

Physics and Chemistry of the Earth
Mineralogy Homework
P-V-T equation of state of bridgmanite

Un des buts de ce devoir est de vous faire réfléchir sur un jeu de données. Pour certaines questions, il n'existe pas de réponse unique, mais plusieurs. Il vous suffit de confronter les données et vos connaissances pour proposer des hypothèses. Je réfléchirai principalement à la manière dont vous justifiez vos réponses.

Une expérience HP-HT a été réalisée sous rayonnement synchrotron. Un mélange d'oxydes avec stœchiométrie bridgmanite est chargé dans un LHDAC et mis dans des conditions P et T croissantes. Les diagrammes de diffraction des rayons X, acquis à HP et LT ou HT, ont été obtenus et traités pour obtenir les paramètres de réseau. Les résultats sont donnés dans le tableau 1 (joint sous forme de fichier xls).

Tableau 1 : Conditions PT des expériences et paramètres de cellule unitaire obtenus de la bridgmanite

P (Gpa)	P (Gpa)ruby	T(K)	PerovskiteMgSiO ₃			V
			a (Å)	b (Å)	c (Å)	
26.53 (20)	28.00 (20)	293 (5)	4.6496 (10)	4.8010 (5)	6.6896 (26)	
37.46 (46)	29.20 (20)	2402 (70)	4.6493 (12)	4.8051 (5)	6.7023 (9)	
32.55 (68)	30.10 (25)	1618 (103)	4.6472 (6)	4.8007 (6)	6.6986 (8)	
28.52 (20)	30.10 (25)	293 (5)	4.6218 (11)	4.7860 (5)	6.6713 (10)	
34.88 (73)	30.10 (25)	2070 (12)	4.6547 (23)	4.8103 (16)	6.7053 (13)	
40.26 (113)	31.00 (25)	2668 (171)	4.6714 (13)	4.8014 (11)	6.6992 (17)	
31.00 (20)	31.00 (25)	293 (5)	4.6371 (10)	4.7817 (7)	6.6642 (18)	
45.11 (20)	43.00 (30)	293 (5)	4.5553 (14)	4.7368 (11)	6.5740 (22)	
52.88 (55)	43.30 (30)	1916 (83)	4.5716 (12)	4.7443 (10)	6.5881 (18)	
45.90 (30)	43.00 (30)	293 (5)	4.5571 (9)	4.7336 (9)	6.5715 (15)	
51.52 (68)	45.50 (30)	2007 (103)	4.5774 (12)	4.7417 (15)	6.5958 (20)	
55.73(111)	46.00 (30)	2269 (169)	4.5632 (23)	4.7346 (26)	6.5804 (27)	
48.33 (30)	46.10 (30)	293 (5)	4.5313 (19)	4.7351 (10)	6.5626 (10)	
49.51 (30)	45.90 (30)	293 (5)	4.5395 (27)	4.7309 (15)	6.5501 (23)	
56.14 (62)	45.85 (30)	1972 (94)	4.5427 (17)	4.7407 (15)	6.5700 (26)	
49.59 (30)	45.70 (30)	293 (5)	4.5368 (14)	4.7260 (10)	6.5532 (14)	
57.53 (95)	45.70 (30)	2171 (144)	4.5484 (23)	4.7349 (20)	6.5649 (42)	
49.59 (30)	45.70 (30)	293 (5)	4.5483 (16)	4.7251 (17)	6.5508 (26)	
54.33 (35)	51.00 (35)	293 (5)	4.5145 (17)	4.7132 (13)	6.5311 (14)	
43.17 (30)	39.50 (30)	293 (5)	4.5576 (11)	4.7402 (9)	6.5935 (6)	
45.81 (47)	41.40 (30)	1759 (72)	4.5661 (19)	4.7657 (49)	6.6160 (16)	
47.34 (50)	41.30 (30)	1976 (77)	4.5835 (13)	4.7599 (10)	6.6219 (12)	
43.48 (30)	41.30 (30)	293 (5)	4.5576 (11)	4.7383 (10)	6.5860 (9)	
48.72 (106)	42.00 (30)	2103 (160)	4.5688 (15)	4.7548 (18)	6.6256 (13)	
43.90 (30)	43.90 (30)	293 (5)	4.5238 (16)	4.7439 (23)	6.5794 (25)	
47.49 (30)	46.20 (30)	293 (5)	4.5485 (23)	4.7238 (11)	6.5552 (14)	
293 (5)	4.7765 (11)	4.9278 (12)	6.8956 (14)	162.300 (110)	3.9256 (2)	

- 1) La bridgmanite étant une phase orthorhombique, calculez le volume du réseau. Extrapoler V_0 à $P=1$ bar. Comment se compare-t-il au volume cellulaire trouvé dans la littérature ?
- 2) Tracez les trois paramètres du réseau en fonction de P , en tenant compte de T . Commentez vos découvertes.
- 3) Tracer le volume cellulaire en fonction de la pression à température ambiante et élevée. Ajustez les données avec des courbes isothermes ajustées avec une équation d'état eulérienne de Birch-Murnaghan à déformation finie :

$$P = \frac{3}{2}K_0 \left[\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{7}{3}} - \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{5}{3}} \right] \left[1 + \frac{3}{4}(K'_0 - 4) \left[\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-\frac{2}{3}} - 1 \right] \right]$$

Avec K_0 , K'_0 , V_0 et V sont le module d'encombrement, sa dérivée de pression et le volume unitaire de maille à pression et température ambiantes T (en K). Nous supposons que K'_0 est égal et constant en 4.

- Expliquez les différentes étapes du programme python fourni dans les fichiers joints (vous pouvez le modifier si vous le souhaitez)
- Donner les valeurs de K_0 et V_0 à LT et HT. Commentez vos résultats et comparez-les à la littérature.

NB : vous pouvez également utiliser EoSfit si vous le souhaitez, alors vous commenterez également toutes les étapes : <http://www.rossangel.com/home.htm>

- 4) Les profils de densité et de K_T , non présentés ici, ont été modélisés en utilisant les paramètres thermoélastiques d'un mélange de 83 % de bridgmanite (obtenue par l'étude présentée) et de 17 % de feropericlasé. La comparaison entre ces profils de modèles et PREM est fournie dans la fig. 1. Commentez cette figure et fournissez des hypothèses sur l'inadaptation.

