REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FERHAT ABBAS-SETIF

MEMOIRE

Présenté à la Faculté des Sciences

Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Spécialité : Physique

Option : Sismologie

Par *:*

Radi Zohir

THEME :

Propriétés élastiques de SiO_2 sous pression : Application à la sismologie

Soutenu le : 2009

Devant le jury:

Présidente : Amel HACHEMI Prof Université Ferhat Abbas-Sétif
Encadreur : Layachi LOUAIL Prof Université Ferhat Abbas-Sétif
Examinateur Abdelkrim ROUMILI Prof Université Ferhat Abbas-Sétif Examinateur : Djamel MAOUCHE M. C Université Ferhat Abbas-Sétif
Invité: Abdellah. BOUGUERA M. A. C. C Université Ferhat Abbas-Sétif

Remerciement

Je remercie, infiniment, Allah le tout-puissant qui m'a permis de finaliser mon mémoire et qui m'a donné l'occasion de le faire. Je prie pour qu'il l'accepte de moi.

Je remercie très chaleureusement mon directeur de thèse, monsieur le professeur L. Louail qui l'a dirigé pendant deux ans. Sous ses permanents suivis, ses conseils et ses propositions, ce travail a pu voir la lumière. Mon travail avec lui m'a permis d'apprendre une méthode correcte de la recherche scientifique. Ainsi une importante valeur qui est la conservation scientifique. Je le souhaite une longue et belle vie et la réussite dans son travail.

Madame A. Hachemi, je le remercie pour avoir accepter de présider le juré de cette thèse.

Les messieurs examinateurs, monsieur A. Roumili et monsieur D. Maouche Je les remercie également.

Mes remerciement vont aux à monsieur A.Bouguera pour ses encouragements. Je le remercie pour l'enrichissement scientifique qu'il m'a appris en ce qui concerne la géologie.

Je remercie très fort les responsables de notre institut de physique pour leur s services qui nous fournissent pour nous préparer les bons conditions d'étude pendant la duré de nos études.

Mes enseignants de l'année théorique, au nom de mes collègue je les remercie toutes et tous, pour les efforts qu'ils ont fait pour nous afin d'apprendre les principes de la sismologie.

Je remercie les opérateurs du service de la bibliothèque de notre université, pour leurs facilités et aides.

A l'occasion de mes études pendant presque trois ans, j'ai passé des agréables moments avec mes collègues de sismologie. Spécifiquement je remercie Saleh, Issam, Youcef, Kalissa, et Foued. Tous mes respects à nos filles de groupe.

Je remercie ma femme pour sa patience et les conditions qu'elle m'a préparé pour que je puisse travailler et finaliser ce modeste travail. Pour tous mes frères et mes sœurs et surtout mes fils Abed raouf et Sami je le dédie.

Table de matière :

Introduction……5

Chapitre I

I-Sismologie et ondes sismiques ……7

I.1 La sismologie ……7

I.1.1- Mesure en sismologie ……7

I.1.2- Le sismomètre ……8

I.2- Composition interne de la Terre ……10

I.2.1- L'observation directe du globe ……10

I.2.2- L'observation indirecte du globe ……10

I.2.3 –Les ondes sismiques……10

I.2.4- l'importance des ondes de volume……14

I.3- Un modèle sismologique du globe ……16

I.4- Un modèle minéralogique du globe ……19

I.5- Les discontinuités majeures du manteau……19

Chapitre II

II – Etude structurale de SiO2……22

II. 1- Les polymorphes de SiO_2……22

II.2- Les structures existantes dans les conditions de manteau inférieur du SiO_2…….25

II.3- Logiciel de calcul ……..28

II.4- La pression de transition de phase 28

II.5- Variation de volume en fonction de la pression ……..30

II.6- Variation de la densité en fonction de la pression ……..31

Chapitre III

III- Propriétés élastiques de SiO2

III. 1- La variation des constantes élastiques de SiO2 en fonction de la pression.....33

III.2- Calcul le module de cisaillement G 35

III.3- La variation des modules incompressibilité et cisaillement en fonction de P. 37

III.4- Les vitesses sismiques de SiO2 39

III.5- Anisotropie sismique de SiO2 43

III.6- La variation de l'anisotropie sismique de SiO_2 en fonction de la pression ……..49

III.7- Les observations sismologiques.....52

Conclusion 55

Les références.....56

Introduction

D'après la théorie de la tectonique des plaques, les séismes sont distribués suivant des mécanismes physiques où un certain nombre de conditions est présent. Les séismes sont responsables de la propagation élastique des ondes sismiques et les informations qui viennent avec ces ondes.

Avec les méthodes indirectes (la sismologie et les météorites) où leur principes fondamentaux sont l'exploitation des ondes sismiques de volume de deux types "*Primaire*, *compression ou P*" et "*Secondaire, cisaillement ou S*" en utilisant leurs vitesses de propagation et leurs temps d'arrivées, on peut obtenir des informations sur les couches traversées par ces ondes pour donner un modèle de terre, en donnant la nature des matières qui la constituent, leurs densités, les épaisseurs s'il y a des discontinuités…

Les vitesses de propagation des ondes de compression (V_P) et de cisaillement (V_S) dépendent des propriétés du milieu qu'elles traversent. Les ondes de compression induisent localement des variations de volume et de leur vitesse, V_P, qui est en fonction à la fois de la densité ρ et des modules d'incompressibilité B et de cisaillement G du milieu. Les ondes P peuvent se propager dans les solides ainsi que dans les liquides.

Les ondes S conduisent localement à des déformations cisaillantes sans changement de volume. Les vitesses V_S dépendent uniquement de ρ et G. Elles ne se propagent pas dans les liquides où le module de cisaillement est nul ou très petit. Ainsi les modules B et ρ représentent les principales caractéristiques sismologiques des matériaux.

Dans le cadre de ce mémoire nous allons analyser les observations sismologiques à partir des approches de la minéralogie physique (l'élasticité) du pôle silice du manteau inférieur. Nous allons nous concentrer sur la zone située entre 600 et 2700 km de profondeur.

Le groupe du quartz (ou la silice) est un polymorphe de SiO_2. Les membres du groupe du Quartz ont les mêmes éléments chimiques mais les structures différentes. La pression et la température jouent un grand rôle dans la stabilité de chaque membre de quartz. La série suivante donne les

structures possibles de SiO_2, de la pression faible jusqu'à haute pression : alpha quartz, bêta quartz, Coesite, Stishovite, SiO_2 de type $CaCl_2$, Columbite, pyrite.

Dans le manteau inférieur, la structure possible de SiO_2 est la Stishovite. Elle a été synthétisée réellement en premier en 1961 avant la découverte du Cratère du météore.

Dans ce mémoire nous allons étudier les propriétés élastiques de la Stishovite pour déduire les vitesses sismiques dans cet élément dans les conditions du manteau inférieur. Nous allons essayer de donner des interprétations sismologiques à partir de nos résultats. Nous allons aussi comparer nos résultats avec d'autres études.

Ce mémoire est constitué de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous allons présenter la sismologie et l'importance des ondes sismiques dans la compréhension de la structure interne de la terre.

Dans le deuxième chapitre, nous allons nous intéresser à l'étude structurale de SiO_2 à haute pression ainsi que les transitions de phase possibles.

Dans le troisième chapitre, nous allons présenter nos résultats d'étude des propriétés élastiques de notre pôle, les vitesses sismiques et les anisotropies sismiques. Nous les avons comparés avec d'autres résultats. Puis nous arrivons aux interprétations sismologiques.

Une conclusion qui résume tout le travail en donnant les perspectives de notre sujet se trouve à la fin de ce mémoire.

ملخص

نحن درسنا الخصائص المرونة لثاني أكسيد السيليسيوم ثم حسبنا السرعات الزلزالية من اجل استنتاج التباين في الخصائص الزلزالية في الطبقة الباطنية قبل النواة في الأرض.

الضغط والحرارة يلعبان دورا كبير في ثبات كل أصناف ثاني أكسيد السيليسيوم ونحن اهتممنا بدراسة هدا الأكسيد من اجل الضغط العالي و هدا استنتاج التحولات الطورية.التي وجدناها في الضغط 40 جيغا باسكال تحول السيستوفيت إلى الطور من صنف ثنائي الكلور الكليسيوم دون اثر

قيم السرعات الزلزالية تتناسب عكسيا مع الكثافة وطرديا مع معامل الانضغاط ومعامل التشوه . وبعد الدراسة وجدنا هدا العنصر يملك سرعات زلزالية كبيرة.

النتائج المتحصل عليها متقاربة مع جل النتائج الباحثين في هدا الميدان. و في الأخير نقول قي حالة وجود هدا القطب منفردا ادن يوجد انقطاع زلزاليا واضحا في هده الطبقة.

Résumé

Nous avons étudié les propriétés élastiques du pole SiO_2 afin de calculer les vitesses des ondes sismiques et essayer de déduire l'anisotropie sismique dans le manteau inférieur de la Terre.

La pression et la température joue un grand rôle dans la stabilité de chaque membre de SiO_2. Nous avons intéressé à l'étude structurale de ce dernier à haute pression ainsi que les transitions de phase possibles. Au niveau de la pression de 40 GPa, nous avons trouvé une transition de phase de la Stishovite ver la phase de type $CaCl_2$. Cette variation de phase a une influence indétectable sur le volume.

Les valeurs des vitesses sismiques dépendent inversement avec la densité et proportionnellement avec les modules de compressibilité et de cisaillement. D'après l'étude d'anisotropie sismique de Stishovite, on a remarqué une variation des vitesses très importante.

Nos résultats sont comparables avec ceux des autres chercheurs. Ainsi, et dans le cas où la silice existe d'une manière libre, ce dernier indique qu'il y a une discontinuité sismique observable dans le manteau inférieur.

Abstract

We studied the elastic properties of the SiO2 in order to calculate the waves seismic velocities and to try to deduce seismic anisotropy in the Earth lower mantel.

The pressure and the temperature have a great important in the stability of each member of SiO2. We interested in the structural study of the silica with high pressure as well as the possible phase transitions. At the pressure of 40 GPa, we found a phase transition of stishovite to the phase of the $CaCl_2$ type. This variation of phase has a undetectable influence on volume.

The seismic velocity values depend conversely with the density and proportionally with the modules of compressibility and shearing. According to the seismic study of anisotropy of Stishovite, we noticed a very important variation of velocities.

Our results are comparable with those of the other researchers. Thus, and if silica exists in free manner, it will be an observable seismic discontinuity in the lower mantel.

Résumé

Nous avons étudié les propriétés élastiques du pole SiO_2 afin de calculer les vitesses des ondes sismiques et essayer de déduire l'anisotropie sismique dans le manteau inférieur de la Terre.

La pression et la température joue un grand rôle dans la stabilité de chaque membre de SiO_2. Nous avons intéressé à l'étude structurale de ce dernier à haute pression ainsi que les transitions de phase possibles. Au niveau de la pression de 40 GPa, nous avons trouvé une transition de phase de la Stishovite ver la phase de type $CaCl_2$. Cette variation de phase a une influence indétectable sur le volume.

Les valeurs des vitesses sismiques dépendent inversement avec la densité et proportionnellement avec les modules de compressibilité et de cisaillement. D'après l'étude d'anisotropie sismique de Stishovite, on a remarqué une variation des vitesses très importante.

Nos résultats sont comparables avec ceux des autres chercheurs. Ainsi, et dans le cas où la silice existe d'une manière libre, ce dernier indique qu'il y a une discontinuité sismique observable dans le manteau inférieur.

Les mots clés :

Silice SiO_2, Stishovite, propriétés élastiques, compressibilité, cisaillement, densité, vitesses des ondes sismiques, anisotropie sismique, pression, température, transitions de phase, discontinuité sismique, manteau inférieur de la Terre.

Chapitre I:

Sismologie et ondes sismiques

I.1-La sismologie

La sismologie, ou séismologie, étudie les séismes (tremblements de terre) et plus généralement la propagation des ondes sismiques à l'intérieur de la Terre. Les différentes disciplines de la sismologie sont la sismogénèse, la sismotectonique, l'aléa sismique, la sismologie globale, la sismique active et la sismologie spatiale. Ici, nous utilisons la sismologie globale.

I.1.1-Mesure en sismologie

La mesure en sismologie est fondamentale, que ce soit pour l'étude de la propagation des ondes, ou pour l'étude des séismes.

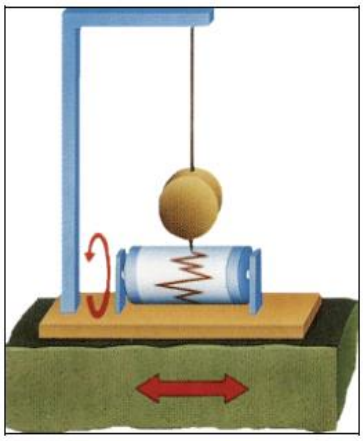
Dans l'étude d'un séisme, on passe par des processus en action sur une faille avant et pendant le séisme. Mais cette étude est très difficile. La seule possibilité pour le moment est le forage (la méthode directe) mais c'est une solution très coûteuse et elle ne permet qu'une observation ponctuelle du plan de faille. Il faut donc utiliser la méthode indirecte qui donne des observations sismiques. Cette méthode consiste à l'analyse des ondes sismiques générées par les séismes. Ces ondes peuvent être enregistrées par des sismomètres. Surtout en cas des magnitudes importantes.

I.1.2- Le sismomètre

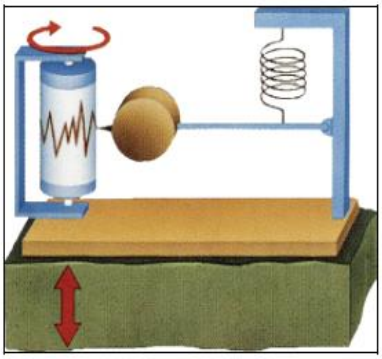
Un sismomètre est un appareil capable de détecter et d'enregistrer de très petits mouvements du sol. Il est constitué d'une masse aimantée associée à un pendule ou à un ressort et d'un bâti lié au sol. Lors d'un séisme, les ondes sismiques arrivent, le sol, le bâti ainsi que le rouleau du papier bougent mais la masse reste immobile. Ce mouvement relatif entre la masse et le bâti porte également le système d'enregistrement.

Un sismomètre peut enregistrer des mouvements verticaux du sol (on parle de sismomètre vertical) ou des mouvements horizontaux (sismomètre horizontal) comme le montre la figure 1.

On appelle la trace de la masse sur le rouleau de papier le sismogramme. Un exemple est montré les figures 2 et 3.



Sismomètre horizontal



Sismomètre vertical

Figure 1 : Principe de fonctionnement des sismomètres : horizontal et vertical.

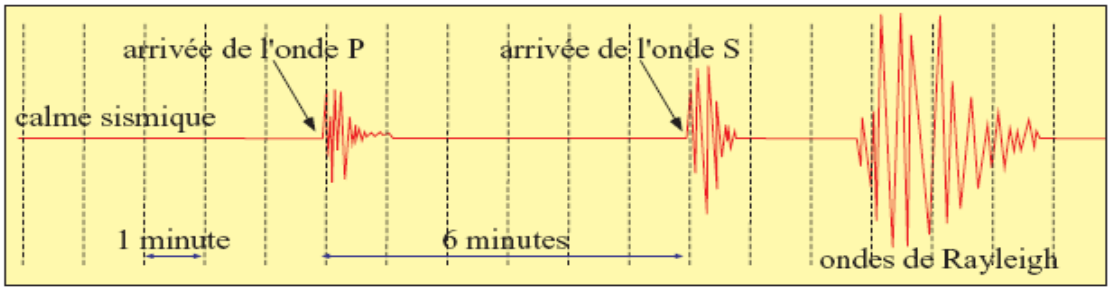


Figure 2 : Sismogramme d'un séisme régional (distance de l'épicentre d'environ 5000 km, avec une différence de temps entre P et S de l'ordre de 6 minutes).

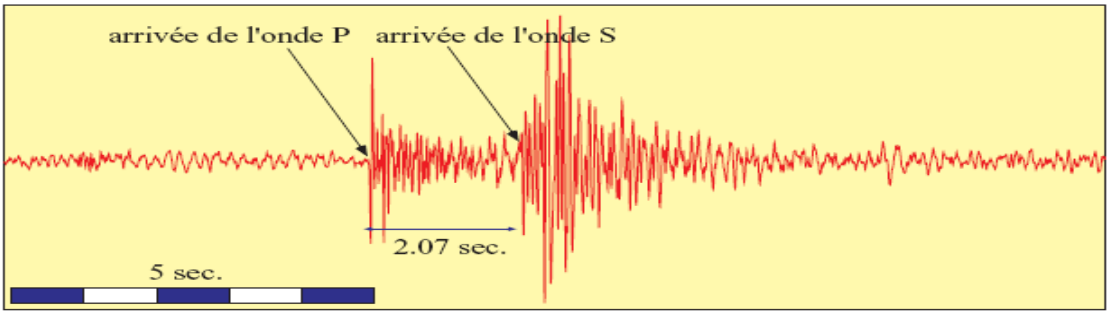


Figure 3 : Sismogramme d'un séisme local (distance de l'épicentre d'environ 8 km, avec une différence de temps entre P et S de l'ordre de 2 secondes)

I.2- Composition interne de la Terre

I.2.1- L'observation directe du globe :

Les plus profonds forages ne dépassent pas une dizaine de kilomètres alors que le rayon terrestre avoisine 6370 km. Il faut donc utiliser les méthodes indirectes pour connaître la structure et la composition de l'intérieur de la Terre. Les géologues utilisent la sismologie, qui est l'étude de la propagation des ondes sismiques.

I.2.2- L'observation indirecte du globe :

Lorsqu'on applique une contrainte sur un corps solide, le résultat est une déformation élastique, une déformation plastique ou une rupture. Ceci implique une libération brutale de l'énergie accumulée sous forme de chaleur et surtout d'ondes sismiques qui se propagent dans toutes les directions de l'espace.

Certaines ondes sismiques traversent l'intérieur du globe et donnent ainsi des informations sur ses structures profondes. Elles sont reçues aux niveaux des sismographes qui enregistrent les vibrations du sol.

Une station sismique possède trois sismographes: deux qui enregistrent les mouvements horizontaux (l'un est orienté Nord-Sud et l'autre Est-Ouest) et un qui enregistre les mouvements verticaux. L'analyse d'un sismogramme montre les types des ondes sismiques :

I.2.3- Les ondes sismiques (élastiques) :

Dans un milieu homogène infini, il existe deux types d'ondes élastiques qui se propagent : ondes de volumes et ondes de surfaces.

Les ondes de volume ont deux modes de polarisation différente :

- Les ondes de compression P
- Les ondes de cisaillement S

Une onde de surface est une combinaison des ondes de volumes P et S à la surface du globe terrestre. Il existe deux types des ondes de surfaces :

- L'onde de Rayleigh
- L'onde de Love

Ces ondes ont une grande importance dans la sismologie. Chaque type a ses caractéristiques spécifiques.

a) Les ondes de volume P

Ces ondes sont appelées aussi les ondes primaires ou longitudinales. Le déplacement du sol qui accompagne leur passage se fait par des dilatations et des compressions successives. Elles se déplacent parallèlement à la direction de propagation de l'onde, comme le montre la figure 4.

Les ondes P sont les ondes de volumes les plus rapides et arrivent aux stations avant les ondes secondaires S. Leur vitesse dans la croûte varie entre 5,0 et 7,0 km/s.

b) Les ondes de volume S :

Ces ondes sont aussi appelées les ondes sismiques secondaires car elles apparaissent en second sur les sismogrammes. Elles se propagent plus lentement que les ondes primaires P. elles prennent une polarisation élastiques transversales, perpendiculaires à la direction de propagation, comme le montre la figure 5.

Ces ondes ne se propagent pas dans les milieux liquides. Elles sont en particulier arrêtées par le noyau externe de la Terre. Leur vitesse est de 4,06 $km.s^{-1}$ à la croûte terrestre. On les appelle aussi ondes de cisaillement ou ondes transversales.

c) Les ondes de surface dites de Love

Les ondes de Love sont lentes et elles sont de grande amplitude. Ces ondes sont la cause des dégâts importants. Elles ne se déplacent que dans les couches superficielles du globe, comme le montre la figure 6.

d) Les ondes de surface dites de Rayleigh

Ces ondes sont nommées d'après Lord Rayleigh, un physicien anglais qui a supposé leur existence.

Une onde de surface a un mouvement rétrograde (arriéré) et elliptique sur la surface de la terre. Ces ondes se propagent comme les ondes qui sont générées par une roche lâchée dans un bassin, comme le montre la figure 7.

Elles sont plus lentes par rapport aux autres types d'onde.

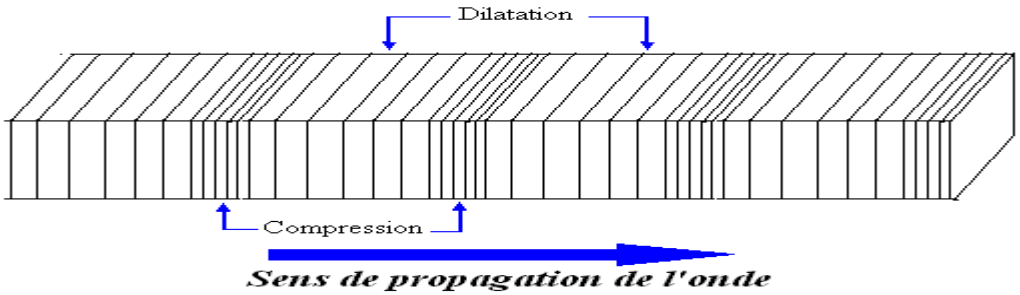


Figure 4 : Propagation les ondes P

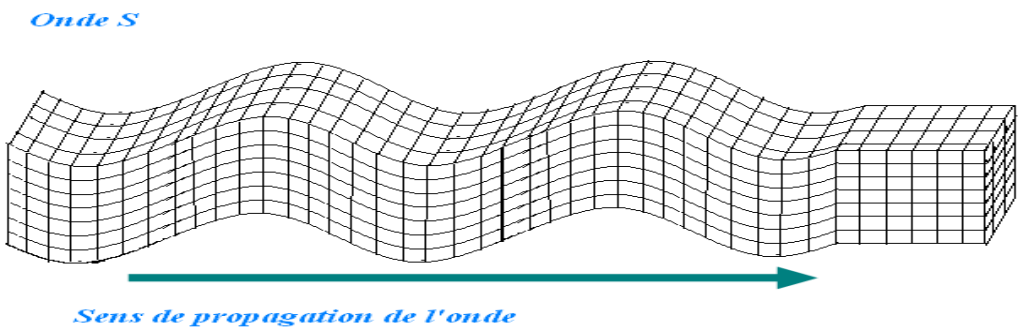


Figure 5 : Propagation les ondes S

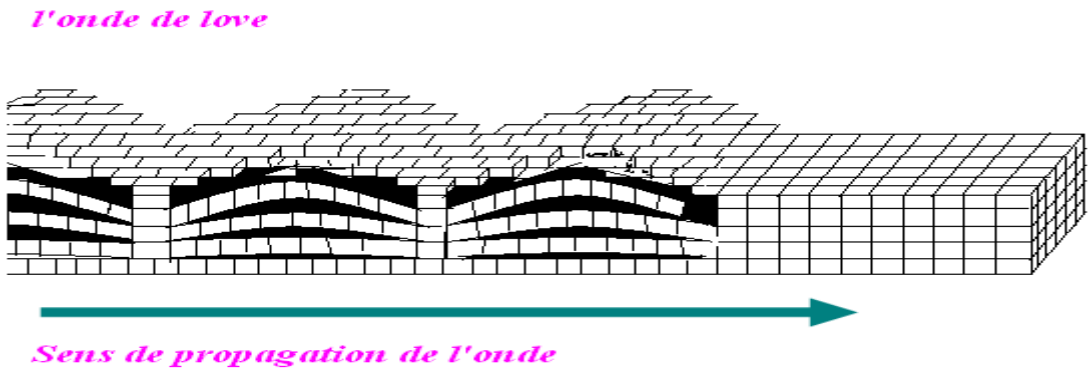


Figure 6 : Propagation les ondes de Love

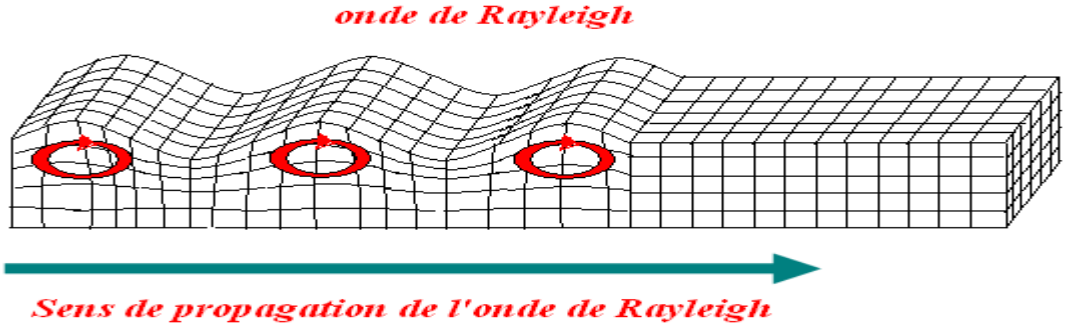


Figure 7 : Propagation les ondes Rayleigh

I.2.4. L'importance des ondes de volume :

a) Dans la sismologie du globe

L'analyse des temps d'arrivée des ondes P et S, à des stations situées à diverses distances de l'épicentre d'un séisme, montre que ces ondes se propagent dans la profondeur du globe. En conséquence, on peut dire que la vitesse de propagation des ondes P et S augmente avec la profondeur et que la Terre n'est pas homogène. La vitesse de propagation des ondes sismiques augmente avec la compressibilité des matériaux dans lesquels elles se propagent car la compressibilité s'accroît avec la profondeur [1].

En appliquant les lois de l'optique à la propagation des ondes sismiques, on conclue que leur trajectoire n'est pas droite mais courbée.

Dans la figure 8, nous présentons la variation des vitesses sismiques ainsi que la densité de la matière terrestre traversée par ces ondes en fonction de la profondeur.

b) Dans la détermination des discontinuités majeurs

Les stations situées entre 11500 km et 14500 km (entre 103° et 142° de distance angulaire) de l'épicentre d'un séisme ne détectent pas les ondes P. Cette zone appelée «la zone d'ombre ». Pour les ondes S, cette zone est importante car ces ondes ne sont pas enregistrées à distance angulaire 103° car à des distances supérieures à 103° à l'épicentre, les ondes S ne se propagent pas dans le noyau externe liquide.

Dans la figure 9 nous présentons le principe de la propagation des ondes P et S et la zone d'ombre :

L'absence des ondes P entre les deux distances angulaires 103° et 142°, indique qu'il y a deux discontinuités importantes séparant deux milieux différents. Les ondes sismiques qui traversent ces discontinuités, doivent subir une réfraction importante. Ces discontinuités sont :

- La discontinuité de Gutenberg séparant le manteau inférieur et le noyau externe;
- La discontinuité de Lehmann séparant le noyau externe et la graine.

La déviation des ondes sismiques dans la zone d'ombre (Figure9) explique la chute des vitesses de propagation de ces ondes sur ces discontinuités.

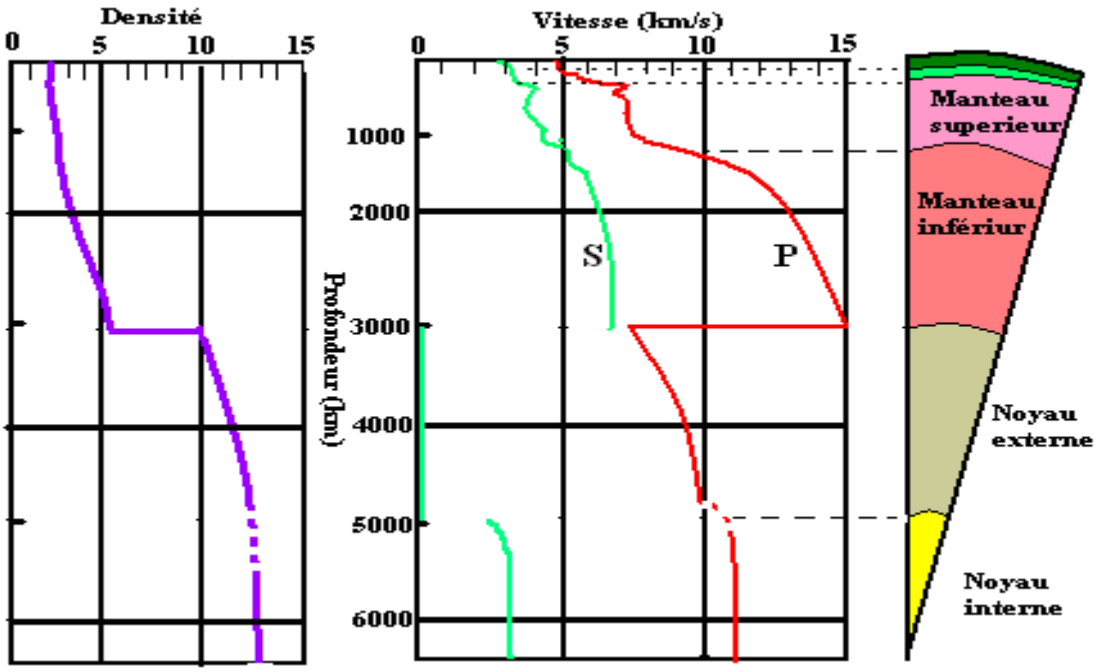


Figure 8 : Variation des profils des vitesses et de densité en fonction de la profondeur de la Terre

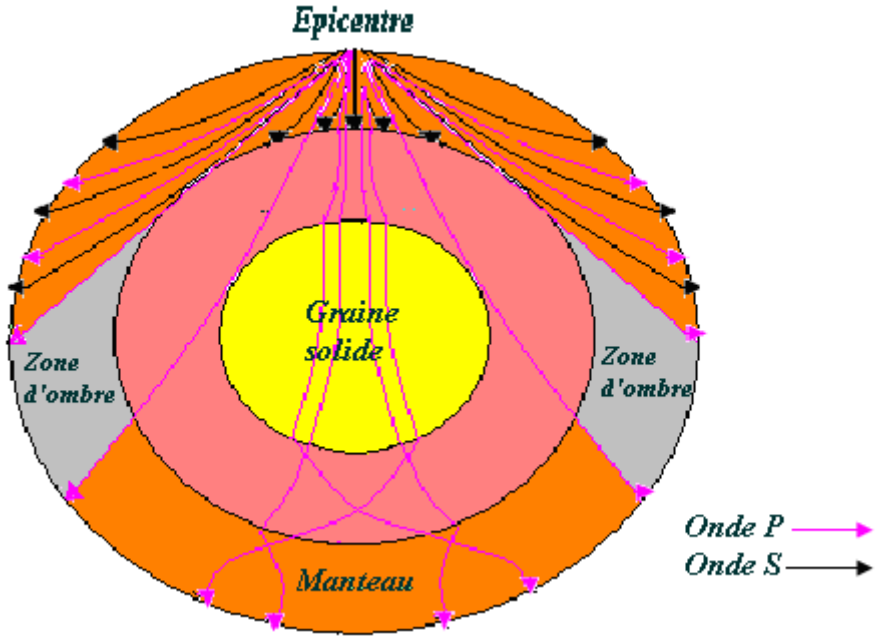


Figure 9 : Propagation des ondes P et S à l'intérieur du globe terrestre

I.3- Le modèle sismologique du globe terrestre

La sismologie du globe étudie la structure de la terre en utilisant les enregistrements des ondes produites par les séismes de magnitude suffisante (supérieure à 5) à très grandes distances.

A partir du traitement mathématique des temps d'arrivée et des trajets des ondes sismiques enregistrées à des stations réparties sur le globe en réseaux, on a déterminé un profil des vitesses des ondes Pet S en fonction de la profondeur.

Dans ce qui suit nous présentons les couches principales du globe terrestre d'après ce profil de vitesse (modèle PERM) :

a) La croûte terrestre

La croûte est l'enveloppe la plus externe et la moins épaisse du globe (continentale et océanique). Elle est séparée du manteau par une discontinuité appelée Moho (discontinuité de Mohorovicic) située en moyenne à 30 km sous les continents et à 6 km sous les océans.

b) Le manteau

Le manteau est l'enveloppe entre la discontinuité de Moho jusqu'à une profondeur de 2900 km. Les géophysiciens distinguent le manteau supérieur à partir de la discontinuité de Mohorovicic jusqu'à 670 km, et le manteau inférieur entre 670 jusqu'à 2900 km. La discontinuité située à 670 km est marquée par une augmentation de vitesse des ondes Pet S de l'ordre de 0,3 à 0,5 km. s^{-1}.

c) La discontinuité de Gutenberg

Une discontinuité à 2900 km est la discontinuité de Gutenberg ou frontière noyau-manteau est une discontinuité majeure de la Terre. C'est une interface entre un milieu solide, le manteau, et un milieu liquide, plus dense, le noyau.

c) Le noyau

Le noyau n'est pas liquide dans sa totalité: la partie centrale du noyau, ou graine, est solide et s'étend depuis la profondeur de 5150 km (discontinuité de Lehmann) jusqu'au centre de la Terre.

La lithosphère formée par la croûte et la partie superficielle du manteau supérieur (jusqu'à la zone à moindre vitesse) est rigide, susceptible de se rompre lorsqu'elle est soumise à des contraintes.

L'asthénosphère située en dessous est moins rigide, plus visqueuse, et ne répond pas à des contraintes en se cassant, mais en se déformant de manière irréversible. Les ruptures à l'origine de séismes ont toujours lieu dans la lithosphère, jamais dans l'asthénosphère. Bien que la diminution de rigidité soit surtout nette au niveau de la zone à moindre vitesse, beaucoup de géologues considèrent que l'asthénosphère s'étend jusqu'au manteau inférieur (670 km).

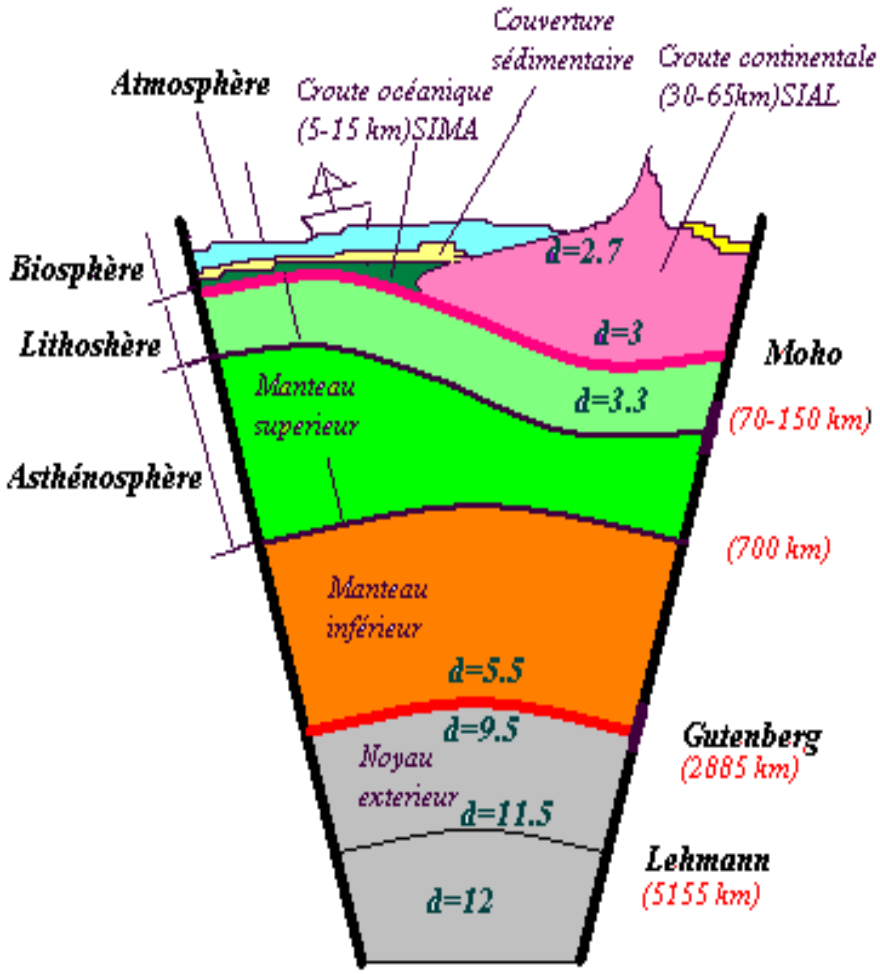


Figure 10 : La structure interne et les discontinuités majeures de la Terre

I.4- Le modèle minéralogique du globe

Le modèle minéralogique identifie les grandes enveloppes du globe. Il définit la nature des roches constituant ces enveloppes et leur composition chimique.

a) Les roches du manteau

Dans les basaltes, résultant du refroidissement des laves émises en surface par les volcans, on trouve parfois des morceaux de péridotite. Cette roche n'existe pas dans les conditions de la croûte (température et la pression). Donc cette roche existe dans le manteau et elle a été amenée en surface par le magma basaltique lors de sa montée.

Elle est constituée essentiellement de minéraux ferromagnésiens : olivine en majorité, pyroxènes et (moins de 10 %) d'un minéral alumineux (souvent le grenat). Par rapport à un gabbro de croûte océanique, elle est beaucoup plus riche en olivine et moins riche en feldspaths.

b) La composition du noyau

La densité moyenne de la Terre est de 5,5 celles des croûtes continentale et océanique respectivement de 2,7 et de 2,9 et celle du manteau en moyenne de 4,5. Cela conduit à penser que la densité du noyau doit être nettement supérieure à 6. Par le calcul, on arrive à une densité de l'ordre de 12, voisine de celle du fer. L'idée que le noyau est constitué de fer métallique est confirmée par les météorites.

La grande majorité des météorites (85 %) sont des chondrites formées par un assemblage de silicates ferromagnésiens (olivine, pyroxène) et de fer métallique. Des analyses plus complexes indiquent que le noyau serait constitué d'un alliage fer nickel [2].

1.5- Les discontinuités majeures dans le manteau

Les vitesses de propagation des ondes de P et S dépendent des propriétés du milieu traversé. Les modules B (module d'incompressibilité) et G (module de Cisaillement) représentent les principales caractéristiques sismologiques des matériaux. Par la combinaison des deux vitesses sismiques des ondes P et S on obtient une nouvelle vitesse VΦ qui est en fonction de B et ρ (la densité). C'est une vitesse purement théorique puisque aucune onde ne se propage par cette vitesse.

Les observations sismologiques présentent les effets des contraintes sur la structure de la Terre. À l'intérieure de la terre, il est difficile de définir avec précision le profil de température et la composition chimique de chaque couche.

Dans la zone 200- 2700 Km on distingue 3 types de discontinuités :

1. Des discontinuités observées à l'échelle globale et associées à des transitions de phases au sein de l'olivine (une des phase minéralogique du manteau). Il s'agit des discontinuités de la zone de transition à 410 km et 660 km de profondeur (voir figure 11).
2. Des discontinuités locales, observées à l'échelle régionale. La figure 11 montre l'histogramme des discontinuités observées par Deuss et al [3]. Les auteurs ont localisé des réflecteurs sismiques autres que ceux à 410 et 660 km dans certaine région du manteau sans qu'ils soient observables à l'échelle globale. Dans la zone de transition, ces discontinuités pourraient s'expliquer par des transitions de phases au sein des pyroxènes à 220, 280 et 310 km, par un changement de mécanisme de déformation à 220 km [4], par une transition de phase au sein de l'olivine à 520 km. Dans le manteau inférieur, il y a une probabilité de trouver des réflecteurs sismiques à 800 km. Cette observation peut être mise en relation avec d'autres discontinuités régionales observées entre 920 et 1200 km [4] liées probablement à la présence de plaques de subductions dans les régions étudiées.
3. Autres discontinuités, non observées jusqu'à présent [5], ont été évoquées pour satisfaire des observations géochimiques et géophysiques [6] qui proposent une discontinuité chimique au milieu du manteau inférieur (supérieur à 1600 km de profondeur) avec une topographie très fortement ondulée. Des discontinuités similaires ont été observées en laboratoire dans des expériences analogiques [7].

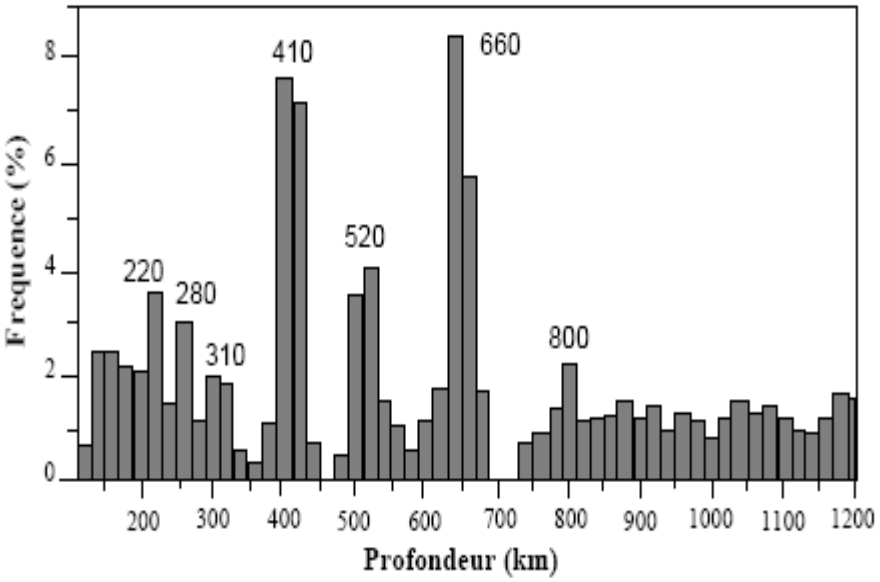


Figure 11: Histogramme de la fréquence d'observation des différentes discontinuités dans le manteau [3].

Chapitre II:

Etude structurale de SiO_2

Dans ce chapitre on présente les structures possibles de SiO_2 notamment les structures existantes dans les conditions de la croûte jusqu'au manteau inférieur (0 GPa jusqu'à 140 GPa). On montre aussi les transitions de phase possibles de ce pole.

II.1- Les polymorphes de SiO_2

Il y a six formes différentes pour la molécule chimique SiO_2, qui prend aussi le nom de groupe de quartz ou silice. Le silicium et l'oxygène sont les deux éléments les plus communs dans la croûte du globe terrestre (plus de 90%).

La silice prend plusieurs dispositions structurales. Chaque structure possède les conditions nécessaires de température et de pression.

La série de transformation du groupe du quartz dans la figure 12 ci-dessous représente les transitions de phase possibles de quartz en fonction de la pression dans l'intervalle [0GPa, 240GPa]**.**

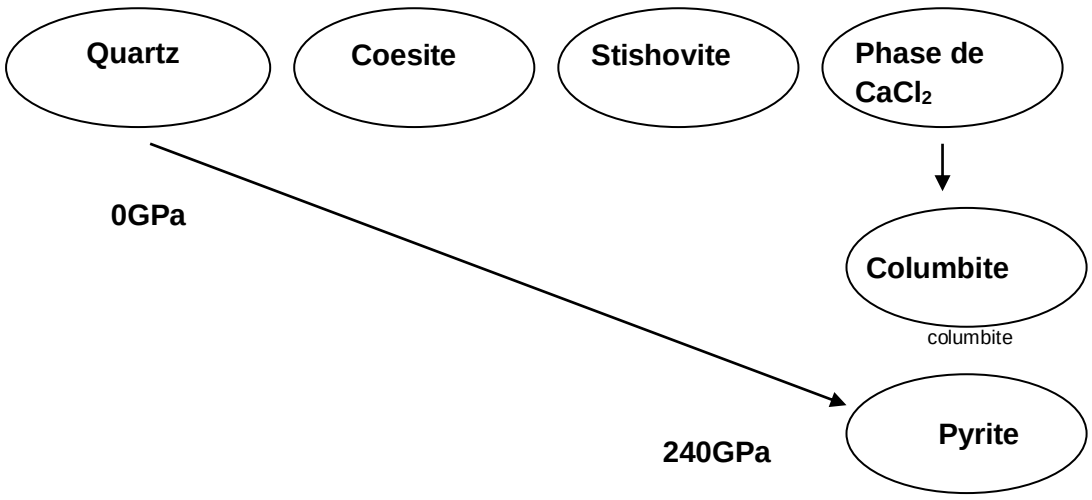


Figure 12 : Série de transformations structurelles du groupe de quartz : du Quartz à la Pyrite, en variant la pression [0, 240 GPa] [8] [10].

Le diagramme de phase dans la figure 13 présente les trois premières phases de la silice : Le quartz, la Coesite, et la Stishovite

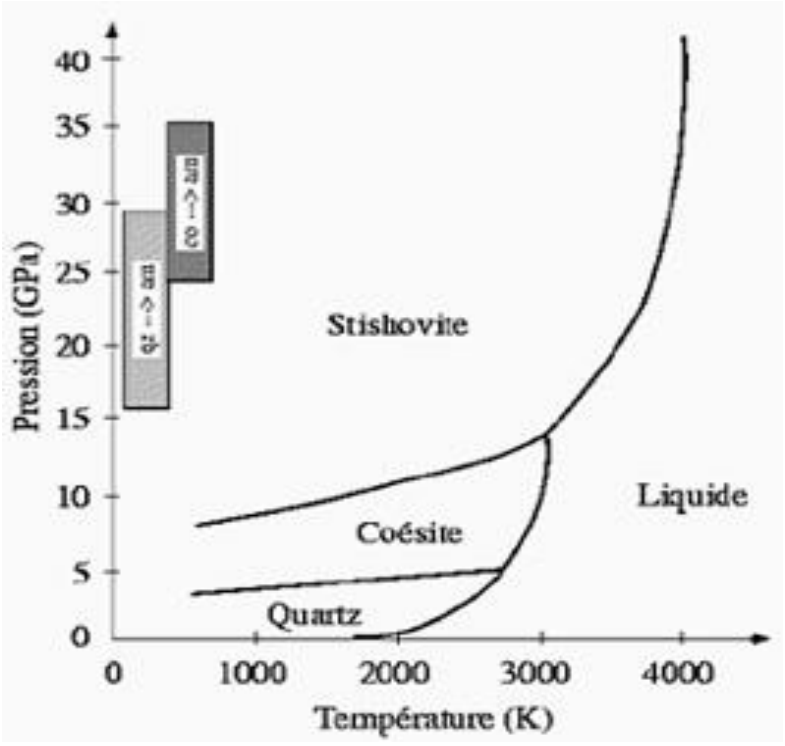


Figure 13 : Diagramme de phase de quartz dans l'intervalle [0, 40 GPa] [9].

a) Le Quartz

Le quartz est la forme la plus stable par rapport aux autres membres de silice dans la croûte terrestre où tous les modèles du quartz sont du quartz alpha. Le quartz bêta est seulement stable aux températures au-dessus de (846 K).

b) Coesite

La Coesite est un polymorphe de quartz. Il se compose des mêmes éléments chimiques avec la silice, mais sous une structure différente.

Les cristaux de Coesite sont bien formés dans un intervalle de pression bien déterminée comme le montre la figure 13.

On trouve la Coesite dans la croûte terrestre dans les sites d'impact du Météore, où les pressions sont importantes.

c) Stishovite

La Stishovite est un polymorphe de quartz. Il se forme rapidement à hautes pressions mais pas nécessairement aux hautes températures.

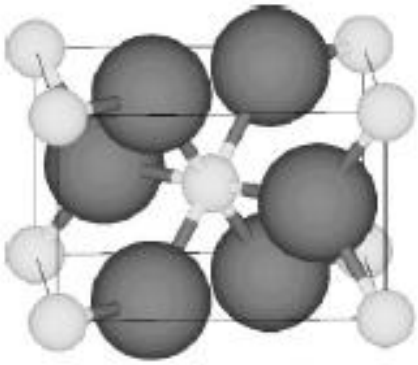
La même remarque que la Coesite, la stishovite se trouve aussi dans la croûte terrestre dans les sites d'impact d'une météore, où les pressions sont grandes. En effet, la stishovite a été synthétisée la première fois en 1961 [11].

II. 2- Les structures de SiO_2 existantes dans les conditions du manteau inférieur :

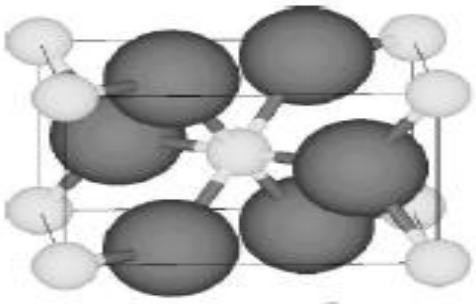
Plusieurs travaux expérimentaux et théoriques ont montré qu'il y a trois structures cristallines possibles du SiO_2 dans le manteau inférieure : Tétragonal; type Retile (stishovite), Orthorhombique; type $CaCl_2$ et Orthorhombique; type columbite. Chaque structure existe dans des conditions thermodynamiques spécifiques.

On présente les trois structures dans la figure (15), et leurs paramètres dans le tableau (II-1). Où :

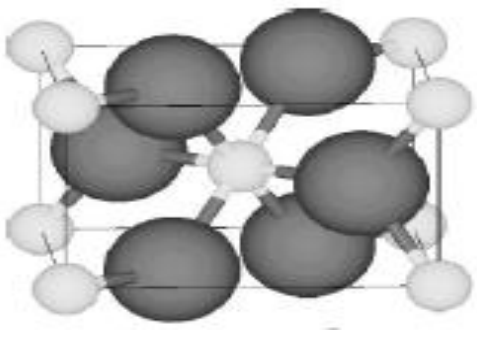
- **S-C:** est la structure cristalline ou le prototype de cette structure cristalline, par exemple, la structure cristalline Orthorhombique mais le prototype est $CaCl_2$ ou columbite.
- **G-S:** le groupe espace de la structure cristalline.
- **N-G-S:** le numéro de classification du groupe d'espace de la structure.
- **a, b, c:** représentent les arêtes des axes des mailles cristallines.
- **α, β, γ:** représentent les angles des mailles cristallines.
- **Coor:** est les coordonnées des atomes du nœud dans les mailles cristallines.



La maille conventionnelle de Stishovite



La maille conventionnelle de type $CaCl_2$



La maille conventionnelle de type Columbite

Figure 15 : Les structures possibles du SiO_2.

Tab II-1: Les paramètres structuraux possibles du SiO_2.

	Tétragonal	**Orthorhombique**	**Orthorhombique**
S-C	**Retile** [15]	**$CaCl_2$** [16]	**Colombite** [17]
G-S	**P42/mnm**	**Pnnm**	**Pbcn**
N-G-S	**136**	**60**	**58**
Z	**2**	**2**	**4**

a	**4.179A°**	**3.997A°**	**4.097A°**
b	**2.6649A°**	**3.862A°**	**5.0462A°**
c	**2.6649A°**	**2.554A°**	**4.4946A°**
α(°)	**90**	**90**	**90**
β(°)	**90**	**90**	**90**
γ(°)	**90**	**90**	**90**
coor	**Si(0,0,0),** **Si(0.5,0.5,0.5) O(0.3053,0.3053,0) (-0.3053,-0.3053,0) ,(0.8053,0.1947,0.5), (0.1947,0.8053,0.5)** [12]	**Si(0,0,0) ,(0.5,0.5,0.5)** **O(0.275,0.325,0) ,** **(-0.275.,-0.325,0) ,(0.775,0.175,0.5), (-0.775,-0.175,0.5)** [14]	**Si±(0,0.171,0.5),** **Si± (0.5,0.671,0.25),** **O± (0.286,0.376,0.412)** **O± (0.214,0.124,0.912)** **O± (0.7860.124,-0.412)** **O± (-0.286,0.376,0.25)** [13]

II.3-Le logiciel de calcul :

CASTEP [18] est un logiciel qui utilise la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et permet de fournir un bon niveau atomique. La physique quantique et à travers l'équation de Schrödinger nous permet de mettre au point touts les propriétés du cristal, ceci n'est pas évident, car la solution exacte

de l'équation de Schrödinger est de nos jours impossible. Pour cela, différentes approximations pour simplifier le problème de ce qu'on appelle *N* corps en interaction sont introduites :

La DFT propose que l'énergie totale d'un système électronique peut être exprimée en fonction de sa densité. Elle n'a pas pus avoir une justification théorique qu'avec les travaux de Hohenberg et Kohn en1964, qui ont prouvé deux théorèmes fondamentaux qui soutiennent la DFT [18].

Différentes fonctionnelles existent pour la DFT, telle que l'Approximation de la Densité Locale (LDA), qui considère l'énergie comme fonctionnelle locale de la densité $\rho(r)$, une amélioration sur la LDA est l'Approximation du gradient généralisé (GGA) qui introduit une combinaison entre les termes locaux et un gradient dans la formule de l'énergie, l'énergie d'échange et de corrélation regroupe toute l'information manquante sur les interactions électron-électron qui est mal décrite dans l'approximation de Hartree, par conséquent son évaluation est la base de toutes les approches apportées sur la DFT [18].

Dans la plupart des systèmes, les électrons du cœur sont fortement liés au noyau et ne répondent donc pas au mouvement plus rapide des électrons de valence, on peut aussi les considérer comme immobiles. Les électrons de valence sont peu localisés et s'étendent loin de la région du noyau, ce sont elles qui déterminent au premier ordre les propriétés physico-chimiques du système. Donc on cherche à remplacer un potentiel électron-noyau par un pseudopotentiel plus faible traduit l'écrantage du noyau par les électrons du cœur. Ce pseudopotentiel agit plutôt sur un ensemble de pseudofonctions d'ondes que des fonctions d'ondes de valence réelles, ces pseudofonctions possèdent les mêmes propriétés que les fonctions d'ondes réelles [18].

CASTEP peut donner des informations sur les énergies totales, les forces et insiste sur un système atomique, ainsi que le calcul de les géométries optimales, bande de structures, les spectres optiques, les spectres de phonons et bien plus encore, il peut également procéder à des simulations de dynamique moléculaire [18].

II.4- La pression de transition de phase :

On calcule l'énergie de l'enthalpie de formation de chaque structure, pour plusieurs valeurs de pression.

A chaque pression, on considère les valeurs de l'enthalpie de Stishovite comme la référence et les valeurs des différences (entre la 1ère phase et la 2ème phase) sont les valeurs de la deuxième phase, cette méthode est utilisée dans plusieurs travaux, par exemple [19].

D'après cette méthode, on obtient la figure 16, dans l'intervalle de pression 0 GPa jusqu'à 40 GPa, la phase la plus stable est une Stishovite de symétrie tétragonal type Retile.

La figure (16) représente la différence de l'enthalpie de formation des phases possibles de SiO_2, en prenant comme repère l'enthalpie de formation de la Stishovite.

La différence d'enthalpie de formation de SiO_2 de type $CaCl_2$ diminue quand la pression augmente jusqu'à ce qu'elle s'annule autour d'une pression de 40 GPa. C'est la pression de transition de phase de la Stishovite.

Au-delà de 40 GPa, la phase orthorhombique (SiO_2 de type $CaCl_2$) devient stable

Nos résultats sont comparables aux autres travaux, par exemple, la valeur de la transition trouvée par Karki et al à (47 GPa) [23] et les observations spectroscopiques de Raman par Stixrude et al (50 ± 3GPa) [15] , par Kathleen et al à (49-50 GPa) [16], par Hemley et al (~60 GPa) [19].

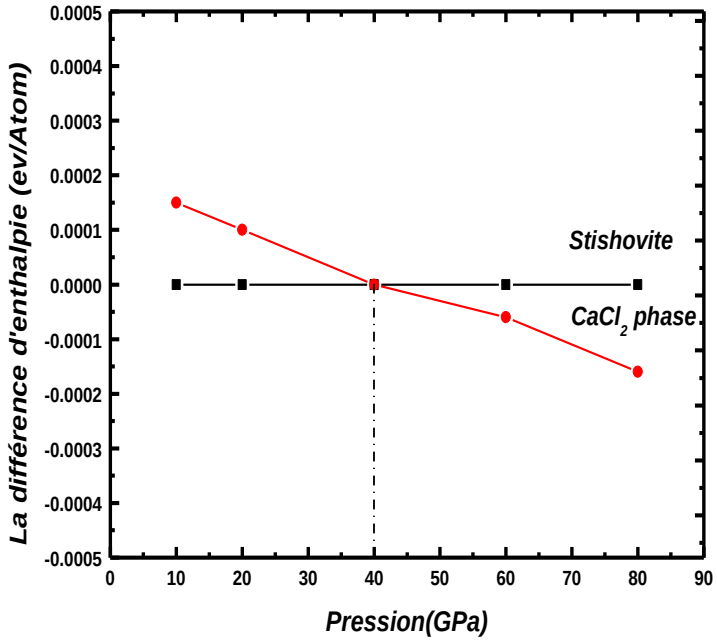


Figure16: La variation de la différence de l'enthalpie de formation en fonction de pressions pour SiO_2

II.5- La variation de volume en fonction de la pression :

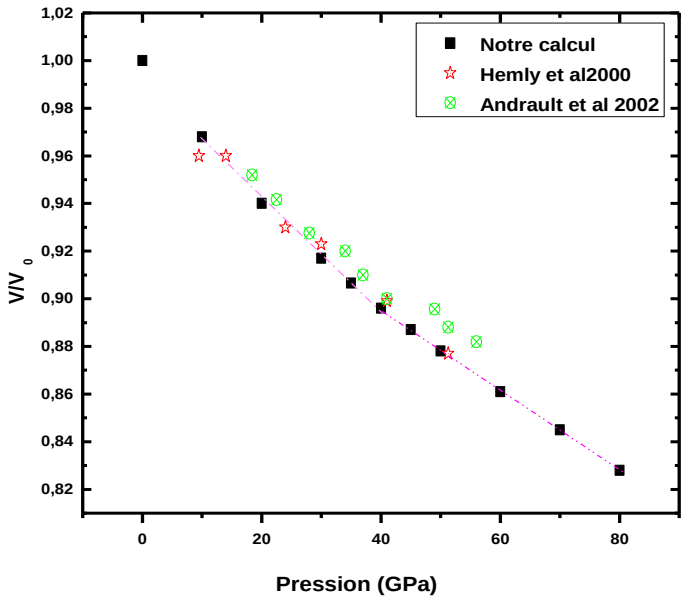


Figure17 : Le rapport V/V_0 en fonction de la pression (comparaison entre notre calcul et les résultats expérimentaux de Hemly et al et Andrault et al .

Le rapport V/V_0 diminue lentement quand la pression augmente.

La différence entre notre résultat et les résultats expérimentaux peut s'expliquer par les conditions de température et de pression (T=0 K, pression hydrostatique pour notre calcul. T= 300 K, pression non hydrostatique pour leurs expériences) [20], [21]

Le rapport V/V_0 diminue de 1 jusqu'à 0.89 dans la première phase et de 0.89 jusqu'à 0.8139 dans la deuxième phase.

II.6- La variation de la densité en fonction de la pression:

La densité est donnée par :

$$\rho = \frac{m}{V} = \frac{Z.M}{N.V} \qquad \text{(II-2)}$$

Où : - m est la masse d'une maile élémentaire.

- M est la masse molaire.

- Z est le nombre de molécules dans la maile élémentaire.

- V est le volume d'une maile élémentaire.

- N est le nombre d'Avogadro.

La figure (18) montre la variation de la densité en fonction de la pression à partir de nos valeurs en comparant avec celles du modèle PREM (Primitive Référence Earth Moderne).

Nos calculs montrent que la densité de la Stishovite et du SiO2 de type CaCl2, augmente linéairement en fonction de la pression avec une pente moyenne de 0.13et 0.10 respectivement.

En comparant avec le modèle PREM, nous remarquons que la densité (figure 18) est proche avec celle de SiO_2. Dans les deux phases Stishovite et SiO_2 de type $CaCl_2$ (même pente pour les deux courbe PREM et SiO_2), les valeurs de SiO_2 sont plus grandes. Ceci veut dire que notre pole existe dans le manteau inférieur et sa fraction augmente en fonction de la profondeur [22].

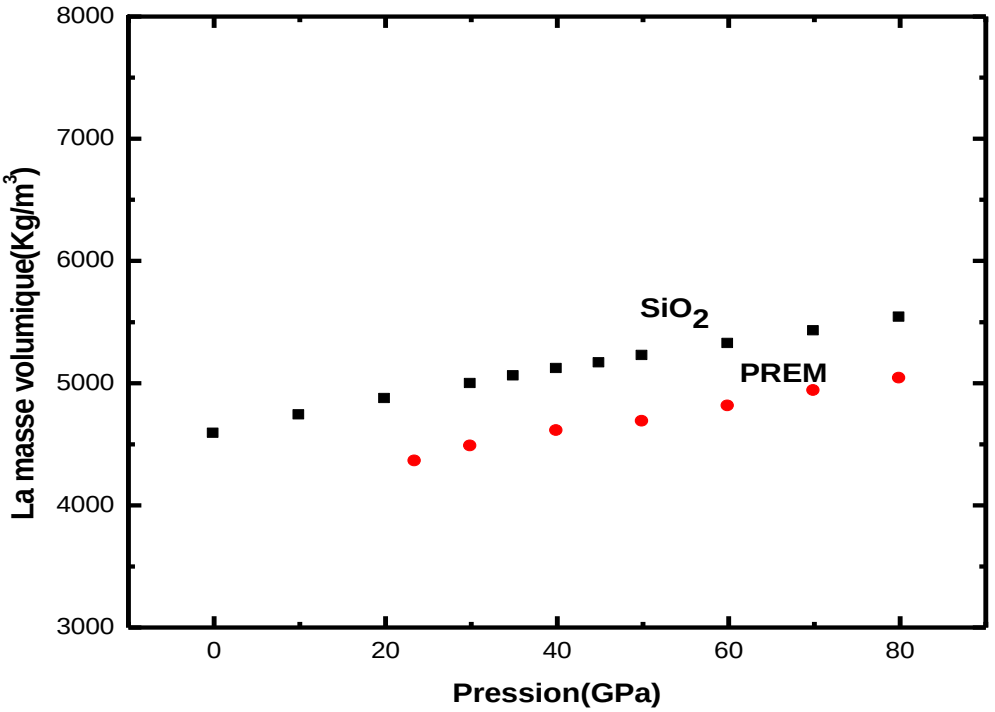


Figure 18 : La variation de la densité en fonction de pression de notre travail et le modèle de PREM.

Chapitre III:

Propriétés élastiques de SiO2

Dans ce chapitre, on présentera les propriétés élastiques de SiO_2 à haute pression (les conditions du manteau inférieur). On calculera les vitesses sismiques des ondes de volumes à partir des constants élastiques, puis on étudiera l'anisotropie sismique.

III.1- La variation des constantes élastiques en fonction de la pression :

A basse pression, la Stishovite prend la structure tétragonal. On a six constantes élastiques qui ne sont pas nulles. Dans la phase orthorhombique de type ($CaCl_2$) neuf constantes sont non nulles.

Nous allons concentrer notre étude sur les trois valeurs c_{11}, c_{12} et c_{44} parce qu'ils les autre constantes augmente dans les deux phases.

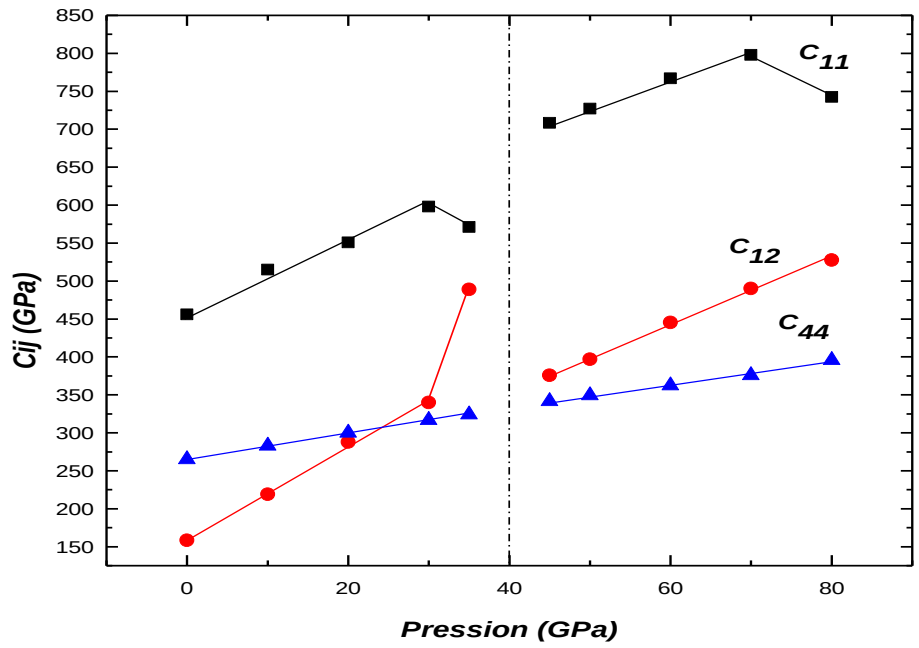


Figure 19 : La variation des constantes élastiques c_{ij} en fonction de la pression pour SiO_2.

Tableau (III.1) : Les valeurs des constants élastiques (en GPa) de la phase Stishovite à 0 GPa

Méthodes	*C11 (GPa)*	*C33 (GPa)*	*C44 (GPa)*	*C66 (GPa)*	*C12 (GPa)*	*C23 (GPa)*
Notre travail (GGA)	*456*	*792*	*265*	*323*	*158*	*177*
LAWP P[18]	*456*	*807*	*254*	*325*	*216*	*195*
LAPW [25]	*452*	*776*			*242*	*221*
PIB [26]	*623*	*977*	*347*	*424*	*450*	*146*
Exp [27]	*453*	*776*	*252*	*302*	*211*	*203*

Dans la phase Stishovite, c_{11} augmente lentement avec la pression jusqu'à 35 GPa puis il diminue, il y a une compression où dilatation suivant l'axe X. C'est la même observation avec c_{22}, car dans la structure tétragonale $c_{11} = c_{22}$. Dans cette phase, nous observons une augmentation plus rapide de la constante loin-diagonale c_{12}.

La valeur de la constante de cisaillement c_{44} augmente linéairement, avec une pente très faible dans tout l'intervalle de pression, ceci indique que les axes principaux gardent les mêmes directions.

A 40 GPa une transition de phase apparait, la structure de Stishovite se transforme en une phase orthorhombique SiO_2 de type $CaCl_2$.

Nous pensons que La diminution de la valeur de c_{11}, à l'intervalle [70,80GPa], revient à une autre transition de phase, c'est la transition SiO_2 de la structure orthorhombique de type $CaCl_2$ à la structure de type colombite d'après Karki et al [11].

Les valeurs des constantes élastiques de la Stishovite à la pression 0 GPa sont en très bon accord avec des données expérimentales de Weidner et al [26], et les résultats de Cohen et al [25], Comme montré dans le Tableau (III,1).

III.2- Calcul le module du cisaillement G

Le module d'incompressibilité B représente la résistance du cristal, lors de l'application des contraintes, pour conserver son volume, alors que le module G de cisaillement représente la résistance à la déformation plastique.

Pour déduire les propriétés polycristallines du matériau considéré, il faut moyenner le module de cisaillement *G* qui est directement relié à la vitesse de propagation des ondes. On utilise différentes hypothèses [28].

- l'hypothèse de Voigt : on suppose la continuité des déformations, c'est-à-dire que les grains s'emboîtent parfaitement mais que des discontinuités de contraintes peuvent apparaître aux interfaces.
- l'hypothèse de Reuss: on suppose la continuité des contraintes, c'est-à-dire que les contraintes sont uniformes à travers l'agrégat mais que les grains ne s'emboîtent pas parfaitement.
- l'hypothèse de Hill: on utilise une simple moyenne géométrique de quantité calculée dans le cas Reuss et Voigt:

$G_H = (G_R+G_V)/2$.

L'expérience montre que les résultats numériques obtenus par l'hypothèse de Hill ne sont généralement pas éloignés des valeurs expérimentales. Il existe plusieurs autres méthodes pour calculer cette quantité, qui sont détaillées dans les ouvrages ou les publications spécialisées.

a) Pour la symétrie tétragonale :

Pour la symétrie tétragonale (P42/mnm), le module de cisaillement d'après Voigt [29] est :

$$G_V = \frac{1}{5}\left(\frac{c_{11}+c_{12}-4c_{13}+2c_{33}}{6}+\frac{c_{11}-c_{12}}{2}+2c_{44}+c_{66}\right) \qquad \text{(III .1)}$$

Le module de cisaillement d'après Reuss est :

$$G_R = \left[\frac{1}{5}\left(\frac{6\left[(c_{11}+c_{12})+4c_{13}+c_{33}\right]}{(c_{11}+c_{12})c_{33}-2c_{13}^2}+\frac{1}{c_{11}-c_{12}}+\frac{2}{c_{44}}+\frac{1}{c_{66}}\right)\right]^{-1} \qquad \text{(III .2)}$$

Donc :

$$G_H = \frac{1}{2}(G_V + G_R) \qquad \text{(III .3)}$$

b) Pour la symétrie orthorhombique :

Pour la symétrie orthorhombique, le module de cisaillement d'après Voigt [30] est:

$$G_V = \frac{1}{15}(c_{11}+c_{22}+c_{33}-c_{12}-c_{13}-c_{23})+\frac{1}{5}(c_{44}+c_{55}+c_{66}), \qquad \text{(III .4)}$$

Le module de cisaillement d'après Reuss[31] est :

$$G_R = \frac{15}{4(s_{11}+s_{22}+s_{33})-4(s_{12}+s_{13}+s_{23})+3(s_{44}+s_{55}+s_{66})}, \qquad \text{(III .5)}$$

Où S_{ij} sont les constants élastiques de déformation.

Les modules de cisaillement peuvent être rapprochés par la moyenne de Hill est [32] :

$$G_H = \frac{1}{2}(G_V + G_R) \qquad \text{(III .6)}$$

III.3-La variation des modules d'incompressibilité B et de cisaillement G en fonction de la pression:

Dans la pahse Stishovite, B (module d'incompressibilité) augmente avec la pression jusqu'à 35 GPa.. C'est la même observation avec le module G mais l'augmentation est plus faible comme le montre la figure 20.

L'instabilité des modules d'incompressibilité B et de cisaillement G observée autour de 40 GPa, revient à la transition de phase tétragonale (Stishovite) à la phase orthorhombique de type $CaCl_2$ de SiO_2.

Nous pensons que les valeurs de B constantes à l'intervalle [70,80GPa] revient à une autre transition de phase, c'est la transition de la structure orthorhombique de type $CaCl_2$ à la structure de type colombite de SiO_2 d'après [19].

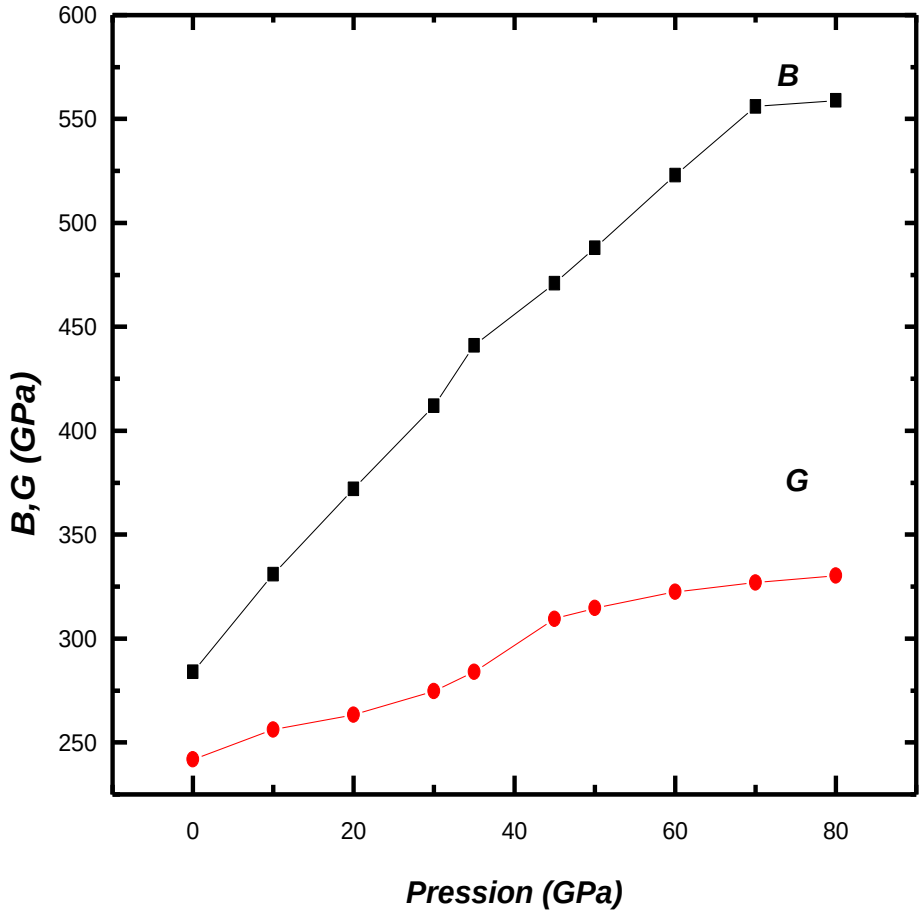


Figure 20 : La variation de module d'incompressibilité B et module de cisaillement G en fonction de pression pour SiO_2.

Comparaison avec des autres résultats

Tableau (III.2) : Dans le tableau suivant, nous donnons une comparaison de nos résultats avec d'autres travaux:

Méthodes	*B (GPa)*	*G(GPa)*
Notre travail (GGA)	***284***	***241***
LAWPP [18]	***310***	***232***
LAPW [25]	***324***	
Exp [27]	***316***	***226***

Les valeurs du module d'incompressibilité B et du module de cisaillement G du Stishovite à la pression 0 GPa sont en accord avec les données expérimentales de Weidner et al [27], et les résultats de Cohen et al [25], Comme montré dans le Tableau (III,2).

III.4- Les vitesses sismiques de SiO_2 :

On considère que notre milieu est isotrope et homogène. Dans ce cas nous pouvons calculer les vitesses Vp et Vs en utilisant l'équation du mouvement des ondes élastiques dans un solide. Il y a :

Une onde longitudinale notée P, avec une polarisation parallèle á la direction de propagation, de vitesse V**p**.

Deux ondes de cisaillement, notée ***S*** avec des polarisations transversales á la direction de propagation, de vitesse Vs

Les vitesses de propagation des ondes sont données par la relation suivante :

$$Vp = \sqrt{\frac{B + \frac{4}{3}G}{\rho}}, \qquad \text{(III .7)}$$

$$Vs = \sqrt{\frac{G}{\rho}}, \qquad \text{(III.8)}$$

Où B est le module d'incompressibilité, G le module de cisaillement et ***ρ*** la densité.

L'interprétation des variations des vitesses est basée sur l'effet de la pression sur les propriétés élastiques de SiO_2, car l'effet de la température sur ces constants est négligeable devant la pression.

Dans le figure 21, nous présentons la variation des vitesses sismiques en fonction de la pression.

D'après la figure 21, les valeurs de la vitesse Vp sont très importantes.

Lorsque d'un séisme, les ondes sismiques, qui se propagent avec ces vitesses, peuvent provoquer par conséquence des dégâts importants.

Ce résultat est interprété par :

La valeur de module d'incompressibilité de SiO_2 est très grande. Plus un corps possède une difficulté à la compression, plus l'onde se propage vite dans ce minéral.

La densité ρ de notre pole SiO_2 est faible par rapport aux autres oxydes. Plus un corps est dense, plus il est difficile à le mettre en mouvement, l'onde se propage alors moins vite.

Mathématiquement, ρ étant en dénominateur, la vitesse d'onde est inversement proportionnelle à la racine carrée de la masse volumique.

Pour le cas des ondes S, la vitesse sismique à faible pression est très grande en sismologie. Cela est du au fait que le module de cisaillement G qui est très grand. Plus un corps est difficile à se déformer élastiquement (G grand), plus il revient vite à sa position initiale, c'est-à-dire les ondes de cisaillement se propagent plus vite.

Pour le cas de la densité, c'est la même remarque avec le cas des ondes P.

L'augmentation des valeurs de la vitesse Vp est importante par rapport à celles de Vs qui se propagent plus lentement, car la vitesse des ondes P est proportionnelle à la racine carrée du module d'incompressibilité B, et le module de cisaillement G, tandis que la vitesse des ondes S est proportionnelle à la racine carrée de module de cisaillement G.

Nos résultats obtenus sont comparables avec ceux des autres travaux, nous citons par exemple les travaux de Karki et al, avec une petite différence que nous expliquons par le choix des conditions initiales.

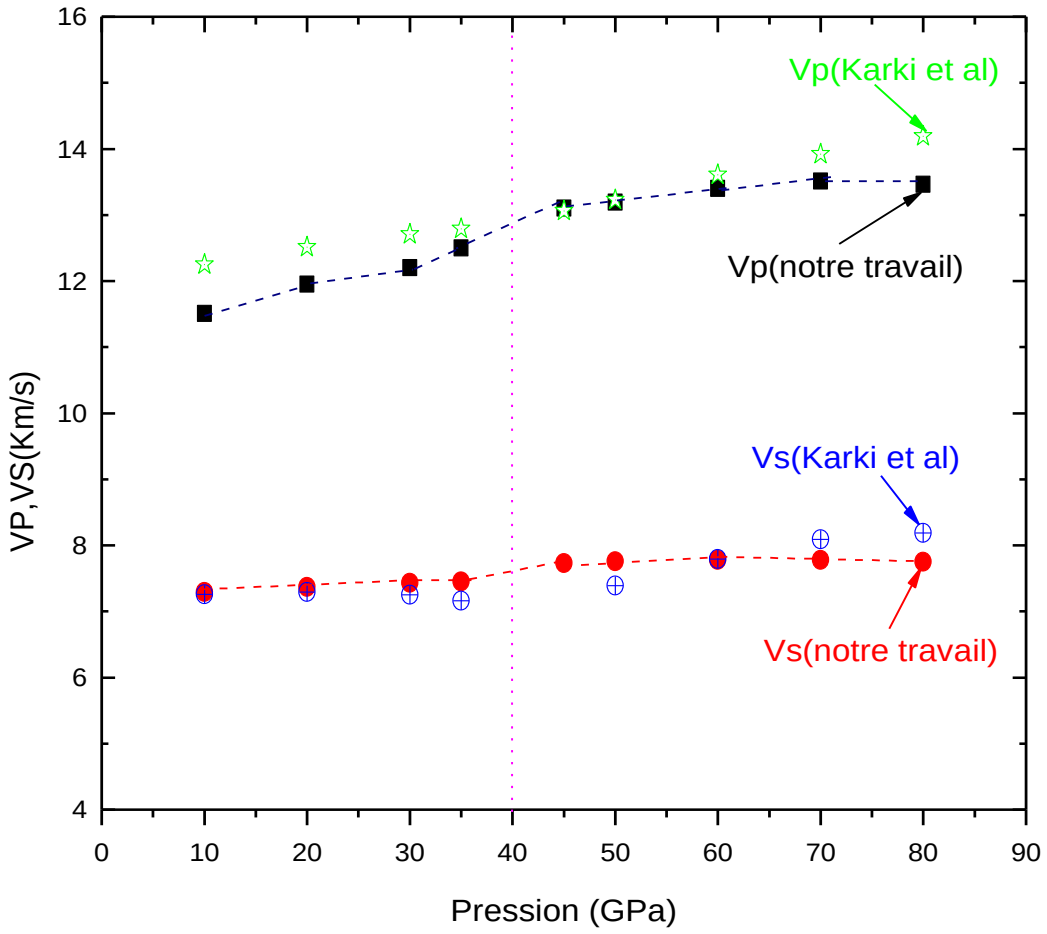


Figure 21 : La variation des vitesses sismiques Vp et Vs en fonction de la pression et comparées avec les résultats théoriques de Karki et al [10].

III.5- Anisotropie sismique de SiO_2 :

Comme dans le cas des vitesses de propagation des ondes élastique qui dépendent de la direction de propagation, dans le cas général, donc il existe une anisotropie.

Dans le cas d'un monocristal, on peut calculer l'anisotropie des ondes sismiques ***P*** et ***S*** selon les relations suivantes [32] :

$$Ap = \frac{Vp\max - Vp\min}{Vp}$$
$$As = \frac{Vs\max - Vs\min}{Vs} \qquad \text{(III .9)}$$

Où V_P et V_S sont les vitesses moyennées sur toutes les directions de propagation.

Vp_{max} est la vitesse, d'onde P, maximale par rapport aux vitesses de propagation dans les autres plans ;

Vp_{min} est la vitesse, d'onde P, minimale par rapport aux vitesses de propagation dans les autres plans ;

Vs_{max} est la vitesse, d'onde S, maximale par rapport aux vitesses de propagation dans les autres plans ;

Vs_{min} est la vitesse, d'onde S, minimale par rapport aux vitesses de propagation dans les autres plans ;

Avant d'étudier l'anisotropie sismique, il est demandé de calculer les vitesses sismiques suivants les directions en utilisant l'expression du tenseur de Christoffel $\Gamma_{il} = c_{ijkl}\, n_j\, n_k$,

En développant la somme sur les indices j et k, nous trouvons :

$$\Gamma_{il} = c_{i11l}n_1^2 + c_{i22l}n_2^2 + c_{i33l}n_3^2 + (c_{i12l} + c_{i21l})n_1n_2 + (c_{i13l} + c_{i31l})n_1n_3 + (c_{i23l} + c_{i32l})n_2n_3.$$

D'où les termes :

$$\Gamma_{11} = c_{11}n_1^2 + c_{66}n_2^2 + c_{55}n_3^2 + 2c_{16}n_1n_2 + 2c_{15}n_1n_3 + c_{56}n_2n_3$$

$$\Gamma_{12} = c_{16}n_1^2 + c_{26}n_2^2 + c_{45}n_3^2 + (c_{12} + c_{66})n_1n_2 + (c_{14} + c_{56})n_1n_3 + (c_{46} + c_{25})n_2n_3.$$

$$\Gamma_{13} = c_{15}n_1^2 + c_{46}n_2^2 + c_{35}n_3^2 + (c_{14} + c_{56})n_1n_2 + (c_{13} + c_{55})n_1n_3 + (c_{36} + c_{45})n_2n_3.$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}n_1^2 + c_{22}n_2^2 + c_{44}n_3^2 + 2c_{26}n_1n_2 + 2c_{46}n_1n_3 + c_{24}n_2n_3$$

$$\Gamma_{23} = c_{56}n_1^2 + c_{24}n_2^2 + c_{34}n_3^2 + (c_{46} + c_{25})n_1n_2 + (c_{36} + c_{45})n_1n_3 + (c_{23} + c_{44})n_2n_3.$$

$$\Gamma_{33} = c_{55}n_1^2 + c_{44}n_2^2 + c_{33}n_3^2 + 2c_{45}n_1n_2 + 2c_{35}n_1n_3 + c_{34}n_2n_3$$

$\Gamma_{21} = \Gamma_{12}$ $\Gamma_{31} = \Gamma_{13}$ $\Gamma_{32} = \Gamma_{23}$

a)Système tétragonale :

Compte tenu les constantes élastiques de tétragonale, les éléments du tenseur de Christoffel sont :

$$\Gamma_{11} = c_{11}n_1^2 + c_{66}n_2^2 + c_{55}n_3^2$$

$$\Gamma_{12} = c_{16}(n_1^2 + n_2^2) + (c_{12} + c_{66})n_1n_2$$

$$\Gamma_{13} = (c_{13} + c_{44})n_1n_3$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}n_1^2 + c_{11}n_2^2 + c_{44}n_3^2 \qquad \text{(III . 10)}$$

$$\Gamma_{23} = (c_{13} + c_{44})n_2n_3.$$

$$\Gamma_{33} = c_{44}(n_1^2 + n_2^2) + c_{33}n_3^2$$

Le module c_{16} est nul pour les cristaux appartenant à la symétrie p42/mnm, lorsque la propagation est dans un plan perpendiculaire à l' axe quaternaire :

$$n_1 = \cos\varphi, n_2 = \sin\varphi, n_3 = 0 \Rightarrow \Gamma_{13} = \Gamma_{23} = 0. \qquad \text{(III . 11)}$$

Donc l'équation (III .10) est devenue :

$$\Gamma_{11} = c_{11}\cos^2\varphi + c_{66}\sin^2\varphi$$

$$\Gamma_{12} = c_{16}\cos 2\varphi + (c_{12} + c_{66})\frac{\sin 2\varphi}{2} \qquad \text{(III . 12)}$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}\cos^2\varphi + c_{11}\sin^2\varphi$$

$$\Gamma_{33} = c_{44}$$

L'onde transversale, polarisée suivant OX_3, se propage à la vitesse:

$$V_3 = \sqrt{c_{44}/\rho} \qquad \text{(III . 13)}$$

Les deux autres ondes polarisées dans le plan (100) : onde quasi-longitudinal et onde quasi-transversale, se propagent avec des vitesses V1 et V2 données par la formule :

$$2\rho V_{\frac{1}{2}}^2 = \Gamma_{11} + \Gamma_{22} \pm \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4(\Gamma_{12})^2}, \qquad \text{(III . 14)}$$

En remplaçant les Γ par leur expression en fonction de φ :

$$2\rho V_{\frac{1}{2}}^2 = c_{11} + c_{66} \pm \sqrt{(c_{11} - c_{66})^2 \cos^2 2\varphi + (c_{12} - c_{66})^2 \sin^2 2\varphi}. \qquad \text{(III .15)}$$

Tableau (III.3) : Dans le tableau suivant, nous donnons les vitesses pour quelques cristaux appartenant à la symétrie p42/mnm de Stishovite :

Direction de propagation	**polarisation**	**Vitesse**

[100]	**[100]L** **[010](T)** **[001](T)**	$\sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{66}}{\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[110]	**[110](L)** **[1$\bar{1}$ 1](T)** **[001](T)**	$\sqrt{\frac{c_{11}+c_{12}+2c_{66}}{2\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{11}-c_{12}}{2\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[001]	**[001](L)** **plan (001)(T)**	$\sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$

b) Système orthorhombique :

Compte tenu les constantes élastiques de orthorhombique, les éléments du tenseur de Christoffel sont :

$$\Gamma_{11} = c_{11}n_1^2 + c_{66}n_2^2 + c_{55}n_3^2$$

$$\Gamma_{12} = (c_{12} + c_{66})n_1 n_2$$

$$\Gamma_{13} = (c_{13} + c_{55})n_1 n_3$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}n_1^2 + c_{11}n_2^2 + c_{44}n_3^2 \qquad \text{(III .16)}$$

$$\Gamma_{23} = (c_{23} + c_{44})n_2 n_3.$$

$$\Gamma_{33} = c_{55}n_1^2 + c_{44}n_2^2 + c_{33}n_3^2$$

Lorsque le propagation dans un plan perpendiculaire à l'axe quaternaire, nous obtenons :

$$n_1 = \cos\varphi, n_2 = \sin\varphi, n_3 = 0 \Rightarrow \Gamma_{13} = \Gamma_{23} = 0. \qquad \text{(III .17)}$$

L'équation (III .16) devient :

$$\Gamma_{11} = c_{11}\cos^2\varphi + c_{66}\sin^2\varphi$$

$$\Gamma_{12} = (c_{12} + c_{66})\frac{\sin 2\varphi}{2}$$

$$\Gamma_{22} = c_{66}\cos^2\varphi + c_{11}\sin^2\varphi \qquad \text{(III .18)}$$

$$\Gamma_{33} = c_{55}\cos^2\varphi + c_{44}\sin^2\varphi$$

Tableau (III.4) : Le tableau suivant donne les vitesses pour les cristaux orthorhombiques :

Direction de propagation	polarisation	Vitesse
[100]	**[100]L**	$\sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$
	[010](T)	$\sqrt{\frac{c_{66}}{\rho}}$
	[001](T)	$\sqrt{\frac{c_{55}}{\rho}}$

[110]	**[110](L)** **[1$\bar{1}$ 1](T)** **[001](T)**	$\sqrt{\frac{c_{11}+c_{12}+2c_{66}}{2\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{11}-c_{12}}{2\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{44}+c_{55}}{2\rho}}$
[001]	**[001](L)** **plan (001)(T)**	$\sqrt{\frac{c_{33}}{\rho}}$ $\sqrt{\frac{c_{55}}{\rho}}$

III.6- La variation de l'anisotropie sismique de SiO_2 en fonction de la pression

Tableau (III.5) : les anisotropies sismiques de SiO_2.

P(GPa)	A_P	A_{S1}	A_{S2}
0	11.77	40.11	28.34
10	14.15	36.98	22.82
20	16.96	56.79	39.83
30	18.58	61.71	43.13
35	21.84	69.37	47.53
40	26.28	109.47	83.18
45	17.14	49.10	17.30
50	17.55	50.95	17.80
60	18.18	54.31	18.96
70	18.59	57.40	19.51
80	22.96	72.99	23..86

Dans le tableau nous avons représente les anisotropies sismiques, à l'intervalle de pression de 0 GPa jusqu'à 80 GPa, pour les vitesses longitudinales et les vitesses de cisaillements.

Pour cet intervalle, les couches principales sont trois couches ; la croûte terrestre, le manteau supérieur et le manteau inférieur.

Dans le schéma suivant, nous présentons la variation des anisotropies sismiques de notre travail et le travail de Karki et al en fonction de la pression :

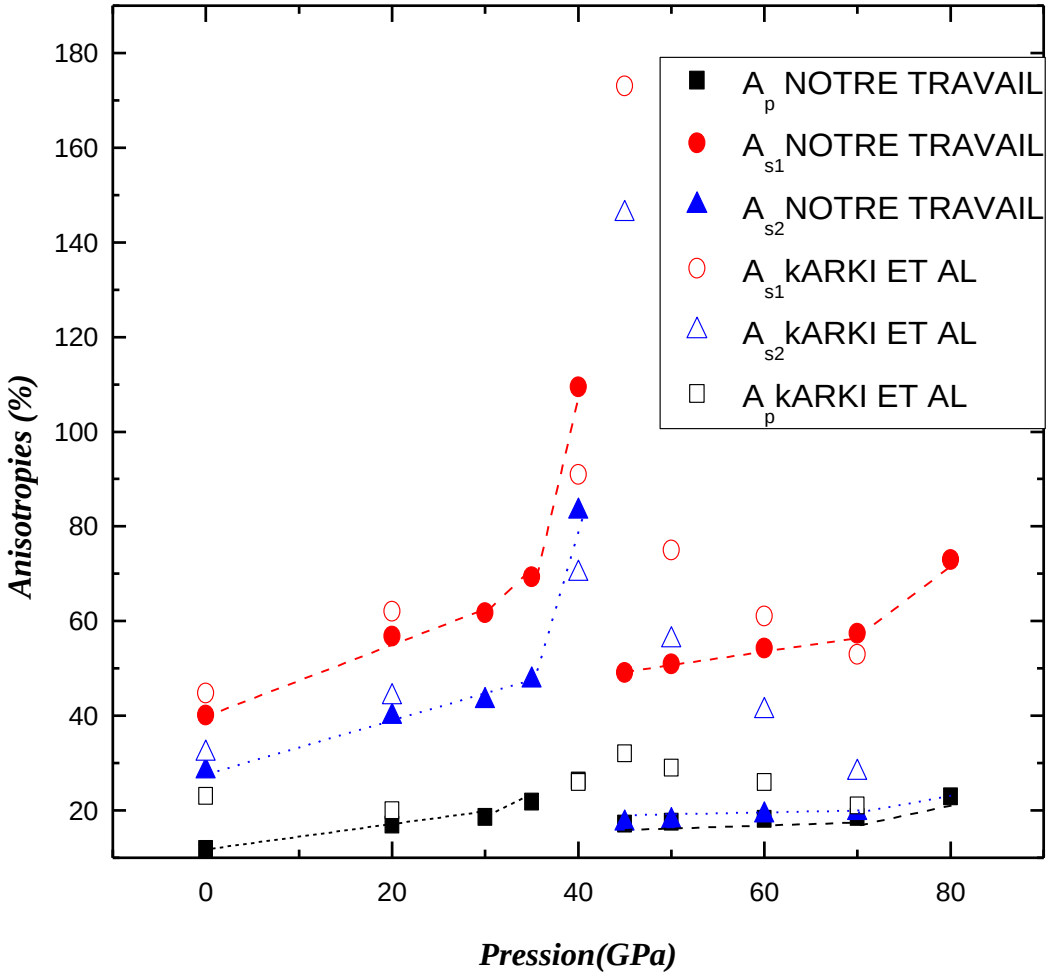


Figure 22 : Les anisotropies des vitesses sismiques A_P,A_{S1},A_{S2} , en fonction de la pression, (A_P) pour l'anisotropie de vitesse longitudinale (points noir), et (A_{S1}) , (A_{S2}) anisotropie des vitesses de cisaillement (points bleu) ,(points rouge) de la silice.

Les relations précédentes définissent l'anisotropie sismique puisqu'il y a deux vagues de cisaillement se propageant avec des vitesses différentes pour une direction donnée de propagation.

La silice est importante pour montrer, que l'anisotropie des ondes S est plus forte que l'anisotropie des ondes P dans les deux phases (fig.22). Elle devient fortement anisotropique autour du point de transition (40 GPa).

Les vitesses des ondes longitudinales et de cisaillements changent de 11.77 et 40.11 % respectivement à la pression nulle tandis qu'elles changent de 26.28 % et 109.47 % respectivement près du point de la transition stishovite à $CaCl_2$ (à 40 GPa).

Les deux constantes c_{11} et $(c_{11} - c_{12})$ s'amortissent fortement dans la proximité du point de transition de la phase Stishovite à $CaCl_2$ ($c_{11} - c_{12}$) disparaît réellement autour du point de transition 40 GPa), correspondant à des vitesses des ondes P et S très réduites dans les directions [100] et [110], respectivement, et par conséquent entraînant l'anisotropie d'être autour 40 GPa qui est très forte.

Donc pour l'intervalle de pression [45,80 GPa], l'anisotropie des vitesses sismiques est très petite dans les mêmes directions précédentes.

Les observations sismologiques

La 1ère observation

D'après la figure 17 présentée dans le chapitre II, on remarque qu'il n'y a pas de changement considérable dans l'allure de la courbe du volume au point de transition de phase (il n'y a pas de saut, généralement observé en ces points de transition). Le rapport des volumes V/V_0 de Stishovite est le même que pour la phase $CaCl_2$.

D'après Kesson et al [34], cette variation linéaire de volume en fonction de la pression ne nous permet pas d'acquérir le changement de volume lors de transition de phase (Stishovite vers la phase $CaCl_2$) qui existe car elle est indétectable sismologiquement. Cela nous exige de chercher encore une méthode qui nous permet de déterminer cette transition à 40 GPa, sans utiliser les variations des volumes.

La 2ème observation

Le problème rencontré dans la première observation, c'est –à- dire la variation de volume, qui nous a empêché de savoir la trace laissée par la transition de phase dans le manteau inférieur, une autre méthode qui se base sur l'utilisation des vitesses sismiques des ondes longitudinales P et transversales S, lors de leurs propagations dans le manteau inférieur, pour montrer que la transition de phase nous permet de savoir l'état d'existence de SiO2 dans cette couche de terre étudiée.

Au voisinage de la transition de phase stishovite à $CaCl_2$, dû à l'instabilité des anisotropies, les vitesses des ondes P et S qui diminuent entre 26.2 et 109.5%, respectivement, cela indique que si la silice libre existe dans le manteau inférieur, il devrait mener à une discontinuité sismique observable près d'une profondeur de 1180 kms.

La 3ème observation

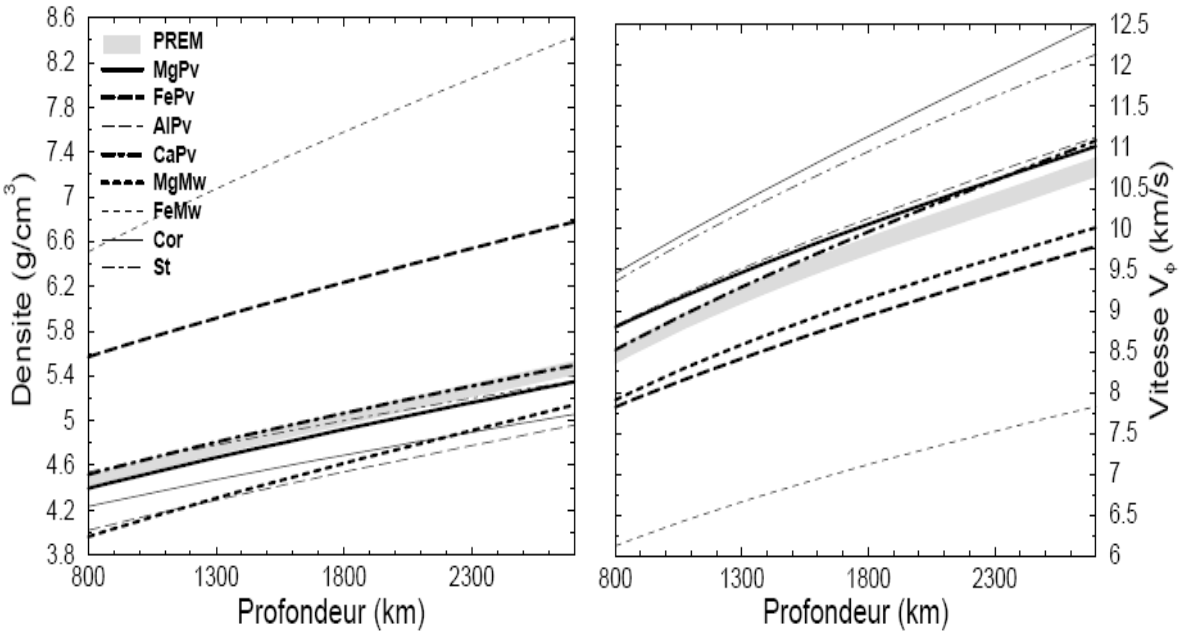


Figure 23 : Variations de densité des éléments de manteau inférieure en fonction de la profondeur [33]

.

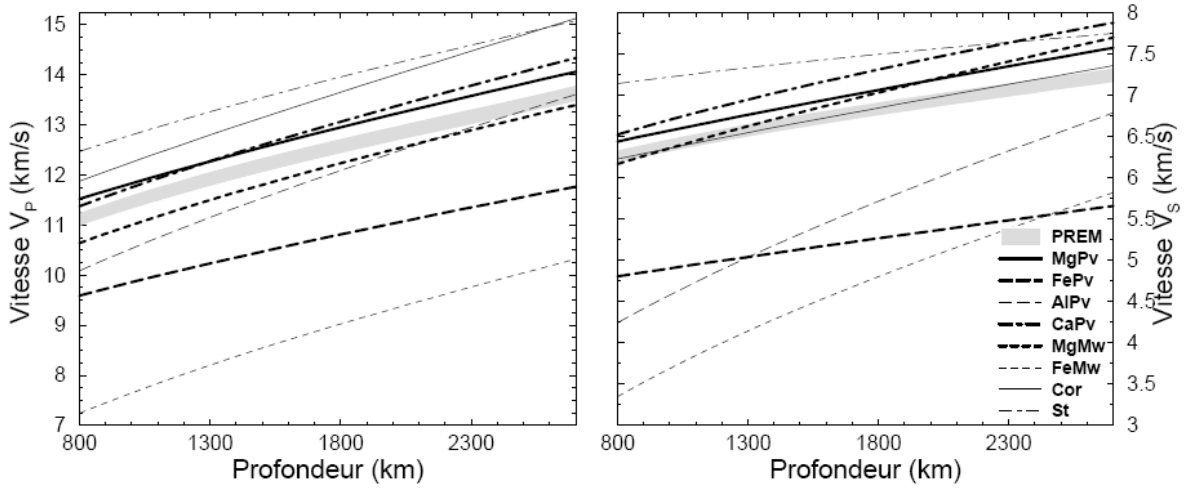


Figure 24 : Variations de vitesse Vp et Vs des éléments de manteau inférieure en fonction de la profondeur [33].

Nous observons, d'après la figure présentée, que les vitesses des ondes longitudinales P dans SiO_2 dans le manteau inférieur sont les plus grandes par rapport aux autres oxydes : MgO, CaO, Al_2O_3 et le modèle de manteau inférieur PREM.

C'est la même chose pour les vitesses des ondes transversales S, où nous trouvons que ces vitesses sont les plus importantes que dans le cas de la propagation des ondes dans les autres oxydes qui sont cités pour le cas des ondes P.

Cela revient à la faible densité de SiO_2 par rapport aux autres oxydes, et les modules d'incompressibilité B et de cisaillement G de cet élément qui sont considérables.

Conclusion:

D'après l'étude de SiO_2, dans ce mémoire, où nous avons étudié les propriétés élastiques de ce pôle dans le manteau inférieur, nous avons déduit les vitesses sismiques des ondes de compression P et celles de cisaillement S qui se propagent dans cet élément et aussi un calcul des anisotropies sismiques.

Nous avons trouvé qu'il y a une transition de phase de SiO_2 au niveau de la pression de 40 GPa. Ce minéral, à cette pression, change de la Stishovite ver la phase de type $CaCl_2$.

D'après notre étude et des autres références, Stishovite prend une variation de volume indétectable sismologiquement.

La densité ρ de Stishovite à une valeur moyenne relativement aux autres pôles du manteau inférieur. Comme ça été confirmé qu'elle augmente proportionnellement avec la pression. Par contre le module de compressibilité "B" de Stishovite est considérable.

La Stishovite prend des valeurs des vitesses sismiques importantes. Egalement les résultats des autres méthodes théoriques et expérimentaux confirment que les vitesses sismiques de Stishovite sont plus grandes par rapport aux autres pôles.

Les valeurs des vitesses sismiques dépendent, inversement avec la densité et proportionnellement avec les modules de compressibilité et de cisaillement.

D’après l’étude d’anisotropie sismique de Stishovite, il est clair qu’il y a une variation de 20.6 % de la vitesse Vp, et de 109.5 % de la vitesse Vs. Cette variation est très importante.

Si la silice existe d’une manière libre dans le manteau inférieur, cella indique qu’il y a une discontinuité sismique observable dans le manteau inférieur à 40 GPa qui correspond à une profondeur de 1180 Km.

La méthode suivie dans ce mémoire nous a permis d’étudier un pôle pur dans le manteau inférieur, SiO_2. Cette méthode nous permettra d’étudier les autres oxydes par la détermination, des propriétés élastiques, et les vitesses sismiques dans les constituants de la croûte terrestre pour donner les images tomographiques, qui représentent la variation des vitesses sismiques dans cette couche.

Les références

[1] Dziewonski, A. and D. Anderson (1981). Preliminary reference Earth model. Phys. Earth

Planet. Inter. 25, p 297.

[2] Grand, S., R. van der Hilst, and S. Widiyantoro (1997). Global seismic tomography a snapshot of convection in the earth. GSA Today 7 (4),p 1.

[3] Deuss, A. and J. Woodhouse (2002). A systematic search for mantle discontinuities using SS-precursors. Geophysical Research. Lett. 29, p90.

[4] Deuss and Woodhouse (2004). The nature of the Lehmann discontinuities from its sismmological Clapeyron slopes. Earth planet. Science. Lett. 225, p295.

[5] Kawakatsu, H. and F. Niu (1994). Seismic evidence for a 920-km discontinuity in the mantle. Nature 371, p 301.

[6] Kellogg, L., B. Hager, and R. van der Hilst (1999). Compositional stratification in the deep mantle. Science 283, p 1881.

[7] Castle, J. and R. van der Hilst (2003). Searching for seismic scattering off mantle interfaces between 800 km and 2000 km depth. J. Geophysical Research. Vol 108, p 2095.

[8] Teter, D. M., Hymley, R. J., Kresse, G.and Hafrers ,J .(1998) High pressure polymorphisme in silica, Physical Review lett,80, p 2137.

[09] Murakami, T., K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata, and Y. Ohishi (2004). Post-perovskite phase transition in MgSiO3. Science 304, p 855.

[10] Karki, B. B., M. C. Warren, L. Stixrude, G. J. Ackland, and J. Crain,(1997), Ab initio studies of high-pressure structural transformations in silica, Physical Review. ***B, 55***, p 3465.

[11] Karki, B. B., G. J. Ackland, and J. Crain,(1997), Elastic instabilities rom ab-initio stress-strain relations, J. Phys. vol 9, p 8579.

[12] Nancy L.Ross, Jin-Fu Shn, Robert M. Hazzen (1990) , Hight-pressure crystal chemistry of stishovite. American Mineralogiste, vol 75, p 739.

[13] Joseph Muscat, Varghese Swamy, and Nicholas M. Harrisson (2002). First-principe calculation of the stability of TiO_2. Physical Review B, vol 65, p 224112.

[14] Shigeaki Ono , Kei Hirose, Motohiko Murakami, and Maiko Isshiki,(2002) Poststishovite phase boundary in SiO2 determined by in situ X-ray observations .Earth and Planetary Science lett 197, p 187.

[15] Karki, B. B., L. Stixrude, and J. Crain, (1996), Ab initio elasticity of three high-pressure polymorphs of silica, Geophysical Research. Lett., 24, p 3269.

[16] Kathleen J.Kingma, Ronald E. Cohen, Russell J.Heemley and Kwang Mao, (1995), Tansformation of stishovite to a denser phase at lower-mantel pressure. Letters to nature. Vol

374.

[17] Anatoly B, et al (1997).A new hight –pressure silica phase obtained by molecular dynamies – repley, American Meneralogist, vol 82, p 1043.

[18] Segall M. D., Lindan P. J. D., Probert M. J., Pickard C. J., Hasnip P. J., Clark S. J.,and Payne M. C,(**2002**), J. Phys ,Lett**,** 14, p 2717.

[19] Hemley R. J., Mao H. K. and Gramsch S. A., (2000), Pressure-induced transformations in deep mantle and core minerals, Mineralogical Magazine, , Vol. 64(2), p 157.

[20] Sheng-Nian Luo, J. L. Mosenfelder, P. D. Asimow, and Thomas J. Ahrens1(2002) , Direct shock wave loading of Stishovite to 235 GPa:Implications for perovskite stability relative to anoxide assemblage at lower mantle conditions , Geophysical research lett, vol. 29.

[21] Andrault, D., G. Fiquet, F. Guyot, and M. Hanfland, (1998), PressureinducedLandau-type transition in stishovite, Science,vol 282, p 720.

[22]Anatoly B. Et al (1997). Anew high-pressure silica phase obtaind by Reply, American Minaralogist, Vol 82, p 1043.

[23] Dahlen, F. A., and J. Tromp,(1998), Theoretical Global Seismology,Princeton Univ. Press, Princeton, N. J.

[24] Birch, F.(1961), The velocity of compressional waves in rocks to 10kilobars, part 2, J. Geophysical Research , Lett 66, p 2199.

[25] Cohen, R. E.(1991) , Bonding and elasticity of stishovite SiO2 at high pressure: Linearised augmented plane wave calculations, Am. Mineral., Lett 76, p 733.

[26] Weidner, D. J., and M. T. Vaughan,(1982), Elasticity of pyroxenes: Effects of composition versus crystal structure, J. Geophysical Research. Lett, 87, p 9349.

[27] weidner, D. J., J. D. Bass,A.E. Ringwood, and W.Sinclair,(19882) The single-crystal elastic moduli of sisthovite, J. Geophysical Research. Lett,87, p 4740.

[28] Cohen, R. E.(1987), Calculation of elasticity and high-pressure instabilities in corundum and stishovite with the potential induced breathing model, Geophysical Research. Lett., 14, p 37.

[29] Nye J. F.,(1957), Physical Properties of Crystals (Oxford Science Publications, Oxford, England).

[30] Voigt W., Lehrbuch der Kristallphysik (Taubner, Leipzig, 1928).

[31] Reuss A., and Z. Angew Z., (1929). Math. Mech. Vol 9, p 49 .

[32] Hill R., (1952), Proc. Phys. Soc. vol **65**, p 350 .

[33] Brown, J. and T. Shankland (1981). Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles.J. Geophysical Research. Lett 66, p 579.

[34] Kesson S, E .J, D. Fitz Gerald and J, M. Shelley, (1998), Mineralogy and dynamic of pyrolite of lower mantel, Nature, Lett 393, p 252.