.6//23.8-28.3 66.9-80.4//95.8-101.1
x=32	0.49(66.9)	6.88E-4(66.9)	7.24E-3(28.3)	1.10E-5(28.3)	0.6-23.8 80.4-95.8	0.3-0.6//23.8-28.3 66.9-80.4//95.8-101.1
x=33	0.43(66.9)	6.47E-4(66.9)	3.42E-3(135.8)	0.45E-5(135.8)	0.6-28.3 80.4-101.1	0.3-0.6//28.3-29.6 66.9-80.4//101.1-106.4
x=34	0.43(66.9)	6.06E-4(66.9)	3.02E-3(111.9)	0.40E-5(111.9)	0.6-29.6 80.4-108	0.6-2.2//29.6-32.8 66.9-80.4//108-111.9
x=35	0.42(66.9)	5.66E-4(66.9)	0.28E-3(0.3)	5.15E-7(0.3)	0.3-29.6 80.4-135.8	0-0.3//29.6-32.8 66.9-80.4
x=36	0.37(66.9)	5.31E-4(66.9)	6.86E-3(32.8)	1.03E-5(32.8)	0.3-32.8 80.4-135.8	0-0.3//32.8-37.3 66.9-80.4
x=37	0.34(66.9)	5.48E-4(66.9)	14.38E-3(0.3)	2.65E-5(0.3)	0.3-32.8 80.4-135.8	0-0.3//32.8-37.3 66.9-80.4
x=38	0.35(8.9)	5.65E-4(66.9)	6.33E-3(37.3)	0.94E-5(37.3)	0.3-32.8 80.4-135.8	0-0.3//32.8-37.3 66.9-80.4
x=39	0.36(8.9)	5.82E-4(66.9)	0.16E-3(38.6)	2.42E-7(38.6)	0.3-38.6 80.4-135.8	0-0.3//38.6-41.9 66.9-80.4
x=40	0.37(8.9)	5.98E-4(8.9)	13.25E-3(41.9)	1.95E-5(41.9)	0.3-38.6 80.4-135.8	0-0.3//38.6-41.9 66.9-80.4
x=41	0.38(80.4)	6.14E-4(8.9)	8.27E-3(41.9)	1.22E-5(41.9)	0.3-41.9 80.4-135.8	0-0.3//41.9-46.5 66.9-80.4
x=42	0.41(80.4)	6.30E-4(8.9)	14.75E-3(46.5)	2.15E-5(46.5)	0.3-41.9 80.4-135.8	0-0.3//41.9-46.5 66.9-80.4
x=43	0.43(80.4)	6.45E-4(8.9)	4.46E-3(47.8)	0.65E-5(47.8)	0.3-46.5 80.4-135.8	0-0.3//46.5-47.8 66.9-80.4
x=44	0.46(80.4)	6.61E-4(8.9)	12.60E-3(51.2)	1.82E-5(51.2)	0.3-47.8 80.4-135.8	0-0.3//47.8-51.2 66.9-80.4
x=45	0.49(80.4)	6.76E-4(80.4)	10.71E-3(51.2)	1.55E-5(51.2)	0.3-51.2 80.4-135.8	0-0.3//51.2-55.9 66.9-80.4
x=46	0.52(80.4)	7.14E-4(80.4)	6.10E-3(55.9)	0.87E-5(55.9)	0.3-51.2 80.4-135.8	0-0.3//51.2-55.9 66.9-80.4
x=47	0.54(80.4)	7.50E-4(80.4)	6.40E-3(57.3)	0.92E-5(57.3)	0.3-55.9 80.4-135.8	0-0.3//55.9-60.7 66.9-80.4
x=48	0.57(80.4)	7.87E-4(80.4)	2.95E-3(60.7)	0.42E-5(60.7)	0.3-60.7 80.4-135.8	0-0.3//60.7-65.5 66.9-80.4
x=49	0.60(80.4)	8.23E-4(80.4)	11.81E-3(65.5)	1.67E-5(65.5)	0.3-60.7 80.4-135.8	0-0.3//60.7-65.5 66.9-80.4
x=50	0.62(80.4)	8.60E-4(80.4)	1.66E-3(66.9)	0.23E-5(66.9)	0.3-135.8	0-0.3
x=54	0.72(80.4)	10.02E-4(80.4)	10.13E-2(66.9)	14.27E-5(66.9)	0.3-135.8	0-0.3
x=55	0.75(80.4)	10.37E-4(80.4)	10.40E-2(0)	17.72E-5(66.9)	0.3-135.8	0-0.3

Tableau (C-33) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) pour le MgO avec certains composants Magnésio-wüstite $x=56$ à 99.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=56	0.77(80.4)	10.71E-4(80.4)	9.90E-2(0)	19.07E-5(0)	0.3-135.8	0-0.3
x=82	1.37(80.4)	18.90E-4(80.4)	9.04E-5(0)	1.74E-7(0)	0.3-135.8	0-0.3
x=83	1.38(80.4)	19.19E-4(80.4)	2.64E-3(0)	0.51E-5(0)	0-135.8	/
x=99	1.70(80.4)	23.57E-4(80.4)	36.69E-3(0)	7.07E-5(0)	0-135.8	/

Tableau (C-34) présente l'écart et son taux entre les valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) du FeO, MgO et celles du modèle PREM.

	P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%)	N-V
FeO	0	4.49	Max	Très grand	Max
	0.6	0.61	/	15.67E-5	/
	0.6	0.02	/	4.73E-5	/
	7.1	0.20	/	45.42E-5	/
	7.1	7.66E-4	Min	0.17E-5	Min
	8.9	0.03	/	6.73E-5	/
	66.9	1.54	/	22.46E-4	/
	95.8	3.24	/	46.19E-4	/
	135.8	3.63	/	49.99E-4	/
MgO	0	5.12	Max	Très grand	Max
	28.3	0.343	/	55.02E-5	/
	51.2	0.342	/	52.02E-5	/
	127	0.32	Min	43.36E-5	Min
	135.8	0.38	/	52.76E-5	/

Tableau (C-35) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) pour le FeO, MgO et certains composants Magnésio-wüstite $x=1$ à 41 avec celles du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	4.49(0)	Très grand(0)	7.66E-4(7.1)	0.17E-5(7.1)	7.1-135.8	7.1-8.9
MgO	5.12(0)	Très grand(0)	0.32(127)	43.36E-5(127)	/	/
x=1	5.74(0)	Très grand(0)	1.04(28.3)	16.31E-4(28.3)	/	/
x=10	5.64(0)	Très grand(0)	0.82(28.3)	13.11E-4(28.3)	/	/
x=11	5.62(0)	Très grand(0)	0.79(28.3)	12.67E-4(95.8)	/	/
x=22	5.52(0)	Très grand(0)	54.97E-2(95.8)	07.93E-4(95.8)	/	/
x=23	5.51(0)	Très grand(0)	52.55E-2(80.4)	07.52E-4(95.8)	/	/
x=24	5.50(0)	Très grand(0)	49.31E-2(80.4)	07.12E-4(95.8)	/	/
x=25	5.49(0)	Très grand(0)	46.09E-2(80.4)	06.71E-4(80.4)	/	/
x=40	5.38(0)	Très grand(0)	01.07E-2(80.4)	0.16E-4(80.4)	/	/
x=41	5.37(0)	Très grand(0)	01.68E-2(85.5)	0.24E-4(85.5)	0-66.9 85.5-135.8	66.9-80.4//80.4-85.5

Tableau (C-36) présente l'écart max et min et le taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde transversale (V_s) de certains composants Magnésio-wüstite $x=42$ à 99 avec celles du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=42	5.36(0)	Très grand(0)	0.29E-2(86.9)	0.04E-4(86.9)	0-66.9 86.9-135.8	66.9-80.4//85.5-86.9
x=43	5.355(0)	Très grand(0)	0.32E-2(90.6)	0.05E-4(90.6)	0-66.9 95.8-135.8	66.9-80.4//90.6-95.8
x=44	5.350(0)	Très grand(0)	1.41E-2(95.8)	0.20E-4(95.8)	0-66.9 101.1-135.8	66.9-80.4//95.8-101.1
x=45	5.349(0)	Très grand(0)	0.90E-2(101.1)	0.13E-4(101.1)	0-66.9 101.1-135.8	66.9-80.4//95.8-101.1
x=46	5.343(0)	Très grand(0)	0.108E-2(106.4)	0.15E-4(106.4)	0-66.9 106.4-135.8	66.9-80.4//101.1-106.4
x=47	5.337(0)	Très grand(0)	0.55E-2(108)	0.08E-4(108)	0-66.9 111.9-135.8	66.9-80.4//101.1-106.4
x=48	5.331(0)	Très grand(0)	0.04E-2(124.1)	5.86E-7(124.1)	0-66.9 123-123 128.8-135.8	66.9-80.4//117.4-123 123-124.1//127-128.8
x=49	5.326(0)	Très grand(0)	0.58E-2(129.3)	0.079E-4(129.3)	0-66.9 133.4-135.8	66.9-80.4//129.3-133.4
x=50	5.320(0)	Très grand(0)	0.22E-2(133.4)	0.03E-4(133.4)	0-66.9 135.5-135.8	66.9-80.4//133.4-135.8
x=51	5.31(0)	Très grand(0)	0.89E-2(135.8)	0.13E-4(135.8)	0-66.9	66.9-80.4
x=52	5.309(0)	Très grand(0)	0.57E-2(28.3)	0.09E-4(28.3)	0-66.9	66.9-80.4
x=53	5.304(0)	Très grand(0)	0.30E-2(29.6)	0.04E-4(29.6)	0-23.8 29.6-66.9	23.8-28.3//28.3-29.6 66.9-80.4
x=54	5.298(0)	Très grand(0)	1.29E-2(32.8)	0.2E-4(32.8)	0-23.8 32.8-66.9	23.8-28.3//29.6-32.8 66.9-80.4
x=55	5.293(0)	Très grand(0)	0.38E-2(32.8)	0.06E-4(32.8)	0-23.8 37.3-66.9	23.8-28.3//32.8-37.3 66.9-80.4
x=56	5.288(0)	Très grand(0)	0.69E-2(37.3)	0.11E-4(37.3)	0-23.8 38.6-66.9	23.8-28.3//37.3-38.6 66.9-80.4
x=57	5.284(0)	Très grand(0)	0.42E-2(38.6)	0.06E-4(38.6)	0-23.8 41.9-66.9	23.8-28.3//38.6-41.9 66.9-80.4
x=58	5.279(0)	Très grand(0)	0.24E-2(41.9)	0.04E-4(41.9)	0-23.8 41.9-66.9	23.8-28.3//38.6-41.9 66.9-80.4
x=59	5.275(0)	Très grand(0)	0.91E-2(46.5)	0.14E-4(46.5)	0-23.8 46.5-66.9	23.8-28.3//41.9-46.5 66.9-80.4
x=60	5.270(0)	Très grand(0)	0.29E-2(51.2)	0.043E-4(51.2)	0-23.8 51.2-66.9	23.8-28.3//47.8-51.2 66.9-80.4
x=61	5.265(0)	Très grand(0)	1.35E-2(55.9)	0.20E-4(55.9)	0-23.8 55.9-66.9	23.8-28.3//51.2-55.9 66.9-80.4
x=62	5.261(0)	Très grand(0)	0.61E-2(57.3)	0.09E-4(57.3)	0-23.8 57.3-66.9	23.8-28.3//55.9-57.3 66.9-80.4
x=63	5.256(0)	Très grand(0)	0.28E-2(60.7)	0.04E-4(60.7)	0-23.8 60.7-66.9	23.8-28.3//57.3-60.7 66.9-80.4
x=64	5.253(0)	Très grand(0)	0.41E-2(65.5)	0.06E-4(65.5)	0-23.8 65.5-66.9	23.8-28.3//60.7-65.5 66.9-80.4
x=65	5.248(0)	Très grand(0)	0.12E-2(23.8)	0.02E-4(23.8)	0-23.8	23.8-28.3
x=66	5.244(0)	Très grand(0)	1.13E-2(23.8)	0.19E-4(23.8)	0-23.8	23.8-23.8
x=81	5.192(0)	Très grand(0)	18.62E-2(23.8)	3.13E-4(23.8)	0-23.8	23.8-23.8
x=82	5.190(0)	Très grand(0)	18.16E-2(22.6)	3.27E-4(22.6)	0-23.8	23.8-23.8
x=84	5.185(0)	Très grand(0)	16.09E-2(22.6)	2.90E-4(22.6)	0-23.8	23.8-23.8
x=85	5.182(0)	Très grand(0)	15.08E-2(23.8)	2.71E-4(23.8)	0-23.8	23.8-23.8
x=99	5.153(0)	Très grand(0)	1.08E-2(23.8)	0.19E-4(23.8)	0-23.8	23.8-23.8

C-3-3 Comparaison de la vitesse d'onde hydrodynamique:

Tableau (C-37) présente l'écart et son taux des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) entre le FeO et MgO à certaines pressions;

P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%/FeO)	N-V	TD(%/MgO)	N-V
0	3.14	/	59.00E-4	/	37.11E-4	/
4.8	3.01	Min	54.61E-4	/	35.32E-4	/
7.1	3.03	/	54.34E-4	Min	35.21E-4	Min
66.9	4.13	/	60.16E-4	/	37.56E-4	/
80.4	4.375	/	62.14E-4	Max	38.33E-4	Max
95.8	4.377	/	58.22E-4	/	36.96E-4	/
135.8	4.58	Max	55.78E-4	/	35.81E-4	/

Tableau (C-38) présente l'écart des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique en (Km/s) entre deux composants Magnésio-wüstite consécutifs à certaines pressions.

P(GPa)	Entre x=1 et x=2	Entre x=98 et x=99
0	2.30E-1	08.6E-3
90.6	45.5E-3	20.8E-3
101.1	46.3E-3	21.0E-3
128.8	46.91E-3	21.1E-3
133.4	46.9E-3	20.8E-3

Tableau (C-39) présente l'écart max et min et le taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) pour le FeO et certains composants Magnésio-wüstite.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	3.07(117.4)	41.88E-4(80.4)	1.38(0.3)	25.74E-5(0.3)	/	/
x=57	1.05(117.4)	14.23E-4(80.4)	0.43(0.3)	80.87E-5(0.3)	/	/
x=58	1.02(135.8)	13.85E-4(80.4)	0.42(0.3)	78.55E-5(0.3)	/	/
x=85	0.34(135.8)	44.50E-5(80.4)	0.12(0.3)	23.56E-5(0.3)	/	/
x=86	0.32(135.8)	41.39E-5(90.6)	0.11(0.3)	21.45E-5(0.3)	/	/
x=90	0.23(135.8)	29.18E-5(90.6)	0.08(0.3)	14.38E-5(0.3)	/	/
x=91	0.21(135.8)	26.18E-5(101.1)	0.07(0.3)	12.65E-5(0.3)	/	/
x=94	0.14(135.8)	17.42E-5(101.1)	0.04(0.3)	7.55E-5(0.3)	/	/
x=95	0.12(135.8)	14.70E-5(135.8)	0.03(0.3)	5.88E-5(0.3)	/	/
x=98	0.057(135.8)	6.99E-5(135.8)	0.005(0.3)	0.95E-5(0.3)	/	/
x=99	0.037(135.8)	4.45E-5(135.8)	2.47E-5(2.2)	4.56E-8(2.2)	0.3-0.6	0-0.3/0.6-2.2

Tableau (C-40) présente l'écart max et min et le taux max et min des valeurs de la vitesse de l'onde hydrodynamique (V_f) entre le MgO et certains composants Magnésio-wüstite.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
x=1	1.75(0)	20.69E-4(0)	1.40(28.3)	11.80E-4(127)	0-135.8	/
x=3	1.80(0)	21.23E-4(0)	1.47(28.3)	12.54E-4(128.8)	0-135.8	/
x=5	1.84(0)	27.74E-4(0)	1.53(28.3)	13.26E-4(129.3)	0-135.8	/
x=6	1.86(0)	22.00E-4(0)	1.56(23.8)	13.62E-4(129.3)	0-135.8	/
x=7	1.88(0)	22.25E-4(0)	1.59(23.8)	13.97E-4(135.8)	0-135.8	/
x=10	1.94(0)	22.99E-4(0)	1.67(21)	14.99E-4(135.8)	0-135.8	/
x=11	1.96(0)	23.23E-4(0)	1.70(9.9)	15.23E-4(135.8)	0-135.8	/
x=12	2.00(135.8)	23.46E-4(0)	1.72(9.9)	15.65E-4(135.8)	0-135.8	/
x=14	2.08(135.8)	24.16E-4(0)	1.76(9.9)	16.29E-4(135.8)	0-135.8	/
x=15	2.12(135.8)	2.41E-1(0)	1.79(8.9)	16.61E-4(135.8)	0-135.8	/
x=24	2.48(135.8)	26.10E-4(0)	1.98(8.9)	19.34E-4(135.8)	0-135.8	/
x=25	2.51(135.8)	26.31E-4(0)	1.99(7.1)	19.63E-4(135.8)	0-135.8	/
x=45	3.18(135.8)	29.98E-4(0)	2.34(7.1)	24.88E-4(135.8)	0-135.8	/
x=46	3.22(135.8)	30.14E-4(0)	2.36(5.5)	25.12E-4(135.8)	0-135.8	/
x=69	3.68(135.8)	33.53E-4(0)	2.68(5.5)	30.13E-4(135.8)	0-135.8	/
x=70	3.88(135.8)	33.66E-4(0)	2.69(4.8)	30.33E-4(135.8)	0-135.8	/
x=83	4.20(135.8)	35.26E-4(0)	2.82(4.8)	32.78E-4(135.8)	0-135.8	/
x=84	4.22(135.8)	35.89E-4(80.4)	2.85(4.8)	32.96E-4(135.8)	0-135.8	/
x=90	4.35(135.8)	36.55E-4(8.9)	3.91(4.8)	33.98E-4(135.8)	0-135.8	/
x=99	4.55(135.8)	38.21E-4(8.9)	3.00(4.8)	35.09E-4(135.8)	0-135.8	/

Tableau (C-41) présente l'écart et son taux entre les valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) pour le FeO et le modèle PREM.

	P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%)	N-V
	0	3.87	Max	2.67E-2	Max
	0.3	0.88	/	19.75E-4	/
	0.3	0.26	Min	5.07E-4	Min
	0.6	0.27	/	5.28E-4	/
	0.6	0.87	/	13.99E-4	/
	7.1	0.57	/	9.20E-4	/
FeO	7.1	1.11	/	16.62E-4	/
	9.9	1.12	/	16.51E-4	/
	47.8	2.56	/	28.31E-4	/
	80.4	2.84	/	28.74E-4	/
	90.6	2.81	/	27.78E-5	/
	95.8	2.73	/	26.78E-4	/
	135.8	2.65	/	17.83E-5	/

Tableau (C-42) présente l'écart max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) pour le MgO et ses valeurs dans le modèle PREM.

	P(GPa)	D(Km/s)	N-V	TD(%)	N-V
MgO	0	7.01	Max	4.83E-2	Max
	0.6	3.33	/	0.65E-2	/
	0.6	2.19	/	0.35E-2	/
	7.1	2.47	/	0.40E-2	/
	7.1	1.92	/	0.29E-2	/
	13.4	1.92	/	0.27E-2	/
	13.4	1.77	/	0.25E-2	/
	23.8	1.40	/	0.17E-2	/
	23.8	1.14	Min	13.76E-4	/
	46.5	1.24	/	13.69E-4	Min
	86.5	1.58	/	15.82E-4	/
	135.8	1.94	/	17.83E-2	/

Tableau (C-43) présente les écarts max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) entre le FeO, MgO et certains composants Magnésio-wüstite $x=1$ à 23 avec celles du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMin(%)	I-V-S	I-P-I
FeO	3.87(0)	2.67E-2(0)	0.26(0.3)	50.75E-5(0.3)	0.6-135.8	0.6-0.6
MgO	7.01(0)	4.83E-2(0)	1.14(23.8)	13.69E-4(46.5)	/	/
x=1	5.26(0)	3.63E-2(0)	0.85E-2(23.8)	1.07E-5(23.8)	21-60.7	19.9-21//60.7-65.5
x=2	5.24(0)	3.61E-2(0)	2.02E-2(19.9)	2.39E-5(19.9)	19.9-66.9	17.1-19.9//66.9-80.4
x=3	5.21(0)	3.60E-2(0)	1.99E-2(80.4)	2.01E-5(80.4)	19.9-66.9	17.1-19.9//66.9-80.4
x=4	5.19(0)	3.58E-2(0)	1.98E-2(86.9)	1.96E-5(86.9)	19.9-80.4	17.1-19.9//80.4-85.5
x=5	5.17(0)	3.57E-2(0)	0.86E-2(90.6)	0.85E-5(90.6)	19.9-86.9	17.1-19.9//86.9-90.6
x=6	5.15(0)	3.55E-2(0)	0.15E-2(17.1)	0.19E-5(17.1)	17.1-95.8	16-17.1//95.8-101.1
x=7	5.13(0)	3.54E-2(0)	0.11E-2(111.9)	0.11E-5(111.9)	17.1-108	16-17.1//108-111.9
x=8	5.11(0)	3.52E-2(0)	1.06E-2(127)	0.98E-5(127)	17.1-127	16-17.1//127-128.8
x=9	5.09(0)	3.50E-2(0)	0.31E-2(16)	0.42E-5(16)	17.1-129.3	16-17.1//129.3-133.4
x=10	5.07(0)	3.49E-2(0)	1.51E-2(133)	1.40E-5(133)	16-133.4	13.4-16//133.4-135.8
x=11	5.05(0)	3.48E-2(0)	2.38E-2(135.8)	2.19E-5(135.8)	16-135.8	13.4-16
x=12	5.03(0)	3.47E-2(0)	6.50E-2(13.4)	6.07E-5(135.8)	16-135.8	13.4-16
x=13	5.01(0)	3.45E-2(0)	4.11E-2(13.4)	5.75E-5(13.4)	16-135.8	13.4-16
x=14	4.99(0)	3.44E-2(0)	1.73E-2(13.4)	2.43E-5(13.4)	16-135.8	13.4-16
x=15	4.97(0)	3.43E-2(0)	0.61E-2(13.4)	0.86E-5(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=17	4.93(0)	3.40E-2(0)	5.22E-2(13.4)	7.32E-5(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=18	4.91(0)	3.39E-2(0)	5.94E-2(13.4)	8.48E-5(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=20	4.87(0)	3.36E-2(0)	14.67E-3(13.4)	2.09E-5(13.4)	13.4-135.8	13.4-13.4
x=21	4.85(0)	3.35E-2(0)	0.75E-3(13.4)	0.11E-5(13.4)	13.4-135.8	12.3-13.4
x=22	4.84(0)	3.34(0)	0.82E-3(8.9)	0.12E-5(8.9)	7.1-8.9 12.3-135.8	7.1-7.1//8.9-9.9 9.9-12.3
x=23	4.82(0)	3.32(0)	6.15E-3(9.9)	0.91E-5(9.9)	7.1-8.9 12.3-135.8	7.1-7.1//8.9-9.9 9.9-12.3

Tableau (C-44) présente les écarts max et min et les taux max et min des valeurs de la vitesse d'onde hydrodynamique (V_f) de certains composants Magnésio-wüstite ($x=24$ à 99) avec ceux du modèle PREM.

	DMax(Km/s)	TDMax (%)	DMin(Km/s)	TDMIN(%)	I-V-S	I-P-I
x=24	4.80(0)	3.31(0)	14.20E-3(9.9)	2.09E-5(9.9)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=25	4.78(0)	3.30(0)	34.34E-3(9.9)	5.06E-5(9.9)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=26	4.76(0)	3.29(0)	19.92E-3(0.6)	3.19E-5(0.6)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=27	4.75(0)	3.28(0)	2.86E-3(0.6)	0.46E-5(0.6)	7.1-135.8	7.1-7.1
x=28	4.73(0)	3.26(0)	14.01E-3(0.6)	2.24E-5(0.6)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6/0.6-2.2 7.1-7.1
x=30	4.70(0)	3.24(0)	4.72E-2(0.6)	0.75E-5(0.6)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6/0.6-2.2 7.1-7.1
x=31	4.68(0)	3.23(0)	4.38E-2(2.2)	0.70E-5(2.2)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6/0.6-2.2 7.1-7.1
x=33	4.65(0)	3.21(0)	1.06E-2(2.2)	0.17E-5(2.2)	0.6-0.6 7.1-135.8	0.6-0.6/0.6-2.2 7.1-7.1
x=34	4.64(0)	3.20(0)	0.58E-2(2.2)	0.09E-5(2.2)	0.6-2.2 7.1-135.8	0.6-0.6/2.2-2.5 7.1-7.1
x=35	4.62(0)	3.19(0)	0.62E-2(2.5)	0.10E-5(2.5)	0.6-2.5 7.1-135.8	0.6-0.6/2.5-4.8 7.1-7.1
x=39	4.56(0)	3.15(0)	6.97E-2(2.5)	11.21E-5(2.5)	0.6-2.5 7.1-135.8	0.6-0.6/2.5-4.8 7.1-7.1
x=40	4.55(0)	3.13(0)	6.44E-2(4.8)	10.42E-5(4.8)	0.6-2.5 7.1-135.8	0.6-0.6/2.5-4.8 7.1-7.1
x=44	4.49(0)	3.10(0)	0.16E-2(4.8)	0.26E-5(4.8)	0-2.5 4.8-7.1	0.6-0.6/2.5-4.8 7.1-7.1
x=45	4.47(0)	3.09(0)	1.37E-2(4.8)	0.22E-5(4.8)	0.6-4.8 7.1-135.8	0.6-0.6/4.8-5.5 7.1-7.1
x=46	4.46(0)	3.08(0)	2.89E-2(4.8)	2.62E-5(4.8)	0.6-4.8 7.1-135.8	0.6-0.6/4.8-5.5 7.1-7.1
x=47	4.45(0)	3.07(0)	0.10E-2(5.5)	0.16E-5(5.5)	0.6-4.8 7.1-135.8	0.6-0.6/4.8-5.5 7.1-7.1
x=48	4.43(0)	3.06(0)	1.41E-2(5.5)	2.29E-5(5.5)	0.6-5.5 7.1-135.8	0.6-0.6/5.5-7.1
x=50	4.41(0)	3.04(0)	4.38E-2(5.5)	7.11E-5(5.5)	0.6-5.5 7.1-135.8	0.6-0.6/5.5-7.1
x=51	4.39(0)	3.03(0)	3.07E-2(7.1)	5.00E-5(7.1)	0.6-5.5 7.1-135.8	0.6-0.6/5.5-7.1
x=53	4.37(0)	3.01(0)	0.11E-2(7.1)	0.18E-5(7.1)	0.6-5.5 7.1-135.8	0.6-0.6/5.5-7.1
x=54	4.35(0)	3.00(0)	1.35 E-2(7.1)	2.20E-5(7.1)	0.6-135.8	0.6-0.6
x=83	4.03(0)	2.78(0)	38.63E-2(7.1)	6.28E-5(7.1)	0.6-135.8	0.6-0.6
x=84	4.01(0)	2.77(0)	39.28E-2(0.3)	6.47E-5(7.1)	0.6-135.8	0.6-0.6
x=99	3.88(0)	2.66(0)	25.50E-2(0.3)	50.05E-5(0.3)	0.6-135.8	0.6-0.6



Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations

Salah Tlili, Layachi Louail, Abdellah Bouguera, Khelifa Haddadi & Youcef Medkour

To cite this article: Salah Tlili, Layachi Louail, Abdellah Bouguera, Khelifa Haddadi & Youcef Medkour (2017) Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations, Phase Transitions, 90:12, 1229-1240, DOI: [10.1080/01411594.2017.1337904](https://doi.org/10.1080/01411594.2017.1337904)

To link to this article: <https://doi.org/10.1080/01411594.2017.1337904>



Published online: 21 Jun 2017.



Submit your article to this journal [↗](#)



Article views: 28



View related articles [↗](#)



View Crossmark data [↗](#)

RESEARCH ARTICLE



Contribution to the study of structural and elastic properties of wüstite under pressure up to 140 GPa by pseudopotential calculations

Salah Tlili^a, Layachi Louail^b, Abdellah Bouguera^c, Khelifa Haddadi^b and Youcef Medkour^b

^aDepartment of Physics, Faculty of Mathematics and Matter Sciences, University of Ouargla, Ouargla, Algeria;

^bDepartment of Physics, Faculty of Sciences, University of Sétif 1, Sétif, Algeria; ^cDepartment of Science and Technology, Faculty of Science and Technology, University of Bordj Bou Arréridj, Bordj Bou Arréridj, Algeria

ABSTRACT

Using first-principles calculations based on the density functional theory and the generalized gradient approximations, we have studied the effect of high pressures up to 140 GPa on the structural and elastic properties of wüstite. Our results indicate that FeO undergoes a structural phase transition from NaCl-type (B1) to NiAs-type (B8) almost at the pressure of 77 GPa. The density increases across this transition by about 5%, which is a higher value than that obtained in other researches. We can clearly present the wüstite elastic properties and isotropic wave velocities which are not already studied in this range of pressure, and we could compare these results with the available experiment data, especially with that of PREM model.

ARTICLE HISTORY

Received 4 February 2017

Accepted 22 May 2017

KEYWORDS

Transition phase; elastic properties; wüstite; pseudopotential calculations

1. Introduction

The interest in studying the iron oxide or wüstite (FeO) has grown because this kind of oxide in seismology is an important end-member of magnesiowüstite ($\text{Mg}_x\text{Fe}_{(1-x)}\text{O}$) in the earth's lower mantle [1] and possibly also a significant alloying component of the core [2].

Several experimental and theoretical works have extensively studied the structural properties, phase transition and geophysical implications of these compounds. These studies often show that there are four possible crystal structures of wüstite: monoclinic C2/m phase, both at high pressures [3] and at 1 bar and low temperatures [4], and this phase does not exist in the earth's thermodynamic conditions; under ambient conditions, wüstite is stable in the B1 phase (NaCl-type), and three phase transitions are produced by the leftover phases; all transitions are finished to the B8 (NiAs-type) phase at high pressures, and there is one transition with room temperature compression in which FeO undergoes a phase transition to the rhombohedral or R-3 phase. This crystal structure, i.e. the rhombohedral is not appearing at high temperatures and high pressures, where phase transition is directly changed from the B1 phase to the B8 phase [5–14]. Most of these studies did not explore clearly its elastic properties, notably their variation versus pressure at least up to the external core of the earth. However, only Brown and Shankland's experimental study was carried out on the FeO density and isotropic velocities waves [15] where we use their results for comparison.

In our study, we performed calculations using the density functional pseudopotential method to obtain precise information over FeO, exactly over its structural and elastic properties, and their

comparison with its values in the experiment of a few studies and PREM model in the pressure range of 0–140 GPa at 0 K. To conclude, we summarize the most important results of our work in Section 4.

2. Calculation method

In this work, we have used the Cambridge Total Energy Package (CASTEP) code [16,17], in which the density functional theory and Kohn–Sham theorem are used to solve the Schrödinger equation [18,19], and then to find the energy eigenvalue of the system. In order to reduce the number of variables, the pseudopotential approach and the plane wave function were introduced [20]. The Monkhorst–Pack scheme was used to sample the irreducible Brillouin zone [21]. The exchange–correlation energy was treated within the GGA-PW91 approximation [22]. For this study, we have used an energy cut-off equal to 450 eV, and the Brillouin zone sampling was $8 \times 8 \times 8$; these values ensure a good calculation convergence with respect to reliable results.

3. Results

3.1. The phase transition

The structural phase stability is determined by the calculation of Gibbs free energy (G) for the possible phases, which is given by $G = E_{\text{tot}} + PV + ST$. Knowing that the theoretical calculations are performed at $T = 0$ K, then, Gibbs free energy becomes equal to the enthalpy, $H = E_{\text{tot}} + PV$.

For ambient conditions, this oxide crystallizes in the rock-salt crystal structure, with space group Fm3m (#225), which may result in other conditions: the metastable R phase with space group R-3 (#148) or B8 phase with space group P63/mmc (#194). We have calculated the enthalpy of the three involved phases obtained from 0 to 140 GPa and the one which has the lowest energy is chosen as the most stable. The transition structure from one instable structure to the next is obtained at the intersection between the corresponding enthalpy curves. We can use another method that consists of calculating the difference in the enthalpy and considering one of them as a reference; if the difference is positive, the reference phase is the stable phase, and vice versa. These differences in functioning by the pressure of the FeO structural phases which are calculated by the GGA approach are shown in Figure 1. The difference in enthalpy between B1 and R phases is nearly equal at three values: 0, 30 and 100 GPa (two parallel curves), and hence the rhombohedral phase in this case is unstable. The difference in enthalpy between B8 and B1 decreases when the pressure increases until it becomes zero for the pressure around 77 GPa, which is the transition pressure of wüstite. Beyond 77 GPa, the hexagonal phase B8 (NiAs) becomes stable.

This phase transition and our calculated transition pressure being presented here are consistent with the predicted values (70 GPa) of Jeanloz and Ahrens [8] using the earlier shock compression studies and Knittle et al. [23], Knittle and Jeanloz [9], and Yagi et al. [13] using the electrical resistance measurements. All these studies are consistent with the suggestion of Fei and Mao [7]. However, Murakami et al. [11] and Sata et al. [24] recently reported the transition from B1 to normal B8 structure at 87 and 130 GPa, respectively, by the laser-heated DAC experiments. But all these studies were at high temperatures (>1000 K). We think that all these deviations are due to the difference between our theoretical method and those experimental conditions.

3.2. Structural properties

We calculated the variation of relative volume V/V_0 with pressure for B1 and B8 phases, where V_0 is the conventional volume at 0 GPa. The relation between the V/V_0 and the pressure could be illustrated by the relation between crystal volume and applied pressure which is shown in Figure 2.

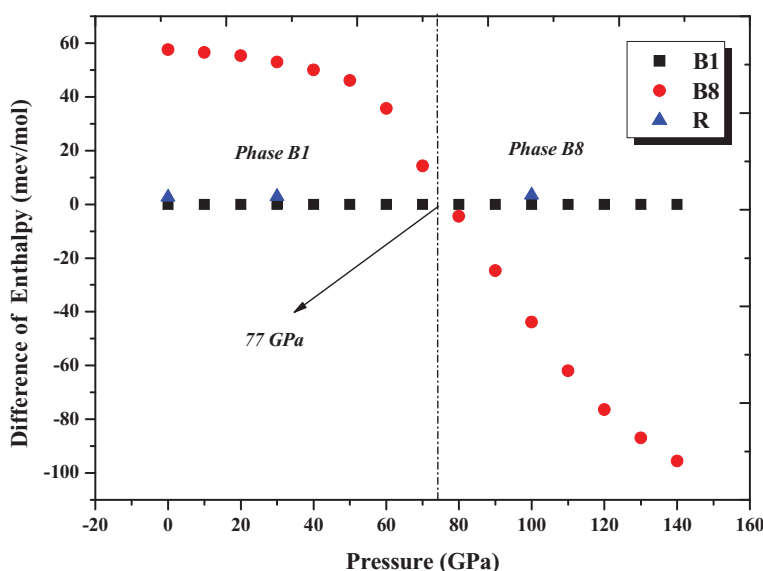


Figure 1. The difference in the enthalpy as a function of the hydrostatic pressure for FeO using the enthalpy of B1 phase as a reference.

For B1 phase, this volume changes by 22 over the pressure range 0–70 GPa. Wherever, at 0 GPa, the volume of unit cell of wüstite is $71.53 \text{ \AA}^3$, and it becomes $56.14 \text{ \AA}^3$ at 70 GPa. In B8 phase, volume change is smaller, $18 \text{ \AA}^3$. At 80 GPa of pressure, this volume is $26.74 \text{ \AA}^3$ and the final volume being $15.97 \text{ \AA}^3$ at 140 GPa pressure.

Our calculations show that in both phases B1 and B8, FeO density increases linearly with the pressure slope around 26 and 18, respectively. In other words, the density increases across B1–B8 transition by about 5%, whereas Jeanloz and Ahrens [8] and Murakami et al. [11] calculated it to be 4% and 2%, respectively, for the shock-induced transition.

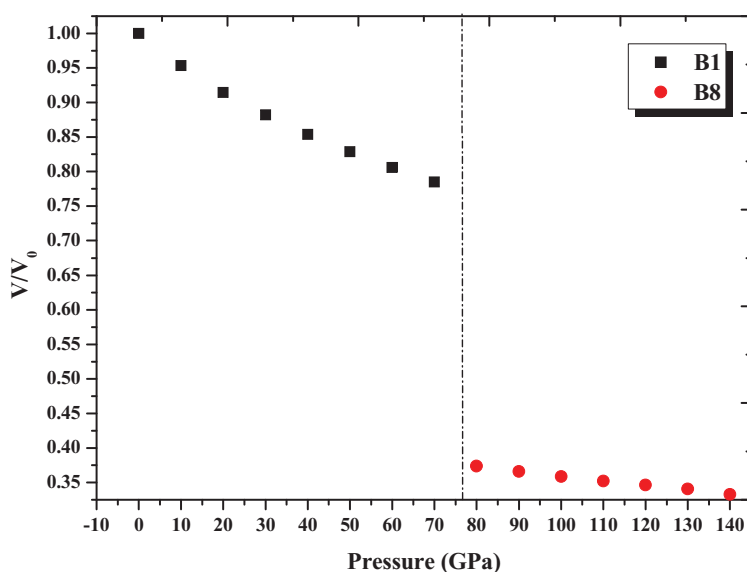


Figure 2. Relative volume as a function of the hydrostatic pressure in both B1 and B2 phases of FeO.

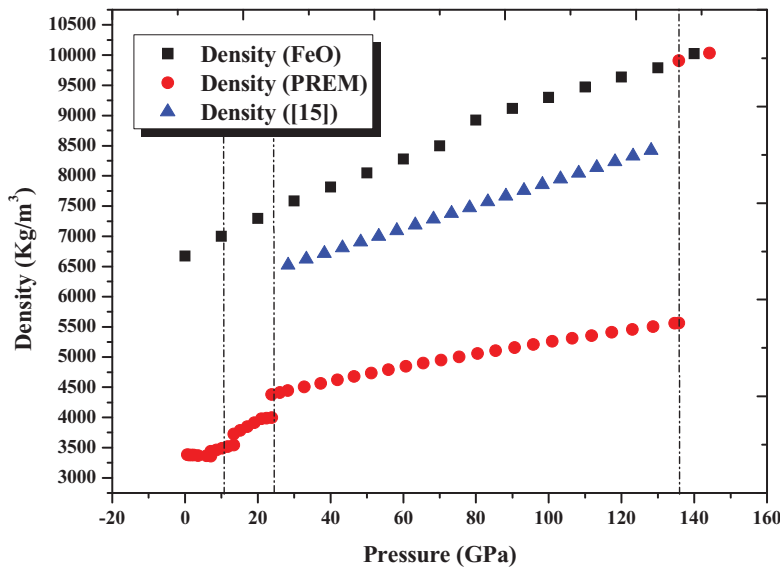


Figure 3. The density as a function of the pressure in both B1 and B2 phases of FeO, PREM model and Brown and Shankland study.

The difference between the density of B1 and B8 phases with respect to our results and those reported in the work of Brown and Shankland for wüstite, and the ones obtained by the PREM model are shown in Figure 3.

We compared our results with the experimental work of Brown and Shankland [15]. Two comments were extracted:

- (1) The transition phase does not appear in the study of Brown and Shankland.
- (2) The density in our calculations is relatively higher than that of Brown and Shankland results. Note that the wüstite studied by Brown and Shankland was not pure (a sample of magnesiowüstite) [15].

At less than 140 GPa pressure, the values of FeO density, according to our calculations, are far higher than of the earth material which are given by the PREM model by Dziewonski and Anderson [25]. But around this pressure, the two densities are nearly equal and they almost have the value of 10.03 g/cm³. This is explained by the fact that, at this value of pressure, we are in the outer core where the most important component is iron [26]. Between 20 GPa and the last pressure, we note that pressure derivative of the density is relatively higher in both B1 and B8 phases compared to that in the PREM model (see Table 2). Between 7.1 and 23.8 GPa, the density of the PREM model is

Table 1. The calculated pressure derivatives of the elastic constants for FeO, and the search for their existence in that range in the lower mantle given in Karki et al. [26].

Elastic constants	Phase	$\partial C_{ij}/\partial P$ of FeO in our work	$\partial C_{ij}/\partial P$ range in lower mantle	Existence
C_{11}	B1	6.988	[5, 10]	Yes
	B8	3.5618		No
C_{33}	B8	6.3294	[5, 10]	Yes
C_{12}	B1	0.9814	[0.5, 4]	Yes
	B8	4.7614		No
C_{13}	B8	3.5602	[0.5, 4]	Yes

Table 2. The calculated pressure derivatives of the density and elastic modulus for FeO, compared with those of PREM model in lower mantle given at Dziewonski and Anderson [25].

	Phase	Pressure interval for FeO (GPa)	Pressure derivatives of FeO	Pressure interval for PREM (GPa)	Pressure derivatives of PREM
Density	ρ (kg/m ³)	B1 20–70	24.1	23.8–135.8	10.6
		B8 80–130	17.35	23.8–135.8	10.6
Elastic modulus	B (GPa)	B1 20–70	2.98	23.8–135.8	3.18
		B8 80–130	4.11	23.8–135.8	3.18
	G (GPa)	B1 20–70	1.31	23.8–135.8	1.24
		B8 80–130	0.26	23.8–135.8	1.24

generally increasing faster than the increase in the density of this oxide, but before the final pressure the two densities are equal.

The density ρ is given by

$$\rho = \frac{Z \left(\sum A_c + \sum A_a \right)}{N_A V_C}, \quad (1)$$

where $\sum A_c$, $\sum A_a$ are the sum of the atomic weights of all cations and anions in formula unit, respectively. Z is the number of formula units within the unit cell, V_c is the unit cell volume, N_A is the Avogadro's number 6.023×10^{23} atoms/mol.

3.3. Elastic properties

The elastic constants of solids provide a link between the mechanical and dynamical behaviour of crystals, and give important information concerning the nature of the forces operating in solids. In particular, they provide information on the stability and stiffness of materials.

The calculated values of several elastic constants of the stiffness matrix in both B1 and B2 phases are shown as a function of pressure in Figure 4.

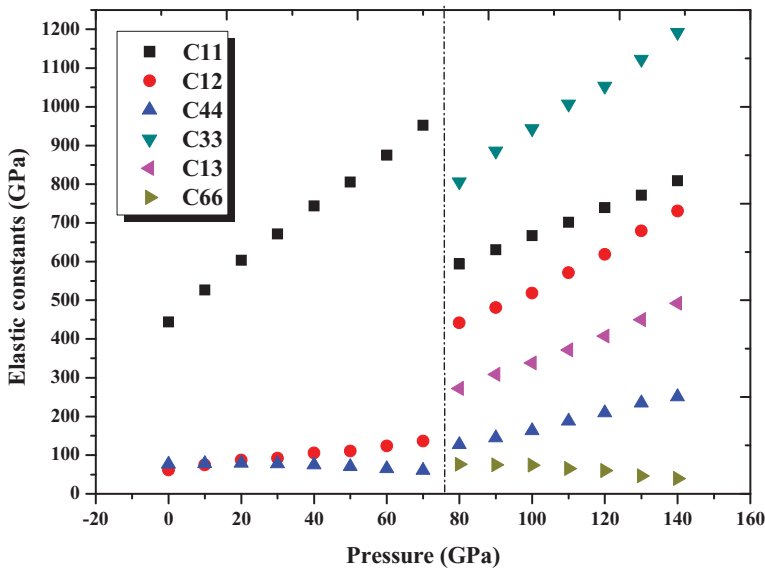


Figure 4. The elastic stiffness coefficients as functions of the pressure in both B1 and B2 phases of FeO.

For the cubic structure, there are three independent coefficients: C_{11} , C_{12} , and C_{44} . The elastic constant C_{11} represents elasticity in length. A longitudinal strain produces a change in C_{11} . The elastic constants C_{12} and C_{44} are related to the elasticity in shape, which is a shear constant. A transverse strain causes a change in shape without a change in volume. Therefore, C_{12} and C_{44} are less sensitive to pressure as compared with C_{11} . We see a quasi-linear increase of C_{11} and C_{12} as a function of the pressure. However, C_{44} in this phase increases linearly till 20 GPa, but up this pressure C_{44} decreases linearly. At all pressures in this phase, the three axes [100], [010] and [001] are the least compressible because $C_{11} > C_{44}$ and $C_{11} > C_{12}$. This deformation along these axes is easy in the B1 phase. Above 20 GPa, C_{44} becomes smaller than C_{12} since $C_{11} > C_{12} > C_{44}$, indicating that the shear along the (100) plane is the easiest.

For the hexagonal crystal, there are three other coefficients to add (C_{13} , C_{33} and C_{66}), but only five of them are independent since $C_{66} = 1/2(C_{11} - C_{12})$. Note, in this phase, all elastic constants vary monotonically with increasing pressure. C_{11} , C_{12} , C_{33} , C_{13} and C_{44} increase, but C_{66} decreases. Also, the elastic constant C_{33} represents elasticity in length. C_{33} is higher than C_{11} , which means that the resistance to the applied stress is high in the [001] direction than in the [100] direction and it signifies that the atomic bonds along the {001} planes between the nearest neighbours are stronger than those along the {100} planes. This is in agreement with the above result that FeO is more compressible along the a -axis than along the c -axis. On the other side, it can be observed that the unidirectional elastic constant C_{11} values for FeO are higher than C_{44} values, so this compound presents a relatively weaker resistance to the pure shear deformations.

For the stability of lattice, the Born's stability criteria should be satisfied. The known conditions for mechanical stability of cubic crystals are: $C_{11} > 0$, $C_{11} > C_{12}$, $C_{44} > 0$, $C_{11} + 2C_{12} > 0$ and $C_{11} < B < C_{12}$ [27]. For hexagonal phase, the mechanical stability criteria are given by $C_{11} > C_{12}$, $C_{44} > 0$ and $(C_{11} + C_{12}) C_{33} > 2C_{13}^2$ [28]. Our results for elastic constants satisfy these traditional mechanical stability conditions for all considered phases of B1 and B8.

Our given results of C_{11} , C_{12} in the cubic phase and those of C_{33} , C_{13} in the hexagonal phase for the studied oxide in the pressure range of the lower mantle have been the pressure derivatives located in the intervals determined by Karki et al. [26], these results were reported in Table 1. Unfortunately, our pressure derivatives of C_{12} and C_{44} for B1 phase calculated at low pressure are somehow far from those obtained from the experimental methods reported by Jackson et al. [28] ($\partial C_{44}/\partial P = -1.03$, $\partial C_{12}/\partial P = 2.77$). Moreover, our results of C_{12} and C_{44} are compared with the work of Jackson et al. ($C_{12} = 123$ GPa and $C_{44} = 45$ GPa); it is easy to observe that they are more different, because this work [28] uses the same wüstite nonstoichiometric formula of Fe_{1-x}O where x is a variable up to 0.12 [5].

The elastic properties of material are described by two other elastic stiffness coefficients that characterize the material: the bulk modulus B as the resistance to fracture and the shear modulus G as the resistance to plastic deformation. The relation of pressure to these elastic stiffness coefficients has been plotted in Figure 5.

In our case, the B values were given by CASTEP calculation and it can be defined by the following equation:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}. \quad (2)$$

The shear modulus is obtained using the elastic constant C_{ij} from the Hashin–Shtrikman averaging scheme [29]:

$$G_{HS} = \left(\frac{G_{HS-} + G_{HS+}}{2} \right). \quad (3)$$

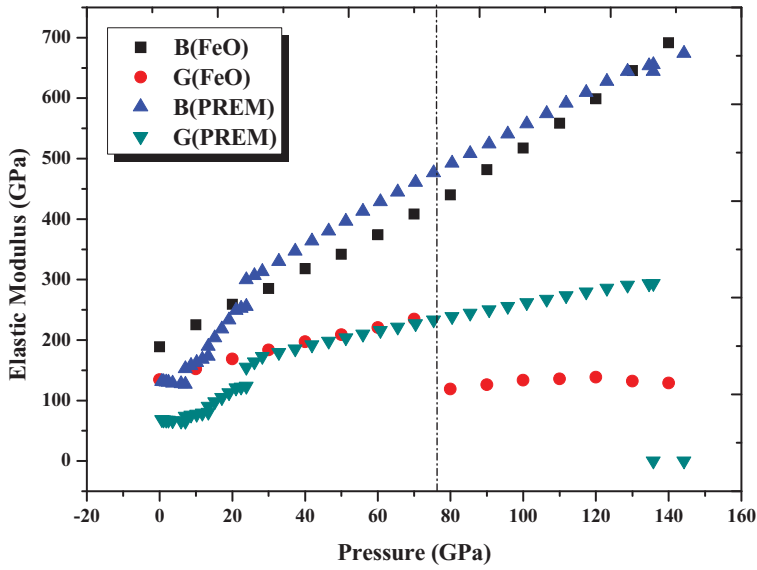


Figure 5. The bulk and the shear modulus as functions of the pressure in both B1 and B2 phases of FeO.

For cubic symmetry [29], the upper and lower bounds, are, respectively

$$G_{HS+} = C_{44} + 2 \left(\frac{5}{C_s - C_{44}} + \frac{18(B + 2C_{44})}{5C_{44}(3B + 4C_{44})} \right)$$

and

$$G_{HS-} = C_s + 3 \left(\frac{5}{C_{44} - C_s} + \frac{12(B + 2C_s)}{5C_s(3B + 4C_s)} \right)$$

where

$$C_s = \left(\frac{C_{11} - C_{12}}{2} \right).$$

For hexagonal symmetry [30],

$$G_{HS\pm} = G_{\pm} + \frac{B^{\pm}}{1 + 2\beta_{\pm} B^{\pm}}$$

with $G_+ = C_{66}$, $G_- = C_{44}$ for

$$B^{\pm} = \frac{1}{5} \left[\frac{G_{eff}^r - G_{\pm}}{D_{\pm}} + \frac{2(C_{44} - G_{\pm})}{1 - 2\beta_{\pm}(C_{44} - G_{\pm})} + \frac{2(C_{66} - G_{\pm})}{1 - 2\beta_{\pm}(C_{66} - G_{\pm})} \right]$$

when

$$D_{\pm} = 1 - 2\beta_{\pm} \left(G_{eff}^r - G_{\pm} \right) - 2\alpha_{\pm} (B_v - B_{\pm})$$

and

$$\alpha_{\pm} = \left[- \left(B_{\pm} + \frac{4G_{\pm}}{3} \right)^{-1} \right], \quad \beta_{\pm} = \frac{2\alpha_{\pm}}{15} - \frac{1}{5G_{\pm}}$$

with

$$B_{\pm} = B_v \frac{G_{eff}^r - G_{\pm}}{G_{eff}^v - G_{\pm}}$$

where

$$\begin{aligned} B_v &= \frac{1}{9} [2(C_{11} + C_{12}) + 4C_{13} + C_{33}] \\ G_{eff}^v &= \frac{1}{3} (C_{11} + C_{33} - 2C_{13} - C_{66}) \\ G_{eff}^r &= 3 \frac{(C_{11} - C_{66} - C_{13})(C_{33} - C_{13}) + C_{33}(C_{11} - C_{66} + C_{33} - 2C_{13})}{2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} - 4C_{13}} \end{aligned}$$

We note that at the pressure of 0–140 GPa, the bulk modulus increases linearly in a continuous curve. The phase transition of wüstite for the shear modulus is very clear like the elastic constants of this material. In the B1 phase, the shear modulus increases linearly and relatively slowly than the first modulus. In the contrary, the B8 phase has a shear modulus less sensitive to pressure. Above 120 GPa this modulus decreases, but under this pressure G increases.

For the B1 phase, at zero pressure, our bulk calculated values are overestimated compared to those of Jackson et al. [28] (153 GPa). Nevertheless, at this pressure, our bulk values are in good agreement with the previous experiment of Jeanloz and Sato-Sorensen [31] (180 GPa). We think that, the difference between this experiment and our calculation method is due to the experimental method which used the same nonstoichiometric wüstite compound [5].

The bulk and shear modulus of the B1 phase are higher than those in the PREM model under pressure at the beginning of the lower mantle (23.8 GPa), and the speed of change is going to be just as we saw in the case of density. Above this pressure, the presented values of shear modulus are in an excellent agreement with the previous model, but the values and the linear pressure dependency of bulk modulus in this pressure range are slightly lower than that of the PREM. The calculated linear pressure of B and G are summarized in Table 2. In this table, we can see that for the B8 phase, the linear pressure of bulk modulus varies substantially under pressure when compared with the variations of this modulus in the PREM model. But up to 120 GPa, our bulk is lower, and at 130 GPa, the two bulks are nearly equal. However, the values of G calculated are lower and disagree with those of the PREM model as it can be seen in Table 2.

3.4. Isotropic wave velocities

The study of the elastic isotropy dependence on pressure is important to understand the seismological mechanisms. The solution of the Christoffel's equation [25,32] gives the elastic wave velocities: the compressional or longitudinal V_p , shear or transversal V_s and bulk sound V_B are given by the following relations:

$$V_p = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}} \quad (4)$$

$$V_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (5)$$

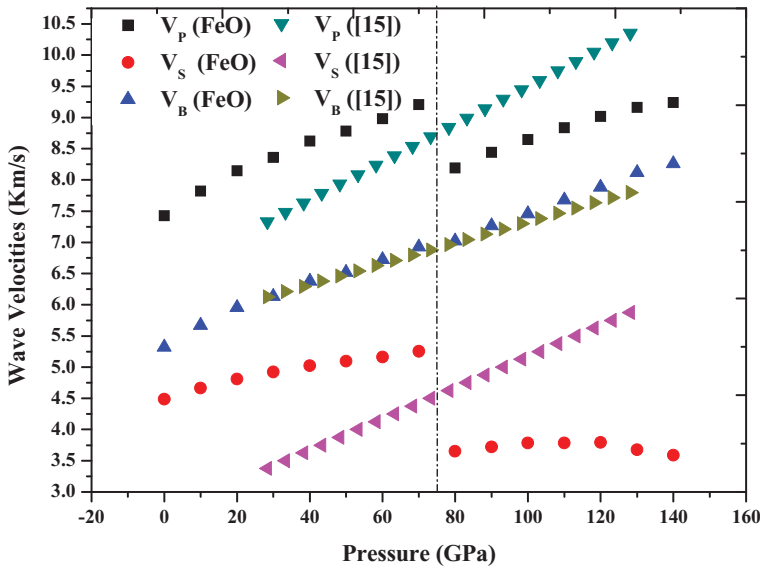


Figure 6. The V_p , V_s and V_b velocities as functions of the pressure in both B1 and B2 phases of FeO and Brown and Shankland study.

and

$$V_B = \sqrt{\frac{3}{4} V_p^2 - V_s^2} = \sqrt{\frac{B}{\rho}}, \quad (6)$$

where ρ is the density of the crystal, B is the bulk modulus and G is the shear modulus.

Figures 6 and 7 show the variation of the relative changes of velocities (V_p , V_s and V_b) of our FeO, experimental values obtained by Dziewonski and Anderson [25] using the PREM data and by Brown and Shankland [15] versus applied hydrostatic pressure are also included for comparison.

All velocities in the B1 phase and V_p , V_b in the B8 phase increase approximately linearly with pressure. But the transverse elastic wave velocity in the B8 phase changes like the variation of shear modulus G . Only V_b has a continuous curve where the phase transition is not clear than the other velocities. Moreover, in cubic structure, the variation of V_p is quick and the variation of V_s is slow; in the other structure, V_b has been changed faster than V_p . We can see the summary of those results in Table 2.

Figure 6 shows a very good agreement between our bulk sound velocity V_b and that of Brown and Shankland [15], where it could be of a slower variation for our study in the hexagonal phase and similar in the cubic phase, the phase transition does not appear in the study of Brown and Shankland for all wave velocities. Wave velocities V_p and V_s values in our calculations are relatively high to those of Brown and Shankland for B1 and less in the phase B8, but these velocities in our study change slower change in both phases. Note that the wüstite studied by Brown and Shankland was included in a sample of magnesio-wüstite.

Figure 7 shows that the velocity values in the PREM model are always higher than those of FeO, except for shear wave velocity where the values are almost identical. Only in rock-salt structure in the range of 0–10 GPa which represents the crust and the beginning of the upper mantle, the velocities in earth material are decreasing by contrary to their changes for wüstite. But in the final part of the upper mantle reaching the pressure of 23.8 GPa, the change in velocities in the PREM model is higher than its change in this oxide, while in the entire lower mantle this change is going to be very compatible with being faster in this model especially in the hexagonal phase. However, above

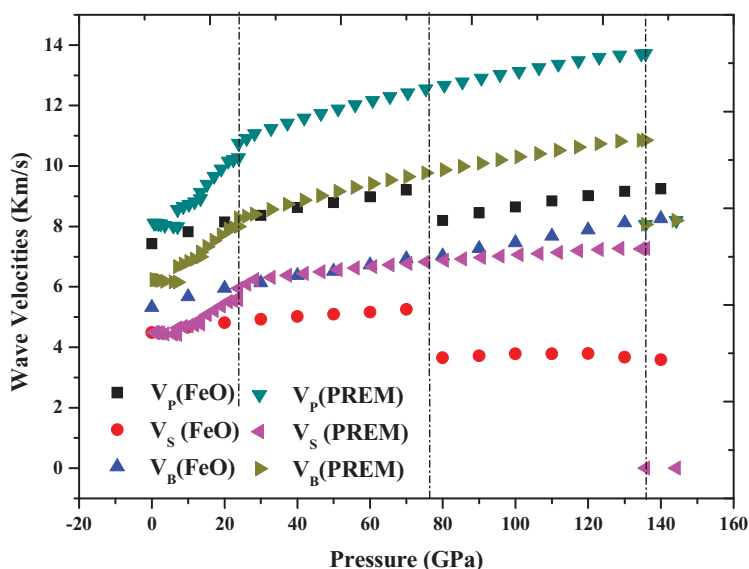


Figure 7. The V_p , V_s and V_b velocities as functions of the pressure in B1 and B2 phases of FeO and PREM model.

135.8 GPa, i.e. to the limits of the beginning of external core, it seems that the velocity values in the model are independent from pressure and the values are always less, and they are identical to the bulk sound wave velocity. Finally, as a note, the longitudinal and bulk sound wave velocity values of our oxide almost correspond to those of the bulk sound and shear wave velocities of the PREM model, respectively.

4. Conclusion

In conclusion, we calculated the structural and elastic properties of FeO at high hydrostatic pressure by using the first-principle calculations at zero temperature with pseudopotential method within GGA for the exchange-correlation energy (X_C). We intend, by presenting our results, to provide a reference data for future investigations. The most important summaries of this study are as follows:

- By changing the pressure, we notice that at 77 GPa, this oxide changes from cubic phase NaCl (B1) to hexagonal phase NiAs (B8) with a density increase of about 5%.
- Only the study of the density, the bulk modulus and bulk sound wave velocity show continuous curves, which means that there is an absence of the occurrence of the phase transition.
- We have found a linear dependence in the increase of either the density, most elastic constants and modulus or wave velocities of FeO with increasing pressure. But C_{44} in the B1 phase, C_{66} , shear modulus and transversal wave velocity in the B8 phase do not correlate with the previous tendency.
- Our results which are special for elastic constants reveal that the changes of C_{11} and C_{12} in the first phase and each of the C_{33} and C_{13} in the second phase are within the ranges being set by previous studies of pure poles contained in the lower mantle.
- We attempted to compare between the studied properties values in our results with experimental data, although they are few, which tackled with this oxide. They are data resulted from studies adapting different conditions from those used in our calculations like the addition of the change in temperature. We found much agreement in some cases, and little in others. Among these studies are those which were interested in very determined values of pressure. The only treatment for the change in the density and the wave velocities for this oxide

according to the change in pressure was in the lower mantle, was in the study of Brawn and Shankland of the sample of wüstite extracted from magnesiowüstite.

- We were able to compare the density, the elastic modulus and the three wave velocities of iron oxide according to our results with those of the earth material contained in the PREM model. This comparison has shown the existence of either an agreement in the change in these parameters or conformity of their values in the two materials. This could only happen in determined zones of the earth layers like the lower mantle or at given depths.

Disclosure statement

No potential conflict of interest was reported by the authors.

References

- [1] McDonough W. Compositional model for the earth's core. *Treat Geochem.* **2003**;2:568.
- [2] Frost DJ, McCammon CA. The redox state of earth's mantle. *Annu Rev Earth Planet Sci.* **2008**;36:389–420.
- [3] Kantor I, Kurnosov A, McCammon C, et al. Monoclinic FeO at high pressures. *Zeitschrift Kristallogr Cryst Mater.* **2008**;223:461–464.
- [4] Fjellvåg H, Hauback BC, Vogt T, et al. Monoclinic nearly stoichiometric wüstite at low temperatures. *Am Miner.* **2002**;87:347–349.
- [5] Mao H-k, Shu J, Fei Y, et al. The wüstite enigma. *Phys Earth Planet Interior.* **1996**;96:135–145.
- [6] Fei Y. Crystal chemistry of FeO at high pressure and temperature. *Miner Spectrosc.* **1996**;5:243–254.
- [7] Fei Y, Mao H-k. In situ determination of the NiAs phase of FeO at high pressure and temperature. *Science.* **1994**;266:1678.
- [8] Jeanloz R, Ahrens TJ. Equations of state of FeO and CaO. *Geophys J Int.* **1980**;62:505–528.
- [9] Knittle E, Jeanloz R. The high–pressure phase diagram of FeO. 94O: a possible constituent of the earth's core. *J Geophys Res Solid Earth.* **1991**;96:16169–16180.
- [10] Kondo T, Ohtani E, Hirao N, et al. Phase transitions of (Mg, Fe) O at megabar pressures. *Phys Earth Planet Inter.* **2004**;143:201–213.
- [11] Murakami M, Hirose K, Ono S, et al. High pressure and high temperature phase transitions of FeO. *Phys Earth Planet Inter.* **2004**;146:273–282.
- [12] Ozawa H, Hirose K, Tatenos S, et al. Phase transition boundary between B1 and B8 structures of FeO up to 210 GPa. *Phys Earth Planet Inter.* **2010**;179:157–163.
- [13] Yagi T, Fukuoka K, Takei H, et al. Shock compression of wüstite. *Geophys Res Lett.* **1988**;15:816–819.
- [14] Fischer RA, Campbell AJ, Shofner GA, et al. Equation of state and phase diagram of FeO. *Earth Planet Sci Lett.* **2011**;304:496–502.
- [15] Brown J, Shankland T. Thermodynamic parameters in the earth as determined from seismic profiles. *Geophys J Int.* **1981**;66:579–596.
- [16] Segall M, Lindan PJ, Probert Ma, et al. First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. *J Phys Condens Matter.* **2002**;14:2717.
- [17] Clark SJ, Segall MD, Pickard CJ, et al. First principles methods using CASTEP. *Zeitschrift Kristallogr Cryst Mater.* **2005**;220:567–570.
- [18] Kohanoff J. *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods.* Cambridge University Press; **2006**.
- [19] Kohn W, Sham LJ. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys Rev.* **1965**;140: A1133.
- [20] Payne MC, Teter MP, Allan DC, et al. Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients. *Rev Mod Phys.* **1992**;64:1045.
- [21] Monkhorst HJ, Pack JD. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys Rev B.* **1976**;13:5188.
- [22] Perdew JP, Chevary JA, Vosko SH, et al. Atoms, molecules, solids, and surfaces: applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Phys Rev B.* **1992**;46:6671.
- [23] Knittle E, Jeanloz R, Mitchell A, et al. Metallization of FeO. 94O at elevated pressures and temperatures observed by shock-wave electrical resistivity measurements. *Solid State Commun.* **1986**;59:513–515.
- [24] Sata N, Shen G, Rivers M, et al., AGU Spring Meeting Abstract, 1:3 High pressure and high temperature phase of FeO. **2002**.
- [25] Dziewonski AM, Anderson DL. Preliminary reference earth model. *Phys Earth Planet Inter.* **1981**;25:297–356.
- [26] Karki BB, Stixrude L, Wentzcovitch RM. High–pressure elastic properties of major materials of earth's mantle from first principles. *Rev Geophys.* **2001**;39:507–534.

- [27] Mehl M, Barry B, Papaconstantopoulos DA. In: Westbrook JH, Fleischer RL, editors. Intermetallic compounds: principle and practice. Vol. I, Principles. London: Wiley; 1995.
- [28] Jackson I, Khanna S, Revcolevschi A, et al. Elasticity, shear–mode softening and high–pressure polymorphism of wüstite (Fe_{1-x}O). *J Geophys Res Solid Earth*. 1990;95:21671–21685.
- [29] Louail L, Krachni O, Bouguerra A, et al. Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO. *Mater Lett*. 2006;60:3153–3155.
- [30] Berryman JG. Bounds and self-consistent estimates for elastic constants of random polycrystals with hexagonal, trigonal, and tetragonal symmetries. *J Mech Phys Solids*. 2005;53:2141–2173.
- [31] Jeanloz R, Sato-Sorensen Y. Hydrostatic compression of Fe_{1-x}O Wüstite. *J Geophys Res Solid Earth*. 1986;91:4665–4672.
- [32] Screiber E, Anderson O, Soga N. Elastic constants and their measurements. New York (NY): McGrawHill; 1973.

ملخص:

يُعتبر أكسيدي الحديد و المنغنيز و مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ من المكونات الهامة في الطبقات الداخلية الارضية على الأقل حتى حدود النواة الخارجية حدود دراستنا، و التي اعتمدت على دراسة لنا سابقة تناولت أكسيد الحديد و دراسة أخرى لـ Karki و زملاءه حول أكسيد المنغنيزيوم. أين تم تحديد الخصائص البنيوية، الميكانيكية و الزلزالية عن طريق المحاكاة الحسابية.

للمقارنة بين الأكسيدين و بسبب عدم تطابق العديد من قيم الضغطين دراستهما استخدمت الطريقة غير المباشرة، التي تبين وضع قيم الخصائص، نوع و سرعة التغير باستعمال ميولها بين كل قيمتين متتاليتين للضغط. تقدم هذه الطريقة نتائج مهمة؛ فهي تظهر حساسية التحول الطوري في معظم خصائص FeO ماعدا من اجل الكثافة، معامل الانضغاط و السرعة الهيدروديناميكية. فمعظم قيم الخصائص متزايدة و غالبا تكون في حالة MgO أعلى، أسرع في تغير ميولها و كذلك في السرعة المتوسطة للتغير و لكن أكثر خطية في أكسيد الحديد.

الطريقة المباشرة في المقارنة تكون قيمة لقيمة للخصائص عند أي قيمة من الضغط، و حتى تحدد قيم الخصائص عند الضغوط المخفية بين الدراستين. استخدم النموذج القائم على اخذ متوسط قيم الخصائص من كل كثيرات الحدود ابتداء من كثير الحدود الخطي حتى كثير الحدود الأعلى درجة و المحدد بعدد القيم ذات الخطوة الأكثر انتظاما في الضغط المعطى، و ذلك بعد اختياره من بين عشرة طرق كلها تستعمل الاستقطاب الرياضي. و بدراسة الفارق و نسبته تقدم هذه الطريقة كذلك نتائج مهمة منها؛ نفي هذا النموذج للتغير الخطي فيكل الخصائص الملاحظ في الطريقة غير المباشرة، و من خلاله تحدد قيم الخصائص للأكسيدين و مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ حسب علاقات Hashin & Strekman على اعتبار ذوبان x نسبة مئوية من الحديد في أكسيد المنغنيز بالأخص عند الضغوط الموافقة لنموذج PREM الممثل للمادة الأرضية. لذلك فهي تمكن من دراسة المقارنة بين الجميع، فإعادة المقارنة بين الأكسيدين عند القيم الأخيرة للضغط لا يظهر فرق كبير عن المقارنة باستعمال القيم الأصلية إلا في ظهور ضغط اختناق جديد بالأخص من اجل معاملي المرونة. تتميز مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ بتكون شريط بترابطها في كل الخصائص حسب النسبة x فقيم كل الخاصية تزداد اقترابا من قيمتها في FeO كلما ازدادت هذه النسبة، فمن اجل الخصائص البنيوية، معامل الانضغاط الحجمي و السرعة الهيدروديناميكية تنحصر قيم هذه المركبات بين قيم الأكسيدين. كما أمكن تحديد العديد من الأعماق أو الضغوط التي تتطابق عندها معاملات هذه الخصائص و هي الناتجة عن تغير إشارة الفارق او وضع قيم الخاصية بين المقارنين، عدد هذه الأعماق مختلف من حالة إلى أخرى و اكبر عددها يمكن أن يصل إليه هو ستة أعماق. لذلك الانفصال التام لا يكون إلا من اجل السرعتين الموجيتين الطولية و العرضية في حالة FeO بمقارنته بمركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ ، من اجل الكثافة و معامل القص بمقارنته بالمادة الأرضية. في كل السرعات الموجية في حالة MgO و بمقارنته بالمادة الأرضية، من اجل معامل القص في حالة مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ بمقارنتها بالمادة الأرضية. عدم انطباق لكل الخصائص في أن واحد مع المادة الأرضية على الرغم من حدوثه القليل في السرعات الموجية في حالة مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ ، يؤكد عدم إمكانية حضور أي من هذه المواد منفردة في الطبقات الأرضية العميقة. من خلال مقارنة نتائج دراستنا مع أعمال أخرى ولأسباب عدة هناك اختلاف واضح خاصة في معامل القص، إلا أن التغير عموما يكون متوافقا سواء كان بدلالة الضغط أو بتغيير الكسر المولي لمحتوى الحديد في مركبات $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ و الفرق يظهر فقط في تغيير نفس المعامل المذكور.

الكلمات المفتاحية: FeO ، MgO ، $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ ، نموذج PREM، خصائص.

Résumé:

En se basant sur l'une de nos études portant sur le FeO ou celle de Karki et al, 1997 abordant le MgO, les propriétés structurales, élastiques et sismiques ont été déterminées à différentes pressions. A travers les résultats obtenus et par l'application des relations de Hashin et Shtrikman, Ces mêmes propriétés ont été déterminées pour les composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ considérant la fusion d'un taux x de fer dans MgO, notamment aux pressions conformes au modèle PREM représentant la matière terrestre. La comparaison des résultats obtenus dans ces calculs fait ressortir une conclusion importante: ils montrent la sensibilité des propriétés à la transition de phase du FeO, à l'exception de la densité, du module d'incompressibilité et de la vitesse de l'onde hydrodynamique. La plupart des valeurs des propriétés augmentent surtout pour le cas de MgO où elles sont généralement plus élevées. Les valeurs des propriétés des composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ sont caractérisées par la formation d'une bande et une superposition selon la fraction molaire x , et les valeurs de chaque propriété se rapprochent de celles du FeO avec l'augmentation de cette fraction, donc les valeurs des propriétés structurales, du module d'incompressibilité et la vitesse hydrodynamique sont délimitées par celles des deux oxydes. Il a été également possible de déterminer un grand nombre de profondeurs ou de pressions auxquelles les valeurs des propriétés de ces constituants coïncident, résultant d'un changement du signe de différence ou de la définition des valeurs de propriété entre les constituants comparés. Le nombre de ces profondeurs est différent d'un cas à l'autre, et le plus grand nombre qui peut être atteint est de six profondeurs. De plus, la séparation totale ne s'est produite que pour les deux vitesses longitudinale et transversale lors de la comparaison du FeO avec les composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et pour la densité et le module de cisaillement étant comparé avec la matière terrestre. Dans toutes les vitesses d'onde dans le cas de MgO comparé à la matière terrestre, pour le module de cisaillement dans le cas des composants de $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ étant comparé avec la matière terrestre. La non-conformité de toutes les propriétés à la fois avec le modèle de la matière terrestre, bien que sa faible occurrence dans les vitesses d'onde dans le cas des composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$, prouve la non-présence de n'importe quel constituant objet de cette étude seul dans les couches de la terre profonde. En comparant les résultats de notre étude avec d'autres travaux, il existe des différences dans les valeurs pour plusieurs causes en particulier le module de cisaillement, sauf que généralement le changement est en accord avec soit la pression soit par le changement de la fraction molaire du fer dans les composants $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$ et la différence apparaît uniquement dans le changement du même module mentionné.

Mots clefs: FeO, MgO, $(\text{Mg}_{(1-x)}, \text{Fe}_x)\text{O}$, PREM model, Properties

ABSTRACT

By using the calculations either in one of our studies which tackled with the FeO or another of Karki and his colleagues about the MgO, which both determined Structural, Elastic and Seismic properties at different pressures, through which the values of the same properties of the compounds $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$ are determined according to the relations of Hashin & Strekman considering the melting of an x rate of Iron in MgO, especially at the pressures conformed to the PREM model representing the earth material. Comparing the in hands results concluded from these calculations brings out signification conclusion: they show the sensitivity of phase transition in the majority of the FeO properties except for the density, the bulk modulus and the bulk sound wave velocity. The most of the properties values are increasing especially in the case of MgO where it's generally higher. Whereas, for the compounds of $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$ are characterized by the formation of a band to its superposition according to the x rate, and the values of each property is getting closer to its value in FeO with the increasing of this rate, so the values of these compounds for the structural properties, the bulk modulus and bulk sound wave velocity are going to be limited between both oxides values. It had also been possible to determine a lot of depths or pressures with which these properties parameters are going to conform, resulting from a change in the difference sign or setting the property values between the compared materials. The number of these depths is different from one case to another, and the greatest number which can be reached is six depths. Moreover, the total separation is not going to happen unless for the two longitudinal and transversal wave velocities in the case of FeO being compared with the compounds of $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$, for the density and the shear modulus being compared with the earth material. In all wave velocities in the case of MgO being compared with the earth material, for the shear modulus in the case of the compounds of $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$ being compared with the earth material. The nonconformity of all the properties in the meantime with the earth material, though its little occurrence in the wave velocities in the case of $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$ compounds, this assures of the non-presence of any of these materials alone in the deep earth layers. By comparing the results of our study with other work and for several reasons in particular in the values of the shear modulus, except that generally the change is in accordance with either pressure or by the change of molar fraction to the content of the iron in $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$ components and the difference appears only in the change of the same module mentioned.

Keywords: FeO, MgO, $(\text{Mg}_{(1-x)},\text{Fe}_x)\text{O}$, PREM model, Properties