



**HAL**  
open science

# Etude expérimentale de la diffusion thermique dans les monocristaux d'olivine et dans les roches du manteau supérieur

Benoit Gibert

## ► To cite this version:

Benoit Gibert. Etude expérimentale de la diffusion thermique dans les monocristaux d'olivine et dans les roches du manteau supérieur. Géologie appliquée. Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2003. Français. NNT : . tel-00007214

**HAL Id: tel-00007214**

**<https://theses.hal.science/tel-00007214>**

Submitted on 26 Oct 2004

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE MONTPELLIER II  
-SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC-

**T H E S E**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER II**

**Discipline** : Structure et Evolution de la Terre et des Planètes

**Formation Doctorale** : Structure et évolution de la lithosphère

**Ecole Doctorale** : Sciences de la Terre et de l'Eau

présentée et soutenue publiquement

par

**Benoit Gibert**

Le 5 décembre 2003

**Etude expérimentale de la diffusion thermique dans les  
monocristaux d'olivine et dans les roches du manteau  
supérieur**

JURY

<b>MAINPRICE David</b>	<b>Directeur de Recherche, CNRS -Univ. Montpellier II</b>	<b>Président du jury</b>
<b>GILLET Philippe</b>	<b>Professeur, Ecole Normale Supérieure de Lyon</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>CORDIER Patrick</b>	<b>Professeur, Université de Lille 1</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>SCHILLING Frank R.</b>	<b>Professeur, GeoForschungsZentrum Potsdam</b>	<b>Examineur</b>
<b>BOKELMANN Götz</b>	<b>Professeur, Université Montpellier II</b>	<b>Examineur</b>
<b>TOMMASI Andréa</b>	<b>Chargée de Recherche, CNRS -Univ. Montpellier II</b>	<b>Directeur de Thèse</b>



# Remerciements

Si quelques semaines après ma soutenance, je ne garde que de bons souvenirs de ces dernières années d'études, c'est essentiellement grâce aux personnes que j'ai rencontrées dans le cadre de ma thèse. Ainsi, je remercie toute l'équipe du laboratoire de Tectonophysique qui m'a suivi et qui m'a fait confiance pendant ses quatre dernières années.

Parmi les personnes que je voudrais évoquer ici, je tiens à remercier en tout premier lieu Andréa Tommasi. Elle m'a toujours fait confiance depuis mon DEA et tout au long de mon travail de thèse. Son enthousiasme et ses encouragements m'ont permis d'acquérir une autonomie, une confiance en moi et un vrai bien être dans mon travail. Je tiens à lui associer David Mainprice, qui a co-encadré cette thèse, mais d'un peu trop loin à mon goût, tant j'aurais aimé qu'il me confie tous les secrets des « propriétés physiques de les roches »! En tout cas, merci pour la confiance placée en moi, tout particulièrement concernant le travail expérimental.

Cet enthousiasme et ses encouragements, je les ai retrouvés chez Etienne de Vautibault et Pierre Azaïs, mes deux formidables compagnons du laboratoire expérimental. Merci pour tout : les réalisations mécaniques et électroniques, les montages expérimentaux, les premiers pas ensemble sur la presse Paterson, et puis surtout la bonne ambiance. C'est quand le prochain apéro ! Je pense aussi à Didier Loggia et aux nombreux étudiants qui ont fait du triste sous-sol du bâtiment 22 un lieu remarquablement convivial.

Et puis ma thèse m'a procuré le grand plaisir de travailler plusieurs mois au GeoForschungsZentrum de Potsdam, près de Berlin, grâce à un projet Franco-Allemand 'Procopé' géré par l'Egide. Au sein de l'équipe de Géothermie, j'ai travaillé avec Ulfert Seipold, qui a toujours fait le maximum pour m'accueillir et me permettre de conduire mes travaux. Dans l'équipe de pétrologie et de physique des minéraux, j'ai été accueilli par Frank Schilling. Lui aussi m'a tout de suite fait confiance et a tout fait pour que mes séjours soient les plus réussis possibles, en particulier en favorisant mon intégration dans son équipe. Je tiens aussi à remercier les directeurs respectifs de ces deux laboratoires, Ernst Huenges et Wilhelm Heinrich pour leur accueil et leur attention portée à mon égard.

Je remercie toutes les personnes qui ont directement contribué au travail expérimental et analytique. A Montpellier, Christophe Nevado et Doriane Delmas pour les fameuses lames minces, Joël Oustry pour les petites pièces mécaniques. À Potsdam, Mathias Kreplin, Gerhardt Berger pour la préparation des monocristaux d'olivine, Cornelia Karger, Rainer Becker et Andreas Ebert pour la préparation des appareils de mesures. Merci à Walid Ben Ismail et Micha Bystricky pour tous les précieux conseils qu'ils nous ont donnés au moment du redémarrage de la presse Paterson.

Merci aussi à Marie-Pierre Doin pour m'avoir initié à la modélisation numérique. J'espère que notre collaboration pourra se finaliser un jour ou l'autre... Merci à Sébastien Petitjean dont le travail de thèse a tout à coup donné un sens à mes données expérimentales.

Je n'oublie pas toutes les personnes qui m'ont aidé à franchir bien des obstacles :

Merci à Bernadette et Marguerite pour tous les services rendus et surtout pour leur bonne humeur et leur gentillesse. Merci aussi à Beate Hein pour sa disponibilité et pour m'avoir déniché à plusieurs reprises un logement à Potsdam. Merci à Marie-France Roch et Florence Picone, pour m'avoir permis de franchir aisément les petits tracas administratifs de la thèse.

Merci à Catherine Thoraval pour toutes les fois où je l'ai dérangée pour des problèmes informatiques de rien du tout, mais aussi pour des relectures de mon extraordinaire anglais.

Merci à Anne Delplanque pour sa disponibilité lors des impressions de posters sur cette satanée Calcomp.

Merci à Alain, Benoit I., Françoise, Margot et tous ceux que j'oublie peut-être pour avoir assisté patiemment à mes répétitions orales du DEA, des congrès ou encore de la thèse.

Je tiens également à remercier tous les amis avec qui j'ai partagé bien des moments souvent très enrichissants de la vie de thésard. Je pense avant tout aux camarades de bureau, Benoit D., Marianne et Jérôme, qui ont toujours su maintenir une excellente ambiance. Et puis tous ceux avec qui j'ai partagé les repas au RU et bien des soirées ici ou là : Maggy, Guillaume, Flo E., Flo K., Flo LH, Olivier et Marion, Bertrand, Philippe, Julie, Stéphanie, Mathieu, Fabrice, Elodie, Muriel, Ingrid, France. Je n'oublie surtout pas Stano, que je remercie pour son invitation à Prague. Sans oublier les collègues de l'équipe de Hand de L'UM II et surtout l'inénarrable Jacques Teyssier pour être venu à ma soutenance et bien sûr à l'apéritif qui a suivi.

À Potsdam, je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé à m'intégrer dans la vie locale : Juliane pour avoir bien voulu partager le plus beau bureau du GFZ avec moi, pour les sorties à Berlin.... Kristin, Michael, Georg, Hans Josef pour les nombreuses discussions scientifiques ou non, David Brühn pour les discussions footballistiques souvent animées, Hans Joachim pour le petit tour en *Trabant* et Marie, la plus 'Potsdamoise' des Héraultaises.

Je remercie aussi l'équipe du département d'enseignements des sciences de la Terre et de l'eau de Montpellier qui a su m'intégrer, moi le non-géologue, pour dispenser des enseignements. Je remercie particulièrement Henri de la Boisse, qui m'a donné l'occasion de réaliser des vacances durant ma thèse, et Yasmine Bentahila, qui m'a accompagné pour assurer les TP de géologie de première année.

Je remercie également l'équipe enseignante du DEA 'Structure et Evolution de la Lithosphère' de Montpellier qui a su éveiller en moi une vraie passion pour les Sciences de la Terre. Je ne pourrai pas oublier mon tout premier interlocuteur au sein du DEA, Alain Vauchez, qui à l'époque m'avait aiguillé sur la piste, entre autres, d'une certaine ... Andréa Tommasi. Merci Alain !

Je remercie enfin Philippe Gillet, Patrick Cordier, Götz Bokelmann et Frank R. Schilling qui m'ont fait l'honneur de juger ce travail et d'assister à ma soutenance.

À vous tous un grand merci.

# Etude expérimentale de la diffusion thermique dans les monocristaux d'olivine et dans les roches du manteau supérieur

## -Table des matières-

<b>1</b>	<b>Introduction</b> _____	<b>9</b>
1.1	La Terre : machine thermique _____	11
1.2	Interactions convection-conduction : la lithosphère. _____	13
1.3	Objectifs _____	16
<b>2</b>	<b>Transferts thermiques dans les minéraux et les roches : fondements théoriques et application à l'olivine</b> _____	<b>17</b>
2.1	Généralités. _____	19
2.2	Transfert thermique par les vibrations du réseau cristallin _____	20
2.2.1	Les phonons _____	20
2.2.2	Apport de la théorie cinétique des gaz : applications aux phonons _____	21
2.2.3	Courbes de dispersion et vitesse de groupe des phonons. _____	22
2.2.4	Libre parcours moyen des phonons dans les cristaux. _____	24
2.2.4.1	<i>Phonons et imperfections du réseau cristallin</i> _____	24
2.2.4.2	<i>Interactions phonons-phonons dans les cristaux simples</i> _____	26
2.2.4.3	<i>Cas des solutions solides</i> _____	29
2.2.4.4	<i>Cas des cristaux complexes et rôle des phonons optiques</i> _____	30
2.2.4.5	<i>Limite inférieure de la diffusivité thermique.</i> _____	31
2.2.5	Conséquences : effet de la température sur la diffusion thermique _____	32
2.2.6	Effet de la pression _____	33
2.2.7	Remarques sur l'anisotropie de la conduction thermique. _____	33
2.3	Transport de chaleur par le rayonnement électromagnétique. _____	35
2.3.1	Caractéristiques d'un milieu rayonnant. _____	35
2.3.2	Transfert radiatif et notion d'équilibre radiatif _____	36
2.3.3	Contribution radiative à la conductivité thermique dans l'approximation de diffusion. 37	
2.3.4	Coefficient d'extinction : exemple de l'olivine. _____	38
2.3.5	Contribution radiative et mesures de conductivité thermique. _____	40
2.4	Transfert de chaleur à l'échelle de la roche. _____	41
2.4.1	Transport par les phonons _____	42
2.4.2	Transport radiatif _____	42
2.4.3	Calcul des propriétés à l'échelle de l'agrégat. _____	44
2.5	Conclusion _____	46

### 3 Mesures en laboratoire des propriétés de transport thermique des minéraux et des roches \_\_\_\_\_ 47

<b>3.1 Généralités sur les méthodes de mesure de la diffusivité (ou conductivité) thermique en Sciences de la Terre _____</b>	<b>49</b>
3.1.1 Méthodes stationnaires _____	50
3.1.1.1 Méthode « Divided-bar » _____	50
3.1.1.2 Méthode 'hot wire' en régime permanent _____	51
3.1.2 Méthodes transitoires. _____	51
3.1.2.1 Méthode Flash _____	51
3.1.2.2 Méthode «hot wire» transitoire. _____	52
3.1.3 Méthode Angström ou harmonique _____	53
3.1.4 Autres méthodes. _____	53
3.1.4.1 Méthode « Picosecond Transient Grating Spectroscopy » (PTGS). _____	54
3.1.4.2 Méthode par le calcul des temps de vie des phonons. _____	55
3.1.5 Conclusion : choix d'une méthode ? _____	57
<b>3.2 Méthode (1) transitoire en géométrie cylindrique (Seipold, 1988) _____</b>	<b>58</b>
3.2.1 Principe physique. _____	58
3.2.2 Procédure expérimentale. _____	59
3.2.2.1 Géométrie de l'échantillon et caractéristiques de la source et capteur _____	59
3.2.2.2 Acquisition des données _____	60
3.2.2.3 Mesures à haute température et haute pression _____	60
3.2.2.4 Procédure expérimentale et précision interne de la méthode. _____	60
3.2.3 Calibration et mesures antérieures. _____	62
3.2.4 Discussion : avantages et inconvénients. _____	62
3.2.4.1 Types d'échantillons _____	62
3.2.4.2 Mesures à haute pression. _____	62
3.2.4.3 Mesures à haute température. _____	63
<b>3.3 Méthode (2) transitoire en géométrie linéaire (Schilling, 1999). _____</b>	<b>64</b>
3.3.1 Principe _____	64
3.3.2 Dispositif expérimental _____	65
3.3.3 Conditions de mesure et précision. _____	66
3.3.4 Calibration _____	67
3.3.5 Apport de la méthode _____	68
<b>3.4 Méthode (3) Angström linéaire (Laboratoire de Tectonophysique-Montpellier) _____</b>	<b>68</b>
3.4.1 Géométrie linéaire finie (température ambiante). _____	68
3.4.1.1 Principe _____	68
3.4.1.2 Mise en œuvre _____	70
3.4.1.3 Calibrage de la méthode et représentativité des mesures. _____	70
3.4.1.4 Conclusion _____	72
3.4.2 Géométrie linéaire semi-infinie (haute température) _____	72
3.4.2.1 Principe _____	72
3.4.2.2 Dispositif expérimental _____	73
3.4.2.3 Acquisition et traitement des données. _____	74
3.4.2.4 Validité des mesures et effet de la période _____	76
3.4.2.5 Précision de l'appareil _____	77
3.4.2.6 Utilisation en régime transitoire _____	78
3.4.3 Calibration de la méthode : étude du verre de silice, du quartz, et de l'alumine. _____	78
3.4.3.1 Rayonnement thermique dans les verres _____	79
3.4.3.2 Transition $\alpha$ - $\beta$ du quartz _____	80
3.4.3.3 Alumine _____	82
3.4.3.4 Conclusion _____	82

<b>3.5</b>	<b>Méthode (4) Angström en géométrie cylindrique (Laboratoire de Tectonophysique-Montpellier)</b>	<b>83</b>
3.5.1	Intérêt	83
3.5.2	Principe	83
3.5.3	Montage dans la presse Paterson	84
3.5.4	Premiers tests	85
3.5.5	Evolution de la méthode	87
<b>3.6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>87</b>

<b>4</b>	<b>Anisotropie de la diffusivité thermique dans le manteau : expériences à haute température et à haute pression</b>	<b>89</b>
4.1	Introduction	91
4.2	Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle.	92
	Thermal diffusivity of upper mantle rocks : influence of temperature, pressure and the deformation fabric.	96
4.4	Conclusion	111

<b>5</b>	<b>Diffusivité thermique à température ambiante : propriétés du monocristal et des agrégats d'olivine</b>	<b>113</b>
5.1	Introduction	115
5.2	Le transfert d'échelle monocristaux - agrégats polycristallins: l'olivine et le quartz.	115
5.2.1	Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions - a comparison	115
5.2.2	Données additionnelles et validité des mesures	121
5.2.3	Données obtenues par la méthode Angström (3).	123
5.2.4	Données obtenues sur les monocristaux de quartz et sur une quartzite.	124
5.2.5	Conclusion : transferts de chaleur dans les matériaux polycristallins.	127
5.3	Propriétés physiques anisotropes de l'olivine	128
5.3.1	Anisotropie à l'échelle du cristal	128
5.3.2	Anisotropie à l'échelle de la roche	133
5.4	Valeurs absolues de la diffusivité thermique de l'olivine et des roches mantelliques sous conditions ambiantes.	135
5.4.1	Comparaison des trois méthodes.	135
5.4.2	Comparaison avec les méthodes antérieures.	139
5.5	Conclusion	140

<b>6</b>	<b>Contribution du rayonnement au transfert de chaleur dans les monocristaux et agrégats d'olivine.</b>	<b>141</b>
6.1	Introduction	143
6.2	Quantifying heat transfer by radiation in San Carlos olivine single-crystals	144
6.2.1	Introduction	145
6.2.2	Heat transfer in semi-transparent materials	146
6.2.3	Method of measurement	147
6.2.4	Samples	149
6.2.5	Results	150
6.2.6	Discussion	152
6.2.6.1	<i>Radiative heat transport in olivine.</i>	152
6.2.6.2	<i>Heat transport by radiation in dunité</i>	157
6.2.7	Thermal diffusivity of olivine	158
6.2.8	Concluding remarks	160
6.2.9	Remarque sur l'anisotropie de la diffusivité thermique.	163
6.3	Apport de la méthode (3).	163
6.4	Discussion.	166
<b>7</b>	<b>Implications géodynamiques</b>	<b>169</b>
7.1	Introduction	171
7.2	Évolution de la lithosphère océanique.	172
7.2.1	Les modèles physiques de refroidissement.	172
7.2.2	Effet des variations de la diffusivité thermique	173
7.2.3	Rôle de l'anisotropie de conductivité thermique	175
7.3	La lithosphère continentale.	177
7.3.1	Le géotherme continental.	178
7.3.2	Interaction thermique panache-lithosphère	183
7.3.2.1	<i>Initiation du rifting</i>	183
7.3.2.2	<i>Modélisation du transfert thermique conductif.</i>	184
7.3.2.3	<i>Conclusion</i>	189
7.3.3	Stabilité de la lithosphère cratonique.	190
7.3.3.1	<i>La lithosphère cratonique</i>	190
7.3.3.2	<i>Un modèle alternatif pour la stabilisation de la lithosphère cratonique.</i>	192
7.3.3.3	<i>Conclusion</i>	197
7.4	Conclusion	197
<b>8</b>	<b>Conclusions</b>	<b>199</b>
	<b>Références Bibliographiques</b>	<b>205</b>
	<b>Annexe 1 : Méthode des différences finies</b>	<b>221</b>
	<b>Annexe 2: Méthode EBSD</b>	<b>225</b>

# 1 Introduction



## 1.1 La Terre : machine thermique

Les nombreux phénomènes observés à la surface du globe, tels que le volcanisme, les tremblements de terre, la surrection des montagnes, ou encore la présence d'un champ magnétique d'origine interne montrent que la Terre est une planète active. Cette intense activité est liée à la libération de l'énergie produite à l'intérieur de la Terre. Cette énergie à des origines variées et elle est libérée sous diverses formes. Elle est souvent assimilée au terme de « chaleur ». La façon dont cette chaleur est transportée depuis les enveloppes les plus internes jusqu'à la surface va conditionner la structure thermique interne de la Terre et sa dynamique.

### Bilan d'énergie à l'échelle de la planète

Les énergies libérées à la surface du globe sont approximativement quantifiables. Elles sont décrites dans le tableau 1.1 (e.g., Fowler, 1990 ; Poirier, 1991 ; Pollack et al., 1993).

Processus	Puissance moyenne (mW.m <sup>-2</sup> )	Puissance globale (W)
Surrection des montagnes	0.014	7.10 <sup>9</sup>
Tremblements de terre	2	10 <sup>12</sup>
Volcanisme	1.6	8.10 <sup>11</sup>
Flux de chaleur en surface	82	4,2.10 <sup>13</sup>
Champ magnétique		10 <sup>8</sup>
Rayonnement solaire	1,395.10 <sup>6</sup>	7,1.10 <sup>17</sup>

Tableau 1.1 : valeurs des puissances libérées/reçues à l'échelle de la Terre.

En surface, l'énergie apportée par le rayonnement solaire est bien supérieure aux énergies provenant de l'intérieur de la Terre. Elle intervient dans la dynamique de la Terre par son action en surface : elle contrôle les processus liés au climat, l'altération des roches et l'érosion.

Les énergies produites à l'intérieur de la Terre sont liées d'une part au refroidissement séculaire de la Terre (25%), notamment au refroidissement de la graine solide et à la cristallisation du noyau liquide. D'autre part, la désintégration radioactive apporte une forte contribution (Table 1.2).

Processus	Puissance (W)
Désintégration radioactive dans la croûte	0,8.10 <sup>13</sup>
Désintégration radioactive dans le manteau	2,4.10 <sup>13</sup>
Refroidissement séculaire	1,0.10 <sup>13</sup>
Energie libérée en surface	4,2.10 <sup>13</sup>

Tableau 1.2 : bilan de l'énergie produite à l'intérieur de la Terre

Ce bilan d'énergie indique que le flux de chaleur observé en surface (et rayonné dans l'atmosphère) explique la plus grande partie des pertes énergétiques de la planète. En particulier, il est montré que près de 70% des pertes d'énergies est accommodé par l'évolution des bassins océaniques (Fowler, 1990).

## Modes de transport de la chaleur et structure thermique de la Terre.

L'évaluation des énergies produites à l'intérieur de la Terre (et des flux de chaleur correspondants) est insuffisante pour estimer la structure thermique de la Terre. En effet, cette dernière dépend de la relation liant le flux de chaleur au gradient de température, donc de la façon dont cette chaleur est transportée. Des méthodes indirectes doivent être mises en œuvre pour évaluer cette structure. En particulier, un modèle réaliste de transport thermique à l'échelle du globe doit être contraint par différents points d'ancrage pour lesquels la température à une profondeur donnée peut être estimée. La combinaison des modèles tomographiques et des données expérimentales de haute pression-haute température permet de situer ces points d'ancrages. Les modèles tomographiques sont particulièrement utiles pour imager les transitions de phases (discontinuités des vitesses dans la zone de transition) ou les changements d'états (frontière noyau liquide-graine ou manteau). Les données expérimentales concernent les diagrammes de phases (celui du système  $Mg_2SiO_4$ , par exemple, permet d'évaluer les températures dans la zone de transition), les profils de vitesses acoustiques en fonction de la pression et la température, les diagrammes d'état (par exemple, la détermination du solidus du fer permet d'évaluer la température de la frontière graine-noyau liquide), mais aussi l'analyse des nodules de manteau (xénolithes), pour évaluer le gradient thermique dans le manteau lithosphérique par géothermobarométrie (e.g., O'Reilly and Griffin, 1996). Toutes ces données aboutissent à la proposition d'une structure interne thermique de la Terre (e.g., Gillet, 1995) (fig. 1.1).

Les points d'ancrage définis imposent deux modes de transport de chaleur :

- dans les enveloppes où un faible gradient est attendu ( $<1^\circ\text{C}$  par km), la convection est active : c'est le cas du noyau liquide, du manteau inférieur et du manteau supérieur sub-lithosphérique. La conductivité thermique trop faible des matériaux ne permet pas d'envisager un régime conductif.
- dans le cas où un gradient important est attendu ( $>$ quelques  $^\circ\text{C}$  par km), le régime conductif est activé : c'est le cas de l'enveloppe superficielle de la Terre : la lithosphère.
- enfin, certains points d'ancrage combinés aux gradients thermiques attendus dans un manteau convectif (dit gradient adiabatique), imposent des gradients de température relativement élevés dans certaines zones : c'est le cas pour la frontière noyau-manteau (couche D'') ou pour la zone de transition. Ces deux zones peuvent constituer des couches limites thermiques conductives séparant deux milieux convectifs découplés. Si la couche limite D'' s'impose par la différence extrême des deux milieux convectifs qu'elle sépare (noyau liquide - manteau solide), les incertitudes sur les points d'ancrage et sur le gradient adiabatique du manteau ne permettent pas d'attribuer de façon certaine à la zone de transition le rôle de couche limite thermique conductive. Ces incertitudes sont à l'origine de la coexistence de modèles de convection du manteau à une couche ou deux couches.

Les deux modes de transport conductifs et convectifs peuvent entrer en concurrence, car ils sont tous deux contrôlés (pas exclusivement pour la convection) par la conductivité thermique des matériaux. L'importance de la conductivité thermique pour la convection s'exprime par le nombre de Rayleigh, qui détermine la possibilité ou non d'un régime convectif et la vigueur de cette convection. La conductivité thermique dans les couches limites détermine l'épaisseur de ces couches et peut également déterminer la possibilité de présence ou non d'une couche limite (Brown, 1986). Une conductivité thermique élevée permet d'accommoder de faibles

gradients de température et s'oppose donc à la convection. Dans le manteau convectif, des variations de la conductivité thermique peuvent affecter la vigueur et la géométrie de la convection (Dubuffet et al., 1999; Dubuffet et al., 2000; Van Den Berg et al., 2002). Finalement, la connaissance de la conductivité thermique est fondamentale pour la compréhension de la dynamique des zones où la convection et la conduction entrent en concurrence: c'est le cas de la zone sub-lithosphérique (manteau supérieur- asthénosphère). En effet, le manteau conductif lithosphérique y est en interaction avec le manteau convectif et l'équilibre des deux régimes, dans des conditions de température et de pression données, ne dépend que des propriétés de transport thermique des roches mantelliques. Ces interactions influencent fortement la structure de la lithosphère (son épaisseur et sa température) et sa dynamique.

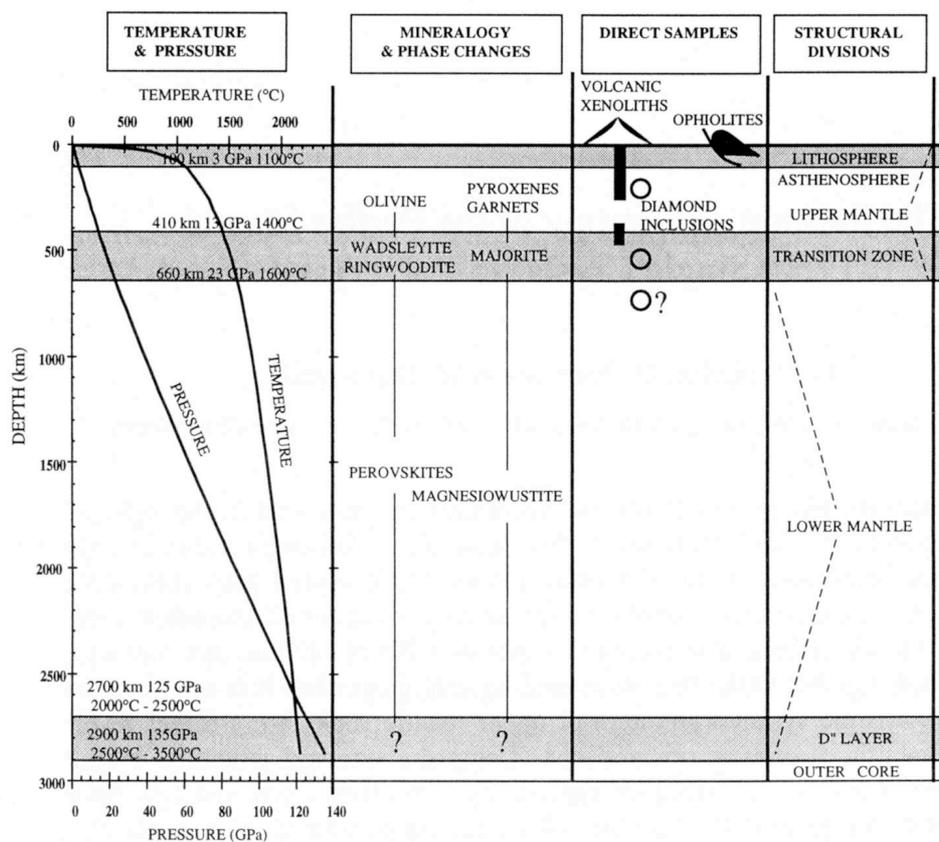


Figure 1.1 : Conditions de température et de pression et minéralogie du manteau terrestre, d'après Mainprice et al. (2000) inspiré de Gillet, (1995).

## 1.2 Interactions convection-conduction : la lithosphère.

Une des définitions de la lithosphère consiste à lui attribuer le rôle de couche limite thermique séparant le manteau sub-lithosphérique convectif de la surface du globe. La lithosphère ainsi définie ne se caractérise que par un seul paramètre : sa capacité à transférer l'énergie d'origine thermique provenant des enveloppes internes par conduction thermique. Selon cette définition, sa structure, sa composition, sa rhéologie et l'ensemble des

phénomènes de déformation qu'elle subit ne sont contrôlés que par le champ de température dont elle est le siège. Cette définition est soutenue par le fait que la lithosphère thermique est une unité au sein de laquelle la température varie fortement (de 0°C à la surface à 1300°C à sa base) sur une épaisseur relativement faible (100-200km). Ses propriétés physiques seront donc principalement dominées par les effets de la température : c'est notamment le cas pour les propriétés rhéologiques (e.g., Karato et Wu, 1993). Dans cette lithosphère, le manteau occupe une place prépondérante car il est majoritaire en volume et il constitue la véritable interface entre les milieux convectifs et conductifs. Les interactions entre le manteau sublithosphérique et le manteau lithosphérique conduisent à de nombreux processus physiques (érosion mécanique et thermique, déformation, fusion), qui participent aux grands processus géodynamiques.

## Importance des échanges thermiques

L'évacuation de l'énergie d'origine thermique par la lithosphère conductive se manifeste par des processus dynamiques à grande échelle. Ces processus montrent la présence d'un couplage permanent entre les milieux conductifs et convectifs. Par exemple, il peut être montré qu'une zone lithosphérique où la conductivité thermique est accrue localise les courants de convection descendants et favorise la stabilité des cratons (e.g., Mimouni et Rabinowicz, 1988). Dans d'autre cas, la lithosphère peut être considérée comme une composante à part entière des processus de convection de par sa propre évolution et notamment son déplacement. Par exemple, l'évolution de la lithosphère océanique, depuis sa création, sa subsidence, son déplacement jusqu'à la subduction aux marges actives est non seulement une manifestation de la convection sous-jacente, mais elle montre aussi que la lithosphère participe activement à cette convection (appelée alors convection primaire), à très grande échelle. Or tous ces processus sont fondés sur la capacité de la lithosphère océanique à évacuer la chaleur par conduction thermique.

En particulier, cette conduction thermique contrôle directement :

- l'interaction entre une anomalie de température provenant du manteau supérieur ou inférieur (courant ascendant de convection - plumes) avec la lithosphère
- donc, les phénomènes de fusion partielle et l'ouverture des bassins océaniques (rifting actif)
- la subsidence, l'épaisseur et la stabilité de la lithosphère océanique (e.g., Schubert et al., 1976)
- la subduction de la lithosphère océanique et le réchauffement de la lithosphère subductante dans le manteau (Hauk et al., 1999)
- donc, la pénétration ou non de la lithosphère subductante dans la zone de transition et le manteau inférieur (Branlund et al., 2000).

Ces processus géodynamiques dépendent localement de la conduction thermique, mais à l'échelle du globe, leurs interactions mutuelles contrôlent également leur déroulement. Par exemple, les forces aux limites de plaques lithosphériques (plaque en subduction - « slab pull ») peuvent contrôler l'ouverture des bassins océaniques, le rifting (rifting passif). Les échanges thermiques entre la lithosphère et le manteau convectif sous-jacent sont donc étudiés dans le cadre d'une influence localisée et indépendante des conditions aux limites de plaques.

## Conditions de température et de pression, minéralogie.

Selon la définition de la lithosphère thermique, la limite entre la lithosphère et l'asthénosphère est une isotherme qui correspond généralement à l'isotherme 1200°C. Compte tenu de cette limite arbitraire et de la diversité des contextes géologiques, la profondeur de la lithosphère peut varier de quelques kilomètres sous le plancher océanique, au voisinage des dorsales, jusqu'à 250 kilomètres sous les cratons. La gamme de pression correspondante varie donc de quelques centaines de MPa à plusieurs GPa. Pour une lithosphère dite normale, d'environ 100 km de profondeur, la pression à la base de la lithosphère est de 3 GPa. Ces conditions de température et de pression associées à la composition chimique homogène proposée dans le modèle de Ringwood (Ringwood, 1975) permettent la prédominance de l'olivine, silicate de fer et de magnésium, dans tout le manteau supérieur, sa proportion étant comprise entre 60 et 75% pour un manteau normal, c'est-à-dire n'ayant pas subi de phénomènes de fusion. Les observations réalisées sur les massifs de péridotites issus d'un manteau sub-continental (zone d'Ivrée par exemple), associées aux observations menées sur des xénolithes de manteau confirment cette proposition. Les roches concernées sont les lherzolites (60-80% d'olivine + orthopyroxène + clinopyroxène ± grenat ± spinelle). La fusion partielle induit un appauvrissement en phases alumineuses et enrichissement en olivine du manteau résiduel, donnant origine à des harzburgites (moins de 5% de clinopyroxène) et des dunités (plus de 95% d'olivine). L'étude du transport de chaleur dans le manteau passe donc par une étude des propriétés de transport thermique de ces roches et minéraux et tout particulièrement de celles de l'olivine.

## Structure, déformation et propriétés physiques anisotropes du manteau

Outre sa composition, la structure du manteau lithosphérique est contrôlée par sa déformation à l'état solide, dans des conditions où la déformation plastique (à l'échelle microscopique) domine. La déformation des minéraux mantelliques, et particulièrement de l'olivine, conduit au développement d'orientations préférentielles de réseau (OPR) (e.g., Nicolas et Poirier, 1976). Ces OPRs, associées aux propriétés physiques anisotropes du cristal d'olivine (propriétés acoustiques (e.g., Abramson et al., 1997), électriques (e.g., Schock et al.), mécaniques (e.g., Bai et al., 1991) ou thermiques (e.g., Chai et al., 1996)) permettent d'étendre l'anisotropie de ces mêmes propriétés de l'échelle microscopique (cristal) à l'échelle macroscopique (lithosphère). Par exemple, les études du déphasage des ondes SKS ou de la propagation des ondes électromagnétiques dans la lithosphère montrent que le manteau supérieur est physiquement anisotrope et permettent donc de décrire l'état de déformation du manteau (e.g., Silver, 1996; Simpson, 2002). D'autre part, l'anisotropie des propriétés mécaniques et thermiques peut avoir des conséquences directes sur la déformation et la dynamique du manteau, dont la plus importante est la localisation de la déformation (Tommasi et al., 2001; Tommasi et Vauchez, 2001; Vauchez et Tommasi, 2003).

Cependant, à l'exception de l'anisotropie de propagation des ondes sismiques dans les minéraux et les roches, le transfert d'échelle entre les propriétés tensorielles des cristaux et les propriétés physiques anisotropes des roches déformées est très mal connu. Si la déformation des roches du manteau est maintenant très bien documentée (e.g., Ben Ismail et Mainprice, 1998), les propriétés physiques anisotropes de ces mêmes roches le sont beaucoup moins bien. Par exemple, l'absence de données expérimentales concernant les propriétés électriques anisotropes des roches mantelliques rendent très délicate l'interprétation des données de MT (Simpson, 2001; Mareschal et al., 1995). De la même façon, le manque de données expérimentales concernant les propriétés de transport thermiques anisotropes (mais également

l'anisotropie des propriétés mécaniques) ne permet pas de quantifier de façon réaliste les transports de chaleur (anisotropes) dans le manteau et leur rôle sur la déformation.

### 1.3 Objectifs

Dans le cadre de l'étude des interactions thermiques entre le manteau lithosphérique et le manteau sub-lithosphérique, les propriétés de transport de chaleur des minéraux et roches du manteau sont primordiales (conductivité thermique ou diffusivité thermique).

Ces propriétés ont souvent été mesurées ou calculées, mais d'importants désaccords entre les différentes études subsistent. Ils peuvent être dus aux méthodes de mesure utilisées, aux échantillons sélectionnés (microstructure, déformation, altération des roches souvent peu décrites), mais également à l'échelle à laquelle la propriété est mesurée (cristal ou roche). Les calculs théoriques sont très limités et souffrent de la complexité des minéraux étudiés. S'ils ne sont pas capables de déterminer des valeurs absolues de la conductivité thermique, ils permettent toutefois de déterminer approximativement des dépendances en température et en pression (e.g., Slack, 1979). Le travail de thèse propose d'étudier expérimentalement ces propriétés à l'échelle du cristal d'olivine et à l'échelle de la roche (agrégat polycristallin) et de procurer ainsi une valeur réaliste, en fonction des conditions de pression et de température, de la diffusivité thermique dans le manteau lithosphérique.

Dans le *chapitre 2*, les processus de transport thermique seront décrits depuis l'échelle microscopique (atomique) jusqu'à l'échelle de l'agrégat (roche) et des lois de comportement théoriques décrivant la dépendance de la diffusivité thermique en fonction de la température et de la pression seront introduites. Le *chapitre 3* présentera une revue succincte des méthodes de mesure de la conductivité thermique utilisées en Sciences de la Terre et donnera une présentation détaillée de celles utilisées dans cette étude. Le *chapitre 4* proposera une étude de l'anisotropie de diffusion thermique dans des péridotites, à haute température et haute pression, ainsi qu'une revue des données antérieures. Les problèmes de transfert d'échelle et de rayonnement thermique observés dans cette étude seront abordés dans les deux chapitres suivants. Le *chapitre 5* montrera comment s'opère le transfert d'échelle depuis les propriétés du monocristal d'olivine à celles de la roche et discutera les valeurs proposées de diffusivité thermique à température ambiante afin de définir une valeur réaliste de la diffusivité thermique des roches du manteau. Le *chapitre 6* insistera sur les processus de transport par rayonnement thermique et montrera que contrairement aux propositions récentes (Hofmeister, 1999), un transfert radiatif peut être présent dans le manteau, augmentant ainsi les échanges thermiques. Les données obtenues dans cette étude seront enfin partiellement exploitées par des applications concernant des processus géodynamiques tels que l'évolution des bassins océaniques, les interactions plume - lithosphère et la stabilisation des racines cratoniques (*chapitre 7*).

2 Transferts thermiques  
dans les minéraux et les  
roches : fondements  
théoriques et application à  
l'olivine



Ce chapitre aborde de façon théorique les propriétés de transport thermique des cristaux et des roches en général. En parallèle, les propriétés propres de l'olivine, déduites de sources bibliographiques, seront brièvement exposées (dans les encadrés) afin de situer les problèmes et lacunes qui justifient le travail de thèse.

## 2.1 Généralités.

La définition de la chaleur peut prêter à confusion : en thermodynamique, l'introduction du terme chaleur dans l'énoncé du premier principe montre qu'elle correspond, comme le travail, à un transfert d'énergie (e.g., Pérez, 1997). Il paraît donc impropre de parler de transfert de chaleur. Cependant, par la suite, la chaleur sera considérée comme une énergie d'origine thermique, une quantité qui peut se propager, comme, par exemple, une énergie électromagnétique. Plusieurs phénomènes peuvent expliquer son transfert. Ils sont tous présents dans les Sciences de la Terre, à diverses échelles :

- La **conduction**, qui correspond au transfert de chaleur à travers la matière par interaction entre atomes ou molécules. Elle est prépondérante dans le manteau lithosphérique et dans la croûte, mais aussi dans certaines interfaces entre milieux de natures physiques différentes : les couches limites thermiques, comme la couche  $D''$ .

- La **convection**, qui met en jeu des transferts de matière, se met en place dans des milieux où les conditions de viscosités et de conductivités thermiques le permettent. Elle concerne généralement le manteau sub-lithosphérique et le noyau externe.

- Le **rayonnement** concerne tous les matériaux, sachant que tout corps porté à une température donnée émet un rayonnement électromagnétique caractéristique.

La conduction et le rayonnement seront particulièrement étudiés ici. Ces deux processus physiquement différents seront souvent associés car ce sont généralement ces deux phénomènes que l'on détermine simultanément au travers d'une mesure de conductivité ou de diffusivité thermique.

La conduction thermique est avant tout un phénomène de diffusion. Elle est connue depuis le 18<sup>ème</sup> siècle avec les expériences de Ingen Houz (1789). Pendant le processus du transfert de chaleur, l'énergie se diffuse à travers tout le corps et ne se propage pas dans une direction donnée. C'est la nature statistique du processus de conduction qui va introduire un gradient de température. Ainsi, lorsqu'une différence de température existe dans un matériau, un flux thermique, orienté des zones chaudes vers les zones froides, tend à uniformiser la température. La conduction est alors régie par une loi phénoménologique analogue à la loi d'Ohm ou de Fick : la loi de Fourier (1815). Elle traduit, à l'approximation linéaire, la proportionnalité du courant volumique thermique  $\vec{J}(r,t)$  en  $W.m^{-2}$  et du gradient de température  $T$ , sous la forme :

$$\vec{J}(r,t) = -K \cdot \overrightarrow{\text{grad}T} \quad (2.1)$$

Le coefficient  $K$ , toujours positif, est la conductivité thermique, exprimée en  $W.m^{-1}.K^{-1}$ . Les transferts de chaleur, dans les matériaux anisotropes sont décrits par un tenseur conductivité thermique de rang deux (e.g., Nye, 1972). La conductivité thermique exprime la capacité pour un milieu donné à transmettre l'énergie d'origine thermique. Un autre coefficient, la diffusivité thermique  $D$  intervient dans l'équation de la diffusion thermique. En combinant la loi de Fourier à la relation locale liant la divergence du flux de chaleur à la variation d'énergie interne volumique, l'équation de la diffusion s'écrit :

$$\rho.C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot (-K \cdot \vec{\nabla} T) + \sigma \quad (2.2)$$

Si la conductivité ne dépend pas des variables d'espace (milieu homogène), alors cette équation devient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \Delta T + \frac{\sigma}{\rho.C_p} \quad (2.3)$$

$$\text{avec } D = \frac{K}{\rho.C_p} \quad (\text{en } m^2.s^{-1}) \quad (2.4)$$

où  $\rho$  est la masse volumique en  $kg.m^{-3}$  du matériau et  $C_p$  sa capacité thermique massique à pression constante en  $J.kg^{-1}.K^{-1}$ . On utilisera plutôt la capacité thermique volumique  $C = \rho.C_p$  en  $J.m^{-3}.K^{-1}$ . Le terme  $\sigma$  peut inclure un terme de production de chaleur (radiogénique par exemple) ou un terme de pertes (pertes par rayonnement, convection) dans le volume considéré.

Dans les solides, on note deux contributions à la conductivité thermique: l'une liée aux électrons de conduction, l'autre liée aux vibrations du réseau cristallin. La première est prépondérante dans les métaux où la conductivité électrique et la conductivité thermique sont liées (loi de Wiedemann-Franz). La seconde est prépondérante dans les isolants tels que les silicates constitutifs des roches de la croûte et du manteau.

Le transfert de chaleur par rayonnement est un processus qui peut être assimilé à un processus de conduction thermique, selon les propriétés des matériaux (voir discussion § 2.3). Dans ce cas, et pour les silicates, la conductivité (diffusivité) totale  $K_T$  ( $D_T$ ) sera divisée en deux contributions: l'une liée au réseau cristallin, notée  $K_L$  ( $D_L$ ) ( $L$  pour Lattice) et l'autre liée au rayonnement  $K_R$  ( $D_R$ ) telles que :

$$K_T = K_L + K_R \quad \text{et} \quad D_T = D_L + D_R \quad (2.5)$$

Ces deux processus seront abordés à l'échelle microscopique en essayant d'établir des relations théoriques expliquant leur comportement en fonction de la minéralogie, de la pression, de la température, et de l'orientation des axes cristallographiques. L'approche macroscopique utilisée ensuite consistera à calculer et à mesurer les propriétés de transport thermiques directement sur monocristaux et agrégats polycristallins et à relier ces mesures aux prédictions théoriques.

## **2.2 Transfert thermique par les vibrations du réseau cristallin**

### **2.2.1 Les phonons**

D'un point de vue classique, le transport de chaleur dans les solides (cristallins ou amorphes) est associé aux vibrations du réseau cristallin et à la propagation d'ondes mécaniques. D'un point de vue quantique, le concept de quasi-particules associées aux vibrations du réseau cristallin est introduit afin de rendre compte de la quantification de l'énergie dans les réseaux. Le terme *phonons* est alors employé pour désigner ces quasi-particules. Cette quantification, et les principes physiques de la mécanique quantique qui lui sont associés, est analogue à la quantification de l'énergie électromagnétique par les photons, ou encore à la quantification des états d'énergie des électrons ou des neutrons. Les phonons,

tout comme les photons, sont des bosons dans le sens où leur masse est nulle et le taux d'occupation d'un niveau d'énergie est donné par la statistique de Bose-Einstein (eq. 2.6). Les phonons sont caractérisés par un couple  $(\omega, \vec{q})$ , où  $\omega$  est la fréquence angulaire et  $\vec{q}$  est le vecteur d'onde. Ils ont une énergie  $\varepsilon = \hbar\omega$  et une quantité de mouvement  $\vec{p} = \hbar\vec{q}$ . (ou plutôt quasi-quantité de mouvement car ils ont une masse nulle), ce qui permet de traiter les interactions entre ondes élastiques et particules matérielles ou non (phonons, électrons, photons ou encore neutrons) comme des processus d'annihilation et de création de phonons. Les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement sont alors applicables lors de ces processus. Cependant, et à la différence des photons, la symétrie de translation des cristaux impose que la quantité de mouvement est conservée à un vecteur de l'espace réciproque près. Ceci est un point fondamental pour les processus de diffusion thermique (voir paragraphes suivants).

Les vibrations collectives dans un cristal sont par conséquent assimilées à un gaz de phonons occupant différents niveaux d'énergie. L'occupation moyenne d'un niveau d'énergie  $N(\omega, \vec{q})$  donné varie selon la statistique de Bose-Einstein :

$$N(\omega, \vec{q}) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (2.6)$$

où  $\hbar$  est la constante de Planck et  $k_B$  la constante de Boltzman.

Le concept de phonons sera par la suite détaillé, en se focalisant sur les problèmes liés à la conduction thermique. Dans la suite, le vecteur d'onde  $\vec{q}$  sera noté simplement  $q$ .

### 2.2.2 Apport de la théorie cinétique des gaz : applications aux phonons

Le concept de gaz de phonons permet d'assimiler la conductivité thermique du solide à celle d'un gaz de quasi-particules susceptibles d'entrer en collision entre elles (Brüesch, 1986). La théorie cinétique des gaz s'applique donc à ces particules (Klemens, 1958). Ainsi, entre deux collisions, l'interaction entre deux phonons est supposée négligeable, les phonons se comportant comme des particules libres. Le libre parcours moyen  $l$  d'un phonon est alors défini comme étant la longueur qui sépare, en moyenne, deux collisions successives du phonon. En considérant que la vitesse des particules est constante entre deux collisions et égale à  $v_m$ , alors la durée  $\tau$  (appelée temps de vie d'un phonon) qui sépare deux collisions est égale à :

$$\tau = \frac{l}{v_m} \quad (2.7)$$

En évaluant le flux de phonons en interaction dans un volume donné sous l'effet d'un gradient de température (équation de Boltzman), le calcul de la conductivité thermique est immédiat (e.g., Brüesch, 1986).  $K_L$  est alors fonction de la capacité thermique volumique  $C$  du gaz, de la vitesse des phonons  $v_m$  et du libre parcours moyen  $l$  :

$$K_L = \frac{1}{3} C \cdot v_m \cdot l \quad \text{soit} \quad D_L = \frac{1}{3} v_m \cdot l \quad (2.8)$$

La vitesse  $v_m$  correspond à la vitesse de propagation de l'énergie, donc à la vitesse de groupe des phonons. De plus, le milieu est dispersif (relation non linéaire entre fréquence angulaire  $\omega$  et vecteur d'onde  $k$ ) et les phonons se propagent suivant divers modes  $i$  (c'est-à-dire, selon divers vecteurs d'ondes). L'expression de cette vitesse est donc :

$$v_i = \left( \frac{d\omega}{dk} \right)_i \quad \text{pour le mode } i \text{ de propagation} \quad (2.9)$$

Par ailleurs,  $C$  et  $l$  dépendent également du mode de propagation des phonons  $i$ . On établit alors l'expression de la contribution  $K_i$  à la conductivité totale d'un phonon dans le mode  $i$  [Chai et al., 1996], ce qui conduit à l'expression générale:

$$K_L = \frac{1}{3} \sum_i C_i v_i l = \frac{1}{3} \sum_i C_i v_i^2 \tau_i \quad \text{soit} \quad D_L = \frac{1}{3} \sum_i v_i l = \frac{1}{3} \sum_i v_i^2 \tau_i \quad (2.10)$$

Il sera montré que pour les minéraux étudiés, la vitesse des phonons est calculable en considérant les vitesses (de groupe) des ondes acoustiques (approximation aux grandes longueurs d'ondes des phonons). Le calcul de la conductivité thermique implique de plus la connaissance de la capacité calorifique à pression constante. Les études expérimentales, les calculs de dynamique des réseaux et les approches spectroscopiques (Gillet et al., 1991) portant sur la capacité calorifique étant en bon accord pour les minéraux étudiés (olivine et pyroxènes), cette quantité ne sera pas discutée. La principale inconnue dans les problèmes de diffusion thermique est le libre parcours moyen des phonons. Ce dernier dépend d'un grand nombre de paramètres liés à la dynamique des réseaux cristallins (potentiels inter-atomiques, anharmonicité, imperfections du réseau, mais aussi longueur d'onde des phonons et types de phonons) et sa prédiction théorique n'est possible que pour les minéraux simples. Il est par ailleurs difficile de le déterminer directement de façon expérimentale. Les mesures de diffusivité thermique donneront indirectement accès à des estimations de libre parcours moyen, et procureront donc une information des processus de diffusion thermique à l'échelle atomique.

### 2.2.3 Courbes de dispersion et vitesse de groupe des phonons.

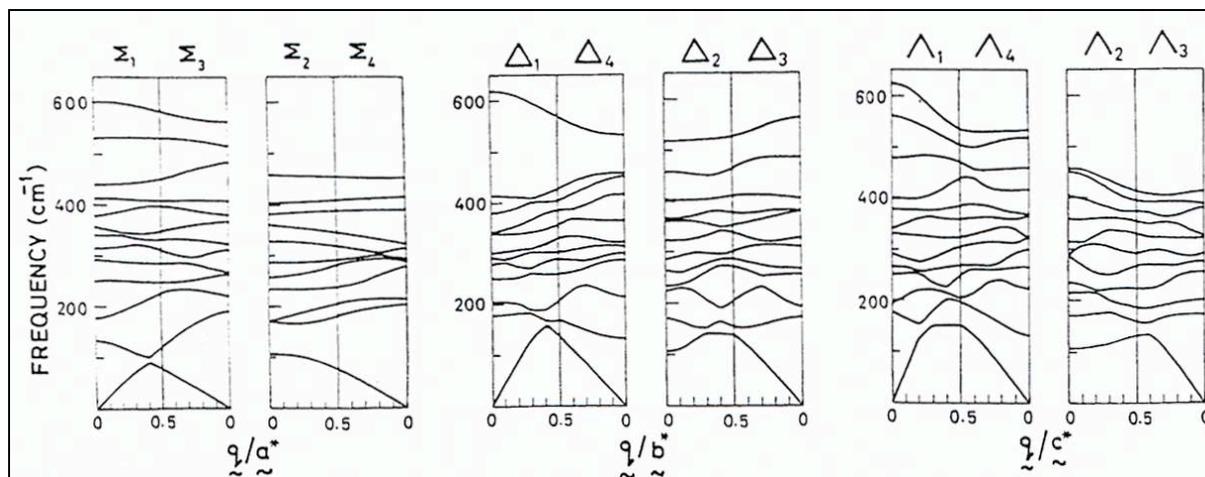
Les phonons se propagent suivant un nombre défini de modes de vibrations qui sont caractéristiques des interactions entre les différents atomes de la maille primitive d'un cristal. Le nombre de ces modes dépend du nombre d'atomes dans la maille primitive, et leurs énergies dépendent des caractéristiques propres des atomes (masses, électronégativité), des forces liant les atomes entre eux, ou bien du type de liaison (covalente, ionique,...). Ces modes se distribuent sur un large spectre de fréquences et présentent une dispersion en fonction des vecteurs d'onde. Selon la relation (2.10), la contribution de chaque mode à la diffusivité thermique peut être calculée si on connaît leurs caractéristiques, c'est à dire, leurs vitesses de groupe et les interactions de ces modes avec la matière (collisions phonons-phonons ou phonons-défauts cristallins) qui déterminent leur libre parcours moyen.

Dans une maille primitive contenant  $N$  atomes, il existe au maximum  $3N$  modes de vibrations, certains pouvant être dégénérés. L'analyse classique des modes de vibration dans un cristal montre la présence de deux types de modes de vibrations : 3 modes dit acoustiques et  $3N-3$  modes dit optiques. Pour chacun de ces modes, la relation entre la fréquence et le vecteur d'onde est calculable (relation de dispersion), ce qui permet d'accéder à leurs vitesses de groupe. La relation de dispersion est étroitement liée à la notion de zone de Brillouin, caractéristique de la périodicité du réseau réciproque.

Pour les minéraux complexes, les courbes de dispersions sont déterminées par des approches expérimentales ou théoriques. Les méthodes spectroscopiques (visible et infrarouge) donnent des informations sur les phonons en centre de zone de Brillouin, à grandes longueurs d'ondes. L'absorption ou réflexion I.R. et la diffusion Raman donnent les énergies des phonons optiques en centre de zone. La diffusion Brillouin permet la détermination des constantes élastiques et des courbes de dispersion des 3 modes acoustiques en centre de zone. Finalement, la diffusion inélastique des neutrons, du fait de l'énergie élevée des neutrons, permet de déterminer les courbes de dispersion d'un grand nombre de modes de vibration, hors du centre de zone.

Pour l'olivine, on compte 28 atomes par maille primitive, soit 84 modes de vibration, parmi lesquels 81 optiques et 3 acoustiques. Les courbes de dispersion ont été déterminées expérimentalement et comparées aux calculs théoriques de dynamiques de réseau (Rao et al., 1988). La vitesse de groupe des phonons est calculable pour la majorité des modes de vibrations. La figure 2.1 montre que la dispersion des modes optiques est très faible par rapport à celle des modes acoustiques et donc que leurs vitesses de groupe sont plus faibles.

Pour les propriétés de transport de chaleur, il est souvent considéré que les modes optiques transportent peu d'énergie, et les calculs sont fondés sur l'analyse des phonons acoustiques (e.g., Roufosse et Klemens, 1974). En faisant l'hypothèse d'une relation de dispersion linéaire (valable en centre de zone), la vitesse de groupe des phonons acoustiques dans une direction donnée sera égale à une moyenne des vitesses des ondes acoustiques de compression et de cisaillement, déduites des constantes élastiques.



**Figure 2.1** : exemple de courbes de dispersion modélisées pour la forsterite suivant les trois vecteurs du réseau réciproque (Rao et al., 1988). Tous les modes (84 au total) ne sont pas modélisés. Les modes optiques (énergies non nulles pour  $q=0$ ) ont leurs fréquences qui varient peu avec le vecteur d'onde, ce qui suggère une faible vitesse de groupe.

Cependant, le nombre de phonons optiques étant très important par rapport à celui des modes acoustiques, et l'activation de ces phonons (hautes fréquences) augmentant avec la température, de nouvelles approches tendent à leur attribuer un rôle accru à haute température (Hofmeister, 1999). Les interactions entre les différents modes de phonons, et le rôle des phonons optiques dans ces interactions feront l'objet d'une discussion dans le paragraphe 2.2.4.4.

### 2.2.4 Libre parcours moyen des phonons dans les cristaux.

Le libre parcours moyen des phonons est avant tout limité, pour les isolants, par deux types principaux d'interactions :

- *la diffusion des phonons par les imperfections statiques du réseau*, soit ponctuelles (atomes différents, isotopes, lacunes, ...), soit linéaires comme les lignes de dislocation, soit planaires comme les parois de dislocations, les « stacking faults » (Ziman, 1962), les joints de grains ou encore les limites de l'échantillon (Brüesch, 1986). Ces contributions auront donc tendance à différer suivant l'échelle à laquelle les propriétés de transport de chaleur sont étudiées (monocristal ou roche). L'effet créé par ces imperfections est souvent considéré comme indépendant de la température.

- *les interactions entre modes de phonons ou encore collisions phonons - phonons* qui apparaissent du moment que les vibrations du réseau cristallin ne sont plus considérées comme harmoniques (Brüesch, 1986). Classiquement, cela se traduit par des interactions entre modes de vibration du cristal, c'est-à-dire, que le champ de contrainte créé par la propagation d'un type d'onde  $(\omega, k)$  modifie la propagation d'un autre type onde  $(\omega', k')$ . Ces interactions s'intensifient avec l'augmentation de la température.

L'importance relative de ces deux types d'interactions dépend donc de la température, mais pour la majorité des cristaux et pour les températures qui prévalent dans le manteau et la croûte terrestre, elles seront plus ou moins efficaces simultanément. Pour un mode de vibration donné de fréquence  $\omega$ , les contributions  $l_{def}$  et  $l_{ph-ph}$  liées aux défauts et aux collisions phonons-phonons se combinent pour donner un libre parcours moyen résultant  $l_{tot}$  :

$$\frac{1}{l_{tot}} = \frac{1}{l_{ph-ph}} + \frac{1}{l_{def}} \quad (2.11)$$

Ainsi les processus d'interaction conduisant au plus court libre parcours moyen contrôleront le libre parcours moyen total et donc la diffusion thermique.

#### 2.2.4.1 Phonons et imperfections du réseau cristallin

Le libre parcours moyen des phonons est limité par divers types de défauts qui interagissent avec les phonons. Ces défauts sont associés à des variations locales de densité (défauts ponctuels unidimensionnels présentant des contrastes de masses), de constantes élastiques ou encore de type de liaison.

On note divers types d'interactions selon les types de défauts:

##### *Interactions avec des défauts planaires*

Ces défauts sont des surfaces de discontinuités entre deux milieux de propriétés physiques différentes: parois de dislocations, joints de grains, fractures, limites de l'échantillon. Les ondes y subissent des phénomènes de réfraction ou réflexion due à un changement d'impédance acoustique.

Ainsi la taille de l'échantillon peut jouer un rôle important lors des déterminations expérimentales de la diffusivité thermique, car les limites de l'échantillon constituent une forte discontinuité. L'analyse des courbes de dispersions associée à la relation de Bose-Einstein montre qu'à très basse température seuls les modes acoustiques de grandes longueurs d'onde sont activés. Ces phonons n'interagissent donc pas avec pas les défauts ponctuels de faibles dimensions et la fréquence de collisions est faible. Le facteur principal limitant la

diffusion thermique à très basse température est donc la taille de l'échantillon. Le libre parcours moyen résultant  $l_{def}$  est le même pour tous les modes (donc indépendant de  $\omega$ ) (Klemens, 1958) et est égal aux dimensions de l'échantillon. En effet, des mesures de conductivité thermique à très basse température ( $T < 10-20K$  environ) montrent que la conductivité ou la diffusivité thermique ne dépendent que de la dimension de l'échantillon (outre la capacité thermique pour la conductivité) (Grimvall, 1986; Klemens, 1958 ; Thacher, 1967).

Une telle analyse peut aussi s'appliquer aux joints de grains et aux microfractures fermées : ils constituent une interface entre deux grains de propriétés différentes. Pour des tailles de grains rencontrés dans les agrégats naturels (du  $\mu m$  au mm), le libre parcours moyen des phonons serait donc de l'ordre du  $\mu m$  ou du mm si ce dernier était limité par les interactions avec de telles interfaces.

De même, les dislocations peuvent interagir avec les phonons. Ce sont des défauts linéaires d'organisation du réseau cristallin auxquels sont associés des contraintes intracristallines et c'est le champ de contrainte présent autour d'une dislocation qui est responsable de l'interaction. Elles peuvent être organisées et former des défauts planaires (parois de dislocations, sous-joints). Une analyse théorique est menée dans (Ziman, 1962) et des mesures de conductivité montrent que l'augmentation de la densité des dislocations contribue à une diminution de la conductivité (Thacher, 1967), mais ceci n'est observé qu'à très faible température ( $< 50K$ ).

### *Diffusion par des défauts ponctuels*

Les défauts ponctuels sont typiquement des atomes substitués (impuretés, isotopes) qui impliquent une perturbation dans la propagation des phonons à cause de contrastes de masses atomiques et de forces inter-atomiques. L'interaction avec les vibrations collectives du cristal peut être décrite par la théorie classique de Rayleigh ou par des méthodes de perturbations (Klemens, 1958). Ces théories prédisent une dépendance en  $1/\omega^4$  du temps de vie des phonons :

$$\frac{1}{\tau_{def}} = n_d \cdot \frac{v_a}{4\pi v^3} \left( \frac{\Delta M}{M} \right)^2 \cdot \omega^4 \quad (2.12)$$

où  $n_d$  est la concentration en défauts de masse  $M + \Delta M$ ,  $v_a$  est le volume de la maille élémentaire et  $v$  est la vitesse du phonon. Pour les modes acoustiques, ce sont ceux qui sont en bord de zone de Brillouin (courtes longueurs d'ondes) qui limiteront  $l$ . Ces modes sont actifs à des températures supérieures à 20K et leurs interactions avec les défauts ponctuels seront efficaces à ces températures. Des mesures de conductivité réalisées sur des cristaux simples (fluorures de lithium ou de sodium) montrent que l'augmentation du pourcentage d'isotopes plus lourds conduit à une diminution importante de la conductivité (Thacher, 1967). De même, les études analysant l'effet des impuretés dans des cristaux de croissance montrent une forte baisse de la conductivité lorsque la pureté des cristaux diminue (par croissances cristallines successives) (Jackson et Walker, 1971).

Ces quelques exemples d'interactions entre phonons et défauts statiques montrent, qu'à l'échelle du cristal, il y a une prédominance de ces effets à très basse température et également une concurrence entre ces effets. Le pic de conductivité observé dans les mesures à des températures cryogéniques résulte de la prédominance des défauts cristallins sur les défauts planaires tels que les joints de grains ou la taille de l'échantillon. Cependant, l'analyse de ces variations de conductivité en fonction de la température montre une forte diminution de la conductivité après ce pic, laissant présager l'activation d'un autre processus d'interaction,

qui devient rapidement prédominant : ce sont les interactions entre les modes de phonons (ou interactions phonons-phonons). Ces interactions sont telles qu'à partir de 50-70K, l'effet des interactions avec les défauts cristallins devient minoritaire. La conductivité thermique est alors exclusivement contrôlée par ce mode d'interaction.

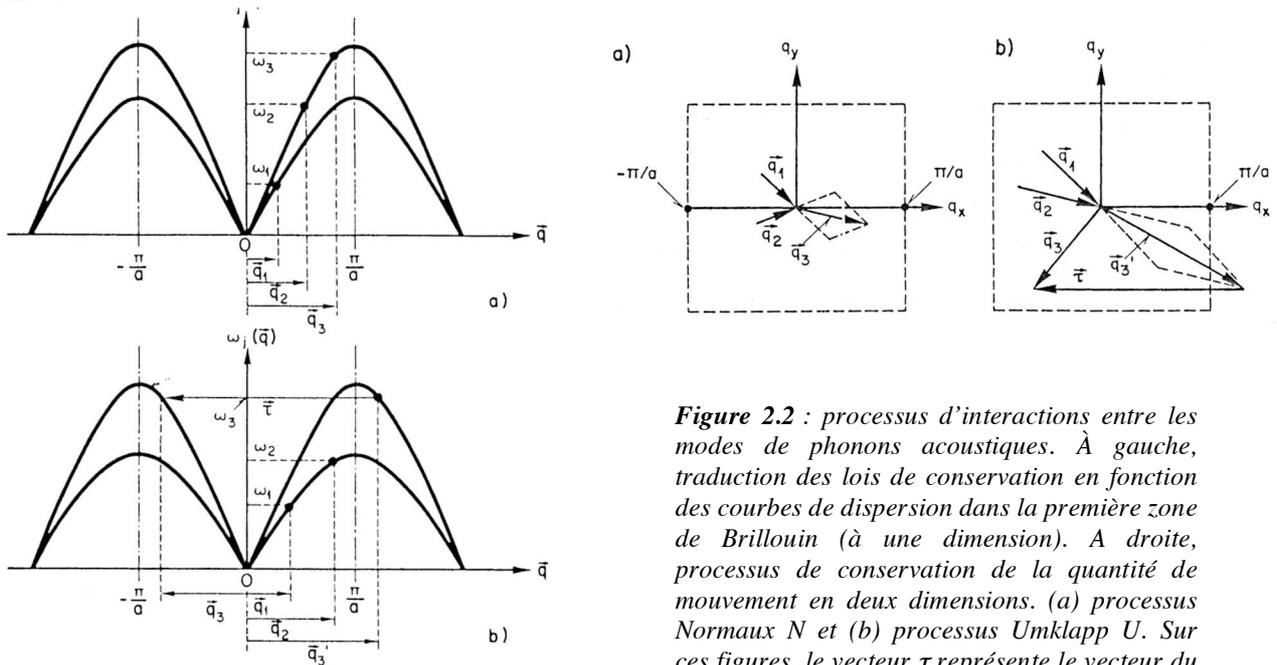
#### 2.2.4.2 Interactions phonons-phonons dans les cristaux simples

Ces processus d'interaction sont caractéristiques des propriétés intrinsèques du cristal, puisqu'ils ne sont pas liés aux défauts cristallins. Ils sont propres aux propriétés dynamiques du cristal, c'est-à-dire, aux vibrations des atomes. Ils résultent de l'interaction entre les différents modes de phonons. Un mode  $(\omega_1, q_1)$  se propageant crée une surpression locale ou une modification locale de la densité qui est susceptible de modifier la propagation d'un autre mode de phonon  $(\omega_2, q_2)$ . Ces interactions rendent compte d'un grand nombre de propriétés physiques. Elles expliquent, entre autres, l'expansion thermique, la variation des constantes de forces et des constantes élastiques avec la température et la pression, l'élargissement des raies d'absorption et le déplacement des pics de diffusion en I.R. et Raman et, surtout, l'existence d'une valeur finie de la conductivité thermique. Toutes ces propriétés sont donc intimement liées. D'un point de vue microscopique, ces interactions sont liées au caractère non harmonique ou anharmonique des potentiels d'interactions entre les atomes. L'expression de ces potentiels dépend de la combinaison de types de liaisons chimiques mise en jeu et des interactions à plus ou moins longues distances qui interviennent. Par exemple, pour les silicates, les liaisons dans les tétraèdres  $\text{SiO}_4$  ont un fort caractère covalent, tandis que celles avec les cations (Mg, Fe, Ca) ont un caractère ionique plus fort. Le potentiel d'interactions atomiques pour un cristal est généralement développé en série et ce sont les termes d'ordre supérieurs à 2 qui contribuent à l'anharmonicité.

Sur la base du développement en série du potentiel d'interactions, l'influence des termes d'ordre 3 et d'ordre 4 sur les modes de vibration est établie par la théorie des perturbations. Elle est appliquée en étudiant un système de phonons en interaction. Les processus importants pour la conduction thermique sont les processus à 3 phonons : l'état initial peut être constitué soit de deux phonons  $(\omega_1, q_1)$  et  $(\omega_2, q_2)$  qui interagissent pour donner un phonon dans l'état final  $(\omega_3, q_3)$ , soit d'un processus de deux annihilations pour une création de phonon. Il peut y avoir également création de deux phonons à partir d'un phonon. Les équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement pour de tels processus s'écrivent :

$$\omega_1 + \omega_2 = \omega_3 \quad \text{et} \quad q_1 + q_2 = q_3 - G \quad (2.13)$$

La structure périodique des cristaux implique que la quantité de mouvement est conservée à un vecteur du réseau réciproque près:  $G$  ( $G$  peut être nul).



**Figure 2.2 :** processus d'interactions entre les modes de phonons acoustiques. À gauche, traduction des lois de conservation en fonction de courbes de dispersion dans la première zone de Brillouin (à une dimension). A droite, processus de conservation de la quantité de mouvement en deux dimensions. (a) processus Normaux  $N$  et (b) processus Umklapp  $U$ . Sur ces figures, le vecteur  $\tau$  représente le vecteur du réseau réciproque  $G$ . D'après Bruesch, (1987).

L'interaction à 3 phonons peut être représentée dans la première zone de Brillouin d'un réseau carré bi-dimensionnel (fig. 2.2). Cette zone contient toutes les valeurs possibles de vecteurs d'onde. Les 2 phonons pointant vers le centre ( $q_1$  et  $q_2$ ) représentent les phonons absorbés par le processus d'interaction et le phonon  $q_3$  est le phonon émis. Le vecteur du réseau réciproque  $G$  est égal à  $2\pi/a$  où  $a$  est le paramètre de maille, choisi ici parallèle à l'axe  $q_x$ . Pour  $G=0$ , le processus est dit normal  $N$  et pour  $G \neq 0$  il est appelé  $U$  (de l'allemand Umklapp – retournement). Pour les types  $N$  et  $U$ , les équations de conservation de l'énergie sont satisfaites (eq. 2.13). Pour  $N$ , on a de plus :

$$q_x + q_{2x} = q_{3x} \quad (2.14)$$

Où les composantes  $q_{1x}$ ,  $q_{2x}$  et  $q_{3x}$  sont toutes 3 positives, tandis que pour  $U$  :

$$q_x + q_{2x} = q_{3x} + G \quad (2.15)$$

Les composantes  $q_{1x}$  et  $q_{2x}$  sont positives, mais  $q_{3x}$  est négatif. À l'équilibre thermique, la quantité de mouvement totale  $P$  du cristal est nulle puisque la population de phonons de vecteurs d'onde  $q$  et  $-q$  est la même. Lorsqu'un gradient de température est imposé, la quantité  $P$  n'est plus nulle. Au cours du processus  $N$ , la variation de quantité de mouvement  $\Delta P$  s'écrit, connaissant la population des phonons (eq. 2.14) :

$$\Delta P = P' - P = \hbar(q_3 - q_1 - q_2) = 0 \quad (2.16)$$

Ainsi, le processus  $N$  conserve la quantité de mouvement du cristal et l'énergie du réseau est redistribuée sans altérer le flux d'énergie. Le courant de chaleur n'est donc pas dissipé, le transport d'énergie se fait sans gradient de température, impliquant une conductivité thermique infinie.

Pour un processus  $U$ ,  $\Delta P$  s'écrit :

$$\Delta P = P' - P = \hbar(q_3 + G - q_1 - q_2) = \hbar G \neq 0 \quad (2.17)$$

La quantité de mouvement totale n'est plus conservée et c'est ce processus qui contribue à la résistance thermique et à une conductivité thermique finie. Pour illustrer les conditions de conservation liées aux deux processus, et l'effet des relations de dispersion, les interactions peuvent être représentées dans la première zone de Brillouin (étendue), pour un cristal comportant un atome par maille (fig. 2.2). Il peut être montré qu'il ne peut y avoir d'interactions entre les phonons appartenant à un même mode. Les différences de vitesses de groupes entre phonons acoustiques longitudinaux (les plus rapides) et transverses permettent toutefois l'interaction entre ces modes et les relations de conservations imposent seulement deux processus d'interactions (aussi bien pour les interactions de type U ou type N) :

Transverse acoustique + Transverse acoustique : Longitudinal acoustique  
 Transverse acoustique + Longitudinal acoustique : Longitudinal acoustique

Par ailleurs, les processus  $U$  impose que  $q_1 + q_2 > G/2$ , donc ce type de processus n'est possible que lorsque des phonons d'énergie suffisante sont activés.

Il est possible de calculer théoriquement le libre parcours moyen des phonons présents dans un cristal à une température donnée et soumis aux processus  $U$ , en utilisant la théorie des perturbations selon laquelle la probabilité de transition d'un état initial  $((\omega_1, q_1), (\omega_2, q_2))$  (avant l'interaction) vers un état final  $(\omega_3, q_3)$  est :

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle q_3, q_3 | H | q_1, q_2 \rangle|^2 \cdot \delta(q_1 + q_2 - q_3 - G) \cdot \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3) \quad (2.18)$$

où  $H'$  correspond à la perturbation de l'Hamiltonien, soit  $H = H_{\text{harm}} + H'$ , qui contient les termes de potentiels supérieur à deux.

Le taux d'occupation des modes de phonons impliqués (Statistique de Bose-Einstein donnant  $N(\omega, q)$ ) étant connu, la fréquence de collision  $\tau$  est alors:

$$\frac{1}{\tau} \propto N.N' \quad (2.19)$$

avec  $N = N(q_1)$ ,  $N' = N(q_2)$ . A basse température, la probabilité de transition est directement liée à la probabilité d'occupation des niveaux  $(\omega_1, q_1)$ ,  $(\omega_2, q_2)$ , soit au produit :

$$\frac{1}{\tau} \propto N.N' \cong \exp\left(-\frac{\hbar\omega_1}{k_B T}\right) \times \exp\left(-\frac{\hbar\omega_2}{k_B T}\right) \cong \exp\left(-\frac{\hbar\omega_3}{k_B T}\right) \cong \exp\left(-\alpha \cdot \frac{\theta_{\text{Debye}}}{T}\right) \quad (2.20)$$

où  $\theta_{\text{Debye}}$  est la température de Debye du solide (correspondant à la température pour laquelle les modes acoustiques en bord de zone sont peuplés) et  $\alpha$  est une constante inférieure à 1. La diffusivité varie comme :

$$D \propto \exp\left(\alpha \cdot \frac{\theta_{\text{Debye}}}{T}\right) \quad (2.21)$$

A des températures supérieures à la température de Debye, la distribution de Bose-Einstein implique que le taux d'occupation d'un niveau d'énergie de phonon est proportionnel à la température car  $k_B T \gg \hbar\omega$ . L'association des lois de conservation de l'énergie et de la probabilité de collision entre deux phonons  $(\omega_1, q_1)$  et  $(\omega_2, q_2)$  (égale au produit de leur taux

d'occupation) implique que la probabilité pour qu'il y est collision est proportionnelle à la température, d'où :

$$D \propto l \propto \frac{1}{\tau} \propto \frac{1}{T} \quad (2.22)$$

La difficulté du calcul précis réside dans l'évaluation du terme  $H'$  qui est une fonction qui dépend des fréquences et vecteurs propres du système de phonons, des potentiels d'interactions, masses atomiques, nombre d'atomes par maille. Ce terme a été défini pour les gaz rares (à l'état solide) (Julian, 1965 3823) et repris pour des cristaux plus complexes (Roufosse et Klemens, 1973; Slack, 1979). L'accord entre théorie et mesures de conductivité est satisfaisant pour des cristaux simples comportant 1 atome par maille (Slack, 1979), mais pour des minéraux complexes, le rôle des modes optiques rend le calcul plus délicat. La relation généralement admise pour l'expression du libre parcours moyen des phonons  $l$  est la suivante. Elle est déduite des travaux sur les minéraux monoatomiques (gaz rares) (e.g., Julian, 1965), pour lesquels il n'y a pas de mode optiques:

$$l = \frac{\sqrt{2} M v^4}{12 k_B T \pi^3 q^2 v^2 a} \quad (2.23)$$

où  $M$  est la masse molaire,  $v$  la vitesse des phonons,  $a$  le paramètre de maille et  $\gamma$  est le paramètre de Grüneisen, qui lie la variation de pression dans le milieu à la variation de fréquence  $\nu_i$  du mode de phonons  $i$ :

$$\gamma = - \frac{\partial \ln \nu_i}{\partial \ln V} \quad (2.24)$$

Ce paramètre rend compte des propriétés anharmoniques d'un réseau atomique et les interactions entre les modes de phonons. En effet, un mode se propageant crée une surpression locale qui a pour effet de modifier la fréquence d'un autre mode de phonon, d'où l'interaction entre les modes. Ce paramètre est quantifiable par l'analyse des variations de fréquence des modes de vibrations (spectroscopies) en fonction de la pression. Il sera utilisé pour discuter les propriétés anisotropes des cristaux d'olivine (e.g., Chai et al., 1996; Kobayashi, 1974) dans le chapitre 5.

Pour conclure, les calculs théoriques et les mesures de diffusivité thermique conduits sur quelques minéraux à température ambiante montrent que les interactions entre les modes de phonons limitent leur libre parcours moyen à des valeurs de l'ordre de quelques Angström (Seipold, 1998). Pour l'olivine, reprenant les données de Chai et al. (1996) et une moyenne arithmétique des vitesses acoustiques, on trouve un libre parcours moyen d'environ 9 Å à température ambiante.

### 2.2.4.3 Cas des solutions solides

Si pour une espèce ayant une structure cristallographique donnée, des substitutions d'atomes en très faibles quantités (ou impuretés) ne semblent pas avoir d'effets sur la conductivité thermique (à température ambiantes et plus), la formation de solutions solides par substitution a des effets importants sur la conductivité. En particulier, l'insertion importante (>1%) dans le réseau atomique d'atomes dont les tailles et masses sont très différentes de celles des atomes substitués peut avoir un effet non négligeable. Des mesures

de conductivités conduites sur le système MgO-NiO montrent que lorsque la proportion de NiO augmente, la conductivité diminue fortement (Kingery, 1962). Les effets sont très prononcés à basse température, mais persistent à haute température. Cela montre qu'outre l'effet d'impureté joué par l'insertion de nickel (diffusion de type Rayleigh-voir plus haut), ce dernier affecte les propriétés dynamiques du cristal, en augmentant les effets anharmoniques. Ces effets sont d'autant plus importants que le solide de départ est simple, comporte des atomes légers et fortement liés et a une conductivité élevée, comme l'oxyde de magnésium.

Pour l'olivine, le même effet est attendu entre les pôles forsterite et fayalite. En effet, à la proximité du pôle forsterite, c'est-à-dire, pour des compositions typiques du manteau, l'augmentation de la teneur en Fer diminue fortement la conductivité thermique (Horai and Simmons, 1969). D'autres éléments tels que le nickel ou le manganèse ne sont présents qu'en très faibles quantités (<0.5% des cations) et la variation de leurs concentrations n'affecte pas la conduction thermique à haute température. Par contre, il faudra toujours tenir compte de la proportion de fer, qui peut varier de quelques pourcents suivant les roches ou minéraux étudiés.

#### 2.2.4.4 Cas des cristaux complexes et rôle des phonons optiques

Dans les cristaux complexes, comportant  $N$  atomes par maille élémentaire, on peut approcher la structure par  $N$  sous-réseaux comportant un seul atome par maille et calculer la contribution des  $N$  sous-réseaux à la conductivité thermique (Slack, 1979). Les interactions entre phonons acoustiques sont prises en compte en considérant que leur probabilité de collisions est directement proportionnelle à  $N$ . La conductivité résultante, en considérant les effets du nombre d'atomes par mailles sur les fréquences de vibrations (modèle de Debye), montre une variation de la conductivité thermique en  $N^{-2/3}$  (Roufousse et Klemens, 1973; Slack, 1979).

La comparaison entre cette approche et les mesures directes sur des minéraux simples ( $N=2$ ,  $N=3$  atomes par mailles) montre qu'un accord est trouvé lorsque les contrastes de masses entre les atomes est élevé et que les mesures donnent des valeurs plus hautes que les modèles si les contrastes de masses approchent 1 (par exemple, pour le RbBr ou le KCl). Pour des contrastes de masses proches de 1, on peut montrer que la largeur de la bande interdite comprise entre les courbes de dispersion des modes optiques et celles des modes acoustiques est très faible (e.g., Kieffer, 1979) et que les modes optiques vibrent à des fréquences proches de celles des modes acoustiques. Il en résulte une vitesse de groupe des modes optiques assez élevée et un transport de chaleur par ces phonons non négligeable (20-50%). La diminution de la conductivité avec  $N$  est ainsi mise en évidence pour un grand nombre de cristaux et une limite inférieure est atteinte pour les matériaux amorphes. Cependant, pour les minéraux plus complexes, la prédiction de la conductivité thermique est meilleure lorsque uniquement les phonons acoustiques sont considérés.

Toutefois, dans les minéraux complexes, les modes optiques sont en forte proportion par rapport aux modes acoustiques : pour l'olivine, on compte 81 modes de phonons optiques pour 3 modes acoustiques. Cette proportion est à l'origine de développements récents en matière de conductivité thermique (Hofmeister, 1999; Hofmeister, 2001). L'activation croissante des phonons optiques avec la température devrait augmenter le transport de chaleur par les minéraux et contrebalancer la dépendance en  $T^{-1}$ . C'est ce qui est suggéré par (Hofmeister, 1999), où une dépendance en  $T^{-a}$  est attendue avec  $0 < a < 1$ . Il est montré qu'au plus la complexité du cristal augmente, au plus la valeur de  $a$  diminue ( $a=0.9$  pour MgO et  $a=0.3$  pour l'olivine).

Finalement, la complexité des cristaux conduit à diminuer non seulement leur conductivité thermique, mais aussi la dépendance en température de cette conductivité thermique (voir les

données de Seipold, (1998)). Cette faible dépendance peut être interprétée, outre l'hypothèse de l'activation croissante des modes optiques, comme un effet de saturation dû à la présence d'une limite inférieure de la conductivité thermique.

#### 2.2.4.5 Limite inférieure de la diffusivité thermique.

La limite inférieure de la conductivité thermique (pour les isolants) est introduite pour tenir compte du fait que les phonons, par définition, ne peuvent pas avoir un libre parcours moyen inférieur à leur longueur d'onde et donc aux distances inter-atomiques. Les problèmes liés à la limite inférieure de ce libre parcours moyen sont divers : comment est définie la limite inférieure, est-elle liée aux distances inter-atomiques, à l'état de désorganisation du solide (transition de phase, point de fusion, désordre structural) ? À quelle température est-elle atteinte, comment la relier au point de fusion du cristal ? Pour la conductivité thermique, une limite inférieure du libre parcours moyen des phonons peut conduire à une déviation de la loi en  $T^{-1}$  à haute température, si cette limite est atteinte à des températures suffisamment faibles (loin du point de fusion). Si cette limite est proche du point de fusion, alors la déviation de la loi en  $T^{-1}$  sera faible. Très peu d'études expérimentales documentent les problèmes de limite inférieure de la conductivité thermique à haute température, proche du point de fusion. En effet, pour la plupart des minéraux et des méthodes de mesures utilisées, la contribution radiative à la conductivité thermique n'est pas négligeable et la conductivité thermique mesurée ne donne jamais directement la contribution des phonons.

Cependant, des mesures montrent que la conductivité thermique des minéraux mal ordonnés, chimiquement complexes (divers cations en proportions importantes) tels que les feldspaths, est faible et qu'une limite inférieure est atteinte à basse température (100°C environ) (Cahill et al., 1992 ; Höfer and Schilling, 2002). La limite inférieure de la conductivité thermique est rapidement atteinte à cause de la complexité du solide et le libre parcours moyen des phonons est très proche des distances inter atomiques, même sous conditions ambiantes. Les mêmes conclusions sont établies pour les verres, dont la désorganisation structurale explique un minimum de conductivité atteint à basse température. Pour les solides ordonnés et peu complexes (peu d'atomes par maille), la désorganisation structurale peut être due à un changement d'état (point de fusion par exemple) ou à une transition de phase. Il sera montré par la suite (chapitre 3), en utilisant des mesures de diffusivités thermiques sur des verres et des monocristaux de quartz, que la transition  $\alpha$ - $\beta$  du quartz s'accompagne effectivement d'un minimum de diffusivité thermique, correspondant à la conductivité thermique du verre de silice. Par contre, l'effet de la proximité du point de fusion sur la conductivité thermique des minéraux est peu documenté.

Une nouvelle méthode de mesure (décrite au chapitre 3), qui ne mesure que la contribution des phonons, a montré qu'il existait une limite inférieure à la conductivité thermique de l'olivine, à des températures assez faibles (Harrell et al., 2002). Des considérations plus théoriques proposent une évaluation de cette limite inférieure (exemple de l'alumine et de l'oxyde de thorium) (Slack, 1979). D'autres études montrent cependant que pour les minéraux complexes (d'intérêts géophysiques), la loi en  $T^{-1}$  est valable jusqu'au point de fusion (Roufousse et Klemens, 1973; Roufousse et Klemens, 1974).

### 2.2.5 Conséquences : effet de la température sur la diffusion thermique

Si le calcul des valeurs absolues de la contribution des phonons à la conductivité thermique des minéraux complexes demeure problématique, les dépendances en températures de la contribution des phonons sont relativement bien contraintes par les mesures en laboratoire pour des températures intermédiaires (<1000°C pour la plupart des méthodes de mesure).

L'intérêt pour l'expérimentateur est de pouvoir extrapoler ses mesures à très haute température, la plupart des méthodes n'étant précises que jusqu'à 800-1000°C. Les modèles théoriques sont donc nécessaires pour extrapoler des mesures, et inversement, lorsqu'ils sont validés expérimentalement par des mesures sur un grand nombre de minéraux, ces modèles sont utilisés pour des minéraux instables sous les conditions du laboratoire, comme les minéraux du manteau inférieur. Les deux problèmes majeurs qui contrarient la théorie classique de la conductivité thermique, qui prédit un libre parcours moyen qui varie en  $T^{-1}$ , sont la méconnaissance du rôle des phonons optiques et de la présence d'une limite inférieure à la conductivité. Par ailleurs, les processus décrits précédemment sont valables à volume constant. Or il est montré que la variation de volume peut avoir un effet sur les interactions phonons-phonons et que l'expansion thermique (à pression constante) amplifie la variation de ces interactions avec la température (Slack, 1979). Cependant, les mesures de conductivité thermiques  $K_L$  de Beck et al. (1978) conduites sur des monocristaux d'olivine à faible température (<600K) mettent en évidence une faible variation de la dépendance en température en fonction de la pression (moins de 1% par GPa). Cette étude est toutefois réalisée sur une faible gamme de température.

La dépendance en température de la diffusivité thermique est essentiellement liée à celle du libre parcours moyen. Lorsqu'il est limité par les défauts et les interactions entre phonons et en négligeant la dépendance en température de la vitesse de groupe des phonons (<5%/1000K), on peut écrire :

- dans le cas d'interactions anharmoniques entre les modes acoustiques seulement:

$$D_L = \frac{1}{A+B.T} \quad (2.25)$$

où A dépend des interactions entre phonons et défauts, tandis que B dépend des interactions phonons-phonons.

- si sur la gamme de température considérée, la limite inférieure de la diffusivité thermique est atteinte :

$$D_L = \frac{1}{A+B.T} + D_0 \quad (2.26)$$

où  $D_0$  représente la limite inférieure de la diffusivité thermique (à haute température).

- si les modes optiques sont activés, l'expression adaptée de Hofmeister (1999) donne :

$$D_L(T) \cong D(298) \cdot \left(\frac{298}{T}\right)^a \quad (2.27)$$

avec  $a$  constant et dépendant de l'espèce minérale (nombre de modes optiques).

Ces différentes lois, directement issues des considérations théoriques développées plus haut, sont les plus utilisées en Sciences de la Terre (Seipold, 1998). Elles seront utilisées pour interpréter les mesures de diffusivité thermique et les extrapoler. L'obtention des paramètres

$A$  et  $B$  dans l'équation (2.26) ou encore  $a$  dans l'équation (2.27) sera utile pour contraindre et séparer la contribution des imperfections du réseau cristallin et celle des interactions entre modes de phonons, et pour discuter l'anisotropie.

### 2.2.6 Effet de la pression

L'effet de la pression se traduit généralement par une augmentation de la conductivité thermique des cristaux d'environ 4-5% par GPa (excepté pour les verres de silice, pour lesquels il a été montré que la diffusivité thermique diminue avec la pression (Katsura, 1993)) (e.g., Hofmeister, 1999; Katsura, 1995). D'après l'équation (2.8), les variations de la vitesse des phonons et du libre parcours moyen seront responsables de la variation de la diffusivité en fonction de la pression. Pour l'olivine, la vitesse des phonons, calculée à partir des constantes élastiques, varie en moyenne de 0.6 % par GPa (Abramson et al., 1997). Reprenant l'expression du libre parcours moyen des phonons proposée par Roufosse et Klemens (1974), les dérivées en pression sont évaluables. Si les variations des vitesses des phonons à une température donnée (donc pour une distribution des phonons en fréquence donnée) sont prises en compte, les autres termes étant supposés constants (paramètres de maille, paramètre de Grüneisen), une variation théorique d'environ 3% par GPa est attendue. Ceci montre que les variations de la diffusivité thermique en fonction de la pression sont faibles à l'échelle du monocristal, et sont essentiellement dues aux variations de la vitesse des phonons.

Le rôle de la température sur les dépendances en pression (dérivées croisées) est mal contraint. Seules les mesures de Beck et al. (1978) conduites jusqu'à 300°C montrent un effet faible de la température. Les vitesses acoustiques étant encore mal documentées à haute pression-haute température, les dérivées croisées sont peu contraintes, ce qui ne permet pas d'évaluer leurs effets sur la diffusion thermique.

L'effet de la pression à l'échelle de l'agrégat sera discuté dans le chapitre 4.

### 2.2.7 Remarques sur l'anisotropie de la conduction thermique.

La diffusion thermique est une propriété qui est très anisotrope à l'échelle du monocristal et elle est définie par un tenseur d'ordre 2. Elle est généralement plus anisotrope que les vitesses acoustiques. Ainsi pour l'olivine et le quartz sous conditions ambiantes, l'anisotropie maximale des vitesses d'onde de compression est d'environ 25%, alors que celle de la diffusivité thermique est d'environ 50% et 60% (Chai et al., 1996; Höfer et Schilling, 2002). La prédiction théorique de l'anisotropie de la diffusion de la chaleur dans un cristal reste un problème très peu documenté et seules des mesures sur un grand nombre de cristaux permettent de comprendre les mécanismes intrinsèques de l'anisotropie. Des liens qualitatifs entre les propriétés thermiques anisotropes et d'autres propriétés anisotropes (expansion thermique, compressibilité, vitesses acoustiques, paramètres de Grüneisen) sont possibles. D'après la discussion précédente, deux phénomènes peuvent expliquer l'anisotropie de diffusivité thermique: tout d'abord une distribution préférentielle des défauts dans le cristal ou bien des variations de la probabilité de collisions phonons-phonons qui dépendrait alors de la direction cristallographique considérée. Les défauts influençant faiblement la conductivité thermique des silicates à température ambiante et haute température, leur influence est considérée comme négligeable. Pour les collisions phonons-phonons, l'expression (2.23) n'est valable que pour les matériaux isotropes, mais certains de ses termes sont anisotropes, comme la vitesse des phonons ou le paramètre de Grüneisen. Le rôle des collisions phonons-phonons sur l'anisotropie de diffusivité thermique des cristaux est aussi suggéré par les comportements similaires entre les différentes propriétés anisotropes liées à l'anharmonicité du réseau

cristallin (diffusivité et expansion thermique, par exemple) qui montrent que l'anharmonicité contrôle l'anisotropie de ces propriétés.

De façon générale, deux remarques qualitatives peuvent se dégager des mesures de diffusivité thermique sur les silicates. La première se fonde sur la structure des silicates : la disposition des tétraèdres  $[\text{SiO}_4]^{4-}$  semble être un facteur déterminant pour la diffusion thermique. En effet, la conduction est avant tout permise par les vibrations des liaisons Si-O, qui ont un fort caractère covalent (Horai et Simmons, 1969). Pour certains silicates (en chaînes, phyllosilicates...), ces tétraèdres sont liés entre eux par liaison covalente Si-O suivant des directions ou des plans donnés, qui correspondent alors aux directions de conductivité maximales (voir données de Clauser et Huenges, 1995 pour la biotite et la muscovite). Pour l'orthopyroxène, la direction [001] est celle selon laquelle les tétraèdres sont liés entre eux par liaisons covalentes, et [001] est aussi la direction de plus forte conductivité (Chai et al., 1996).

La deuxième remarque concerne le lien avec la vitesse des phonons (vitesses acoustiques), naturellement introduit dans l'expression du libre parcours moyen. Les directions le long desquelles les vitesses acoustiques sont les plus élevées sont souvent les directions où la conduction thermique est la plus forte (e.g., Höfer et Schilling, 2002). Cependant pour des minéraux tels que les pyroxènes, le lien entre conductivité thermique et vitesses acoustiques n'est plus aussi direct et c'est l'effet de la disposition des tétraèdres qui prévaut.

Pour l'olivine, la situation est plus complexe car, d'une part, les tétraèdres ne sont pas liés entre eux et, d'autre part, les données antérieures montrent que la relation entre vitesses acoustiques et conductivité thermique n'est pas aussi évidente. Cela fera l'objet d'une discussion plus approfondie dans le chapitre 5.

Enfin, la variation de l'anisotropie en fonction de la température est mal documentée, mais l'essentiel des études montre que l'anisotropie observée à basse température se conserve à haute température (Harrell et al., 2002; Höfer et Schilling, 2002; Kobayashi, 1974). Cependant, ces études ont été conduites à pression ambiante et l'expansion thermique anisotrope peut induire aussi une contribution à l'anisotropie de conduction thermique (voir plus haut l'effet possible des variations de volume sur la conductivité). Que se passe-t-il si l'expansion thermique est compensée par la compressibilité? Une étude à 2.5 GPa sur l'olivine montre une nette diminution de l'anisotropie en fonction de la température (jusqu'à 1500K) (Schärmeli, 1982). Cependant, ce point demeure très mal documenté, car aucune autre étude à très haute pression (plusieurs GPa) ne tient compte de l'anisotropie. Compte tenu du fait que la pression ne fait que très peu varier les dépendances en température (Beck et al., 1978), on peut toutefois envisager que selon chaque direction, la dépendance en température à pression ambiante et haute pression devrait être la même et donc que la variation de l'anisotropie à basse ou haute pression devrait être identique.

## 2.3 Transport de chaleur par le rayonnement électromagnétique.

### 2.3.1 Caractéristiques d'un milieu rayonnant.

Tout corps porté à une température  $T$  émet un rayonnement électromagnétique caractéristique, par l'énergie qu'il émet et par la gamme de longueur d'onde dans laquelle il rayonne. Ce sont les travaux de Planck au début du siècle qui ont permis de quantifier ce rayonnement. Pour un corps réel, l'énergie rayonnée suit la loi de Stefan-Boltzman qui lie l'excitance  $M$  d'une source à sa température :

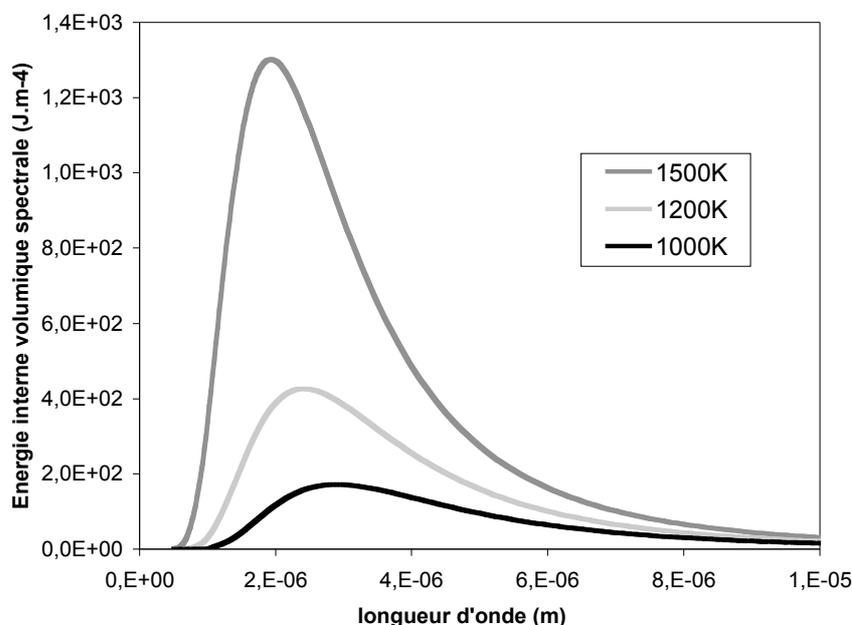
$$M = E(\lambda, T) \cdot \sigma \cdot T^4 \quad (2.28)$$

Où  $E(\lambda, T)$  est l'émissivité (égale à l'unité pour le corps noir) et  $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzman égale à  $56,71 \cdot 10^{-9} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$ .

L'énergie interne volumique spectrale  $\varepsilon_\nu$  à la fréquence  $\nu$  et à la température  $T$  d'une cavité rayonnante en équilibre est :

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3 \exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad (2.29)$$

où  $c$  est la vitesse de la lumière dans le milieu,  $h$  est la constante de Planck et  $k_B$  est la constante de Boltzman. Le spectre d'émission du corps noir est ainsi déduit (fig. 2.3).



**Figure 2.3 :** Spectre d'émission du corps noir d'après la loi de Planck et illustration de la loi de Wien (Déplacement du maximum d'émission vers les faibles longueurs d'onde lorsque la température augmente).

L'énergie rayonnée est échangée avec le milieu extérieur. Un corps à une température  $T$  échange de l'énergie  $Q$  par rayonnement avec le milieu environnant à la température  $T_0$  selon:

$$Q = \sigma \cdot E \cdot (T^4 - T_0^4) \quad (2.30)$$

qui pour des faibles gradients de température, devient :

$$Q = 4 \cdot \sigma \cdot E \cdot T_0^3 \cdot (T - T_0) \quad (2.31)$$

L'échange d'énergie par rayonnement entre deux milieux de températures proches est proportionnel à leur température élevée au cube. La contribution de ce processus au transport thermique peut donc devenir très importante à haute température, ce qui justifie l'intérêt d'étudier les échanges radiatifs dans un corps soumis à un gradient de température. La quantification du rayonnement par les photons est introduite pour rendre compte, comme avec les phonons, de la quantification des niveaux d'énergie des ondes électromagnétiques. A la notion de gaz de photon sont associés les notions de capacité thermique de ce gaz et du libre parcours moyen des photons  $l_{\text{photon}}$  dans le milieu. L'inverse du libre parcours moyen est le coefficient d'extinction, noté  $\alpha_e$ . Pour caractériser ce libre parcours moyen par rapport aux dimensions du milieu, l'épaisseur optique  $t$  du milieu est introduite comme :

$$t = \int_0^l \frac{ds}{l_{\text{photon}}} = \frac{l}{l_{\text{photon}}} \quad (2.32)$$

où  $l$  est la dimension du milieu dans la direction de propagation étudiée et  $ds$  est un élément de longueur dans cette direction. L'intégrale se simplifie si le milieu est uniforme.

Si  $t < 0,1$  alors le milieu est dit optiquement fin.

Si  $t > 2-3$  alors le milieu est dit optiquement épais.

Ce concept d'épaisseur optique est fondamental pour l'étude du transfert radiatif.

### 2.3.2 Transfert radiatif et notion d'équilibre radiatif

Deux notions sont fondamentales dans le traitement du transfert radiatif : l'équilibre thermodynamique local et l'équilibre radiatif dans l'approximation de diffusion (Brewster, 1992).

L'équilibre thermodynamique local se réfère aux transitions entre les états d'énergie du milieu, donc à des aspects microscopiques. Les transitions entre ces états définissent les propriétés d'absorption et d'émission du milieu. Si les transitions se produisent rapidement, la distribution de Boltzman est établie entre les différents niveaux d'énergie et le rayonnement émis par le système n'est défini que par l'état d'équilibre du système, contrôlé par sa température, sa pression, et sa densité. Dans ce cas, l'émission est contrôlée par la loi de Planck énoncée précédemment et les lois de Kirchhoff relatives au rayonnement sont applicables : ces lois stipulent que l'émission du matériau est égale à son absorption. Si les transitions entre les niveaux d'énergie ne sont pas suffisamment rapides pour atteindre l'équilibre (donc une distribution de Boltzman), le système ne peut s'équilibrer avec le rayonnement qui le traverse. C'est le cas des milieux traversés par un flux important de photons, ou des milieux où la pression est faible (densité faible, milieux gazeux très dilués) ou les cavités lasers. Pour ces conditions hors d'équilibre local, l'émission n'est plus décrite par la loi de Planck et le matériau ne contrôle pas sa température : sa température n'est donc pas définie.

Du point de vue du transfert de chaleur par rayonnement, l'équilibre thermodynamique local, qui conditionne l'émission de la source, est à mettre en relation avec l'approximation de diffusion. Comme avec les phonons, l'approximation de diffusion, pour laquelle la distribution de Boltzman est applicable, impose que le libre parcours moyen des photons soit très inférieur à l'épaisseur du milieu en équilibre thermique (c'est-à-dire, un milieu

optiquement épais). Ainsi, ce sont les processus d'absorption-émission qui définissent la température du milieu, selon les lois de Kirchoff. Une autre formulation qualitative consiste à dire que cette approximation est valable lorsque le libre parcours moyen des photons est inférieur à la distance pour laquelle la température change sensiblement (Brewster, 1992). Le matériau est alors constitué d'une succession d'éléments de volume isothermes en équilibre qui absorbent et émettent un rayonnement. En tout point du matériau, le flux de chaleur et le gradient de température sont ainsi liés et le transfert de chaleur est contrôlé par le matériau. Par contre, lorsqu'un milieu ne permet pas l'approximation de diffusion (milieu optiquement fin), sa température n'est pas localement contrôlée par ses propriétés intrinsèques et le milieu ne contrôle donc pas le transfert radiatif.

Pour les échanges thermiques dans la lithosphère ou dans le manteau convectif, l'équilibre thermodynamique local est assuré par de très faibles gradients thermiques ( $<0.03^\circ\text{C}/\text{m}$ ) et un libre parcours moyen des photons relativement faible (plus de 20 mm pour les verres de silice, moins de 5 mm pour l'olivine (Chui and Gardon, 1969; Shankland et al., 1979). Par contre, lors des expériences de spectroscopies I.R., le flux de rayonnement de la source I.R. traversant l'échantillon est important et l'équilibre peut ne pas être atteint. De même, la plupart des expériences mesurant la diffusivité thermique utilisent des sources importantes d'énergies et de petites tailles d'échantillons (par exemple, les méthodes flash – voir chapitre 3) qui conduisent à des gradients très élevés ( $>10^\circ\text{C}$  sur quelques millimètres). L'équilibre thermodynamique local est donc difficilement atteint lors des mesures de diffusivité thermique en laboratoire, à cause de la petite taille des échantillons, de l'important flux de photons, et des forts gradients thermiques imposés. Un but fondamental des expériences présentées dans le chapitre 4 et 6 est donc de minimiser ce déséquilibre local, en utilisant de faibles sources d'énergies et/ou de grands échantillons.

Le paramètre fondamental contrôlant l'équilibre thermodynamique local est le libre parcours moyen du photon ou l'inverse du coefficient d'extinction du milieu analysé. C'est ce paramètre qui va être étudié par la suite.

### 2.3.3 Contribution radiative à la conductivité thermique dans l'approximation de diffusion.

Dans le cas des enveloppes internes de la Terre (manteau, croûte, couches limites), l'équilibre local est toujours respecté pour les raisons énumérées auparavant. Pour un libre parcours moyen de photon de 2 mm attendu pour l'olivine, l'épaisseur optique pour un élément de 1m de long approximativement isotherme est de 50. Dans ces conditions, le matériau est optiquement épais. Le gradient de température, en l'absence de conduction, est alors contrôlé par cet équilibre local et la loi de Fourier est applicable, en déterminant une conductivité radiative  $K_R$  telle que :

$$\vec{J}_R = - K_R \cdot \overrightarrow{\text{grad}} T \quad (2.33)$$

Pour ce type de milieu, la théorie cinétique des gaz qui découle de la distribution de Boltzman est applicable. La capacité calorifique du gaz de photons peut être calculée à partir de la relation de Planck concernant l'énergie interne volumique spectrale  $\varepsilon_\nu$ . On en déduit  $K_R$  :

$$K_R = \frac{1}{3} \int_0^\infty l_{e,\nu} \cdot \frac{\partial \varepsilon(\nu, T)}{\partial T} \cdot d\nu \quad (2.34)$$

La vitesse des photons étant connue, la seule inconnue demeure le libre parcours moyen des photons  $l_e$ . Or le libre parcours moyen varie avec la longueur d'onde et le rayonnement émis à une température donnée n'est pas monochromatique (spectre d'émission de Planck). Par conséquent, toute longueur d'onde contribue au rayonnement. Pour calculer le libre parcours moyen  $l_e$  à une température  $T$  donnée, la moyenne du coefficient d'extinction défini pour chaque longueur d'onde  $l_\lambda$  (à la température  $T$ ) pondérée par le spectre d'émission de Planck est alors utilisée:

$$l_e(T) = \frac{1}{\alpha_e(T)} = \frac{\int_0^\infty l_\lambda \cdot \frac{\partial \varepsilon(\lambda, T)}{\partial T} \cdot d\lambda}{\int_0^\infty \frac{\partial \varepsilon(\lambda, T)}{\partial T} \cdot d\lambda} \quad (2.35)$$

Ici  $\alpha_e$  est le coefficient moyen d'extinction, ou opacité du milieu, ou encore coefficient d'extinction de Rosseland. Cette pondération permet d'interpréter en termes de transfert radiatif un spectre d'absorption d'un minéral pour lequel est alors définie la valeur  $\alpha_e(\lambda)$ . Lorsque le coefficient d'extinction est connu à une température  $T$  donnée, l'expression (2.34) combinée à la loi de Fourier conduit à l'expression simple de la conductivité radiative  $K_R$  :

$$K_R(T) = \frac{16\sigma \cdot n^2 \cdot T^3}{3} \cdot l_e(T) = \frac{16\sigma \cdot n^2 \cdot T^3}{3 \cdot \alpha_e(T)} \quad (2.36)$$

En conclusion, la détermination du coefficient d'extinction du milieu permet d'évaluer si un milieu est à l'équilibre et, si cette condition est satisfaite, elle permet de calculer le transfert de chaleur par rayonnement d'un matériau soumis à un gradient de température.

### 2.3.4 Coefficient d'extinction : exemple de l'olivine.

On note deux contributions pour l'opacité d'un milieu  $\alpha_e$  : une liée à l'absorption du rayonnement  $\alpha_v$  par la matière (transitions électroniques par exemple) et l'autre liée à la diffusion des photons  $\alpha_d$ , principalement aux joints de grains (Pitt and Tozer, 1970), avec :

$$\frac{1}{l_e} = \alpha_e = \frac{1}{l_d} + \frac{1}{l_v} = \alpha_d + \alpha_v \quad (2.37)$$

La discussion qui suit propose une revue des diverses estimations de  $\alpha_v$  existantes. Le paramètre  $\alpha_d$  sera discuté dans le paragraphe 2.4.

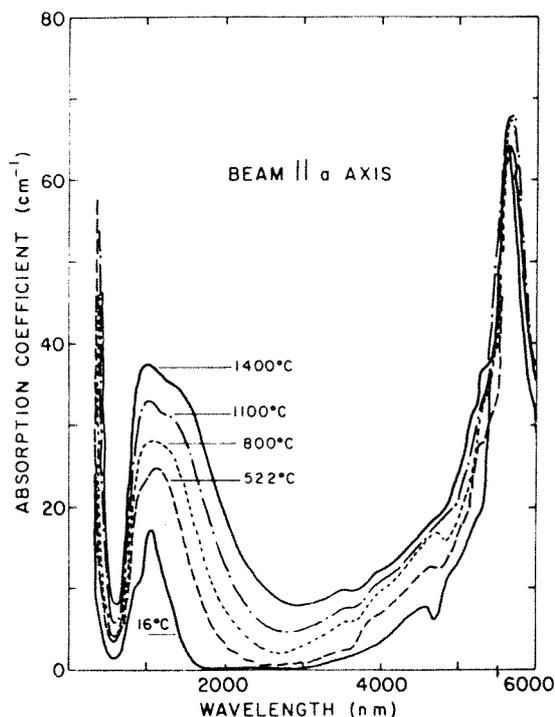
L'absorption du rayonnement  $\alpha_v$  dépend de la longueur d'onde  $\lambda$  et de la température, car les processus d'absorption varient le long du spectre électromagnétique (U.V.-visible : transitions électroniques, I.R. : excitation des modes de vibrations) et sont activés thermiquement. Pour le transfert radiatif, la région du spectre où rayonnent les matériaux du manteau à des températures entre 300 et 2000K est donnée approximativement par la loi de Planck ou encore par la loi de Wien (fig. 2.3). Elle correspond au proche-I.R. C'est dans cette zone du spectre qu'une étude de l'absorption des minéraux donnera une information sur le transfert radiatif.

Quelques études spectroscopiques ont été menées sur le spectre d'absorption des minéraux du manteau dans le proche I.R. et dans le visible à température variable (Burns, 1970; Clark, 1957). Malgré la perturbation de l'équilibre thermodynamique local qu'engendre la propagation d'un faisceau I.R. dans un milieu semi-transparent et optiquement fin (Pitt and

Tozer, 1970), ces mesures sont jusqu'à présent les seules permettant d'évaluer, de façon indirecte, le transfert de chaleur par rayonnement dans les minéraux.

L'olivine a été tout particulièrement étudiée (Aronson et al., 1970; Clark, 1957; Fukao et al., 1968; Shankland et al., 1979). Un exemple de spectre de l'olivine est donné par la figure 2.4. Les spectres des minéraux du manteau montrent essentiellement des pics d'absorption dans le très proche I.R. dus à des transitions électroniques entre orbitales  $3d$  des éléments de transition (théorie du champ cristallin) (Burns, 1970; Nitsan et Shankland, 1976). Les ions  $Fe^{2+}$  sont généralement responsables d'une forte absorption à environ  $1 \mu m$ . L'augmentation de la température élargit et augmente l'intensité de la bande d'absorption (Shankland et al., 1979). L'absorption vers les plus longues longueurs d'onde ( $5 \mu m$ ) est liée aux modes de vibrations du réseau cristallin (c'est-à-dire, des phonons). La zone du spectre située entre  $2$  et  $4 \mu m$  est une zone de faible absorption à basse température. C'est dans cette zone du spectre que la majeure partie de l'énergie est rayonnée pour des températures avoisinant les  $1000K$ . Cependant, une augmentation de la température induit une nette augmentation de l'absorption, due à l'excitation d'un nombre croissant de modes de photons vers les hautes fréquences. Ces spectres suggèrent une forte variation du coefficient d'absorption avec la longueur d'onde et la température. A chaque température, la contribution radiative à la conductivité est calculée par l'expression de Rosseland associée à la relation (2.36) (Fukao et al., 1968; Shankland et al., 1979).

Une donnée qui demeure mal documentée concerne une éventuelle anisotropie du coefficient d'absorption. Aucune étude n'a réalisé des spectres en fonction de l'orientation du faisceau I.R. et de sa polarisation. Des données partielles montrent une anisotropie de  $\alpha_v$  avec l'orientation, mais seulement suivant deux axes (faisceaux non polarisés parallèles aux axes  $[100]$  et  $[001]$ ) (Shankland et al., 1979). Cette anisotropie est toutefois faible.



**Figure 2.4 :** Spectre d'absorption de l'olivine mesuré à différentes températures. L'association de ce spectre et du spectre d'émission du corps noir montre l'importance de la « fenêtre » centrée sur 3 microns (Shankland et al., 1979).

Par ailleurs, Schatz et Simmons (1972) ou encore Aronson et al. (1970) ont montré la nécessité de travailler dans un milieu inhibant l'oxydation des ions  $Fe^{2+}$  en ions  $Fe^{3+}$  suite à l'observation d'un changement de couleur irréversible à la surface des grains d'olivine (qui deviennent opaques) lors des expériences à haute température (e.g., Nistan, 1974): cette oxydation augmenterait artificiellement l'absorption du rayonnement dans les études spectroscopiques. L'étude du transfert radiatif dans les minéraux impose donc de travailler sous une fugacité d'oxygène contrôlée. L'étude de Shankland et al. (1979) est pour cette raison considérée comme une référence.

L'effet de la pression sur ces spectres d'absorption est négligeable, mais on s'attend à un déplacement du pic à  $1.1 \mu m$  vers les basses longueurs d'onde (hautes énergies), du fait du recouvrement des orbitales atomiques dû à la compression (Burns, 1970), permettant ainsi l'ouverture dans le spectre d'une « fenêtre » dans laquelle le rayonnement peut être transmis (Shankland, 1970). L'effet de la pression tendrait donc à compenser celui de la température vis-à-vis de l'absorption.

### 2.3.5 Contribution radiative et mesures de conductivité thermique.

Le transfert radiatif dans les cristaux peut être directement évalué par des mesures de conductivité ou de diffusivité thermique. La contribution radiative est extraite des mesures en évaluant la contribution des phonons à la conductivité thermique par l'une des lois proposées précédemment (§ 2.2). Cependant, la représentativité des mesures est liée aux conditions d'équilibre thermodynamique local. Si le matériau est optiquement épais, alors l'approximation de diffusion est vérifiée et la conductivité mesurée, appelée conductivité apparente, représente les propriétés intrinsèques du matériau.

Pour un monocristal d'olivine de 5 mm de long dont le libre parcours moyen est de 2 mm, l'épaisseur optique est de 2.5. Le déséquilibre thermique généré pour mesurer la conductivité ou la diffusivité thermique est d'environ 5 à 10°C. Cela signifie que dans la plupart des mesures sur l'olivine, l'équilibre thermodynamique n'a pas été atteint et n'est pas comparable à celui qui prévaut dans le manteau.

Pour des échantillons optiquement fins, les données sont souvent analysées abusivement en utilisant l'approximation de diffusion et la relation (2.36) qui en découle. Ces analyses mettent en jeu l'interaction entre la conduction du réseau et le transfert radiatif. Dans le cas d'un milieu optiquement fin, ces deux processus sont toutefois découplés puisque le premier obéit à la loi de Fourier (toujours satisfaite pour les phonons à des températures >100-200K) et le deuxième non (Brewster, 1992; Chui et Gardon, 1969). Le découplage n'est cependant pas total lorsque le flux de chaleur appliqué à un échantillon est fourni par une source lumineuse sans contact (laser, fil chauffant). Dans un milieu transparent et optiquement fin, la température n'est pas ou très peu modifiée par le flux de photons, à cause du non respect de l'équilibre thermodynamique local et le gradient de température n'est plus lié au flux de chaleur débité par la source. Par conséquent, l'absence d'élévation de température de l'échantillon ne permet pas de mesurer le transport radiatif et sous-estime la conduction du réseau. La mesure conduit à une conductivité apparente difficile à relier à la propriété intrinsèque.

La difficulté de la mesure de la contribution radiative à la diffusivité thermique revient donc à savoir à partir de quelle épaisseur optique l'approximation de diffusion est valable. Cette épaisseur est déterminée, outre le coefficient d'absorption sur lequel l'expérimentateur n'a aucun contrôle, par la taille de l'échantillon le long duquel le gradient de température est appliqué. Si cette taille augmente, alors la conductivité apparente devrait tendre vers la

conductivité intrinsèque. Les modélisations numériques conduites par Chui et Gardon (1969) montrent l'effet de l'interaction entre la conduction du réseau et du rayonnement en utilisant des matériaux dont les coefficients d'absorption diffèrent. Leurs calculs montrent que pour une épaisseur optique d'environ 10, la conductivité apparente mesurée est très proche de la conductivité intrinsèque (Schilling et al., 2002).

Cette condition pose un problème d'ordre expérimental pour la mesure sur des matériaux transparents et semi-transparentes tels que les verres ou les cristaux d'olivine (taille des cristaux petite, dispositifs n'accueillant que de petits échantillons). Cet aspect expérimental sera abordé dans le chapitre 3 et les implications pour la détermination de la diffusivité radiative de l'olivine abordées dans le chapitre 6.

## 2.4 Transfert de chaleur à l'échelle de la roche.

Les roches sont des agrégats polycristallins très majoritairement polyphasés. Certaines roches peuvent être monophasées (plus de 95% d'une même phase) comme les dunites (olivine) ou les quartzites (quartz), mais de telles roches ne représentent que de très faibles volumes de la croûte ou du manteau. Le premier paramètre qui caractérise une roche est donc sa composition minérale ou composition modale. Celle-ci est largement contrôlée par les processus pétrologiques à l'origine de cette roche et par les conditions de température et pression auxquelles la roche s'est équilibrée.

Le deuxième paramètre important est l'arrangement des cristaux ou la microstructure (taille et forme des grains (cristaux), orientation préférentielle de forme et/ou du réseau cristallin, litage compositionnel, microfracturation). Celle-ci est contrôlée par les conditions de cristallisation et, tout particulièrement, par la déformation. Cette dernière peut produire une importante variété de microstructures, car différents processus de déformation sont activés en fonction des conditions de pression, température, contraintes déviatoriques et d'environnement chimique. La déformation plastique, prédominante aux conditions de pression et température de la croûte profonde et du manteau terrestre peut, selon le mécanisme de déformation dominant à l'échelle cristalline, soit conduire au développement d'orientations préférentielles de réseau des minéraux et à une anisotropie des propriétés physiques, soit créer des agrégats isotropes.

L'analyse de la microstructure est fondamentale pour l'étude de la conduction thermique à l'échelle de la roche, car on s'attend à ce que les propriétés de transport thermique soient altérées par la présence :

- de plusieurs phases minérales de propriétés différentes,
- de joints de grains, donc par leur distribution spatiale et leur densité (taille de grains),
- de fractures ou d'une porosité (car les fluides ou l'air qui les remplissent ont des propriétés de transport très différentes de celles des roches),
- d'imperfections intra-cristallines (sous-grains, dislocations, inclusions), très nombreuses dans les roches déformées plastiquement,
- d'orientations préférentielles de réseau des minéraux.

Ces paramètres ont des effets variables suivant les processus de transport et les conditions de température ou de pression étudiées. Quel est leur rôle sur la conductivité thermique du réseau et la contribution radiative ?

### 2.4.1 Transport par les phonons

Reprenant la discussion du paragraphe 2.2.4.1, il peut être montré que la contribution d'imperfections telles que les joints de grains ou défauts intracristallins ne limitent le libre parcours des phonons qu'à très basse température ( $<100\text{K}$ ). Le libre parcours moyen de phonons à  $300\text{K}$  est, suivant la complexité du minéral, toujours inférieur à une dizaine d'Ångström. Des études comparatives entre monocristaux et agrégats polycristallins synthétiques montrent effectivement qu'à température ambiante, les joints de grains n'ont pas d'effet sur la conductivité thermique (Kingery, 1962).

À l'échelle de la roche, la présence de phases peu conductrices ou d'une microfracturation peut toutefois diminuer la conductivité. Les mesures de diffusivité thermique conduites sur des roches à pression variable mettent effectivement en évidence une augmentation rapide de la diffusivité à faible pression ( $<100\text{MPa}$ ) qui est associée à la fermeture des microfractures ouvertes et remplies d'air, peu conducteur (Horai et Susaki, 1989; Seipold, 2001; Seipold et al., 1998). En outre, la présence de phases peu conductrices est à mettre en relation avec la composition modale de la roche. L'altération hydrothermale, par exemple, peut conduire à la croissance de minéraux hydratés dont la conductivité est faible.

Enfin, une orientation préférentielle de réseau des minéraux (développée au cours de processus de déformation), associée à une anisotropie de la diffusion thermique des monocristaux, peut conduire à une anisotropie de la diffusion thermique à l'échelle de la roche (e.g., Siegesmund, 1994). Cette anisotropie va dépendre de l'orientation et de la force de la fabrique cristallographique des divers minéraux, et des tenseurs associés à chaque minéral. Des méthodes permettent de calculer les propriétés de transport thermiques anisotropes, en utilisant ces divers paramètres (e.g., Siegesmund, 1994). Elles seront présentées dans le paragraphe 2.4.3.

La comparaison des données de conductivité ou diffusivité thermique obtenues sur monocristaux d'olivine (e.g., Chai et al., 1996) et celles obtenues sur des roches composées majoritairement d'olivine ( $>75\%$ ) (e.g., Beck et al., 1978) montre une conductivité thermique plus faible d'environ 30% pour les roches que pour les monocristaux. Cette différence est aussi observée dans les expériences conduites à haute pression, ce qui indique qu'elle n'est pas due à une microfracturation des roches analysées (Beck et al., 1978; Horai et Susaki, 1989). Ce problème sera discuté dans le chapitre 5.

### 2.4.2 Transport radiatif

Contrairement aux phonons, le libre parcours moyen des photons contrôlant les processus d'absorption-émission dans les cristaux est du même ordre de grandeur (millimétrique) que la taille des grains  $d$  (e.g., Pitt and Tozer, 1970). En particulier, dans un milieu optiquement anisotrope (ce qui est le cas de la plupart des minéraux de roches), la transmission de l'énergie radiative à l'interface entre deux grains d'orientations différentes a deux effets. D'une part, une partie de l'énergie est réfléchi à l'interface entre les grains et d'autre part, les rayons réfractés et les rayons incidents ne sont pas parallèles. À l'interface, l'énergie n'est pas totalement transmise et elle transmise dans une direction différente de l'énergie incidente (tant que l'angle limite de réfraction n'est pas atteint ; si tel est le cas, le coefficient de réflexion est égal à 1). Les photons seront donc diffusés aux joints de grains et la contribution de cette diffusion au coefficient d'extinction sera notée  $\alpha_d$ . Si la réflexion aux joints de grains est totale, alors le libre parcours moyen des photons  $l_d = 1/\alpha_d$  est égal à la taille des grains  $d$ . Cependant, les contrastes d'indices de réfraction dans le cas des minéraux du manteau (les biréfringences de l'olivine, de l'enstatite et du diopside sont de 0.035, 0.01 et 0.03,

respectivement) sont très faibles. Aussi, il peut être montré que les coefficients de réflexion sont très petits ( $R=0,0001$  pour l'olivine en incidence normale), que les angles limites de réfraction sont assez élevés ( $78^\circ$  pour l'olivine). En ne prenant en compte que l'effet d'un angle entre les rayons incidents et transmis, noté  $\theta$ , certains auteurs proposent la relation suivante, qui constitue une limite supérieure à l'effet des joints de grains (Pitt et Tozer, 1970; Shankland et al., 1979):

$$l_d = \frac{d}{1 - \cos\theta} \cong 50 * d \quad \text{en prenant } \cos\theta=0,98 \quad (2.38)$$

Une taille de grains millimétrique a donc un effet très minoritaire sur le libre parcours moyen du photon, par rapport aux processus d'absorption.

Par contre, pour des tailles de grains de quelques microns,  $l_d$  peut devenir très faible, selon la relation (2.38). De plus, des effets de diffraction aux joints de grains sont attendus, car la longueur d'onde caractéristique du rayonnement à des températures situées entre  $800^\circ\text{C}$  et  $1200^\circ\text{C}$ , prédominantes dans le manteau terrestre est également de quelques microns. Dans ce cas, chaque grain interagit avec le rayonnement et se comporte comme une source secondaire du rayonnement. La porosité d'un agrégat peut également accentuer cet effet, car la différence d'indice de réfraction entre un minéral et l'air est beaucoup plus importante qu'entre deux minéraux: l'énergie réfléchie à l'interface est donc bien supérieure à celle réfléchie à une interface séparant deux grains voisins (Klemens and Greenberg, 1973).

La comparaison des mesures de conductivité réalisées sur agrégats polycristallins (alumine, fluorure de calcium) dont la taille de grain est d'environ  $20 \mu\text{m}$  et monocristaux ont ainsi montré que la contribution radiative dans les agrégats est nettement inférieure à celle dans les monocristaux, démontrant ainsi que la diffusion aux joints de grains peut avoir un effet significatif sur la conduction par rayonnement. Ces données peuvent toutefois s'avérer extrêmes si on considère que les agrégats synthétisés présentaient sans doute une porosité importante.

Ces aspects ont été cependant très peu étudiés dans les roches, où les tailles de grains sont de l'ordre du mm, ce qui est la taille de grain moyenne dans la plupart des roches mantelliques connues (xénolithes et massifs). Dans ce cas,  $l_d$  est de l'ordre de 50 mm. Pour l'olivine, cette valeur est très élevée comparée à celle de  $l_v$ , qui est de quelques mm. Le rôle attendu des joints de grains serait donc faible.

### 2.4.3 Calcul des propriétés à l'échelle de l'agrégat.

La roche est un milieu hétérogène présentant plusieurs phases minérales, parfois des phases liquides et un espace poreux (sous faible pression de confinement). Connaissant les propriétés de transport thermique des phases constituant la roche, comment calculer les propriétés de transport à l'échelle de la roche ?

Ces propriétés vont dépendre de la composition modale de la roche, de sa porosité et des propriétés des éléments constitutifs. Elles vont aussi dépendre des éventuelles orientations préférentielles des minéraux anisotropes. Dans tous les cas, la conductivité du milieu hétérogène devra être représentative du lien qu'il existe entre un flux de chaleur et un gradient de température (loi de Fourier). Plusieurs types de moyennes sont utilisées pour calculer les propriétés effectives d'un milieu à partir des propriétés de ses constituants (e.g., Taylor, 1983). Une approche très utilisée consiste à considérer deux situations extrêmes illustrant la loi de Fourier dans le cas d'un transfert de chaleur unidimensionnel. C'est une application directe de la loi d'Ohm. Dans un cas, le gradient de température est uniforme, c'est-à-dire que les isothermes sont parallèles entre elles dans le matériau. La conductivité thermique effective du matériau comportant  $i$  phases de conductivité  $K_i$  et de fraction volumique  $v_i$  s'écrit alors :

$$K_{\text{voigt}} = \sum_i K_i \cdot v_i \quad (2.39)$$

Cette moyenne est communément appelée moyenne de Voigt et représente une borne supérieure de la conductivité thermique (Horai et Simmons, 1969; Taylor, 1983). Dans le cas où c'est le flux de chaleur qui est supposé uniforme dans tout le matériau, la conductivité thermique s'écrit en associant en parallèle les constituants :

$$K_{\text{reuss}} = \left( \sum_i \frac{1}{K_i} \cdot v_i \right)^{-1} \quad (2.40)$$

Cette moyenne est la moyenne de Reuss et elle représente une borne inférieure de la conductivité thermique. La moyenne arithmétique de ces deux bornes est la moyenne de Voigt-Reuss-Hill ou VRH. L'écart entre ces deux limites dépend fortement des contrastes de conductivité des divers constituants  $i$ . D'autres types de moyennes sont utilisées pour la conductivité thermique : c'est le cas des bornes de Hashin-Shtrikman utilisées dans le cas de présence de phases connectées comme les fluides (Horai, 1971) ou bien des moyennes géométriques (Pribnow et Umsonst, 1993; Sass et al., 1971).

Dans le cas des roches, les minéraux constitutifs (en majorité des silicates) ont des conductivités très similaires (e.g., Horai, 1971) et des anisotropies variables. Seul le quartz présente une conductivité assez élevée, au maximum trois à quatre fois plus élevée que les minéraux les moins conducteurs, et une forte anisotropie (plus de 60%). Pour les roches du manteau, les pyroxènes, l'olivine et les minéraux alumineux ont des propriétés très proches et l'olivine est très largement majoritaire (e.g., Chai et al., 1996). Le type de moyenne utilisé aura peu d'influence sur l'estimation de la conductivité thermique effective, et les bornes supérieures et inférieures seront donc très proches. Par contre, la porosité peut contrarier ces calculs en introduisant une phase très peu conductive (air ou fluides).

Dans le cas des minéraux anisotropes, outre le volume relatif du constituant, la connaissance de son orientation est nécessaire pour calculer les propriétés anisotropes de la roche. Suivant une direction donnée de la roche, la composante de la conductivité thermique de chaque minéral doit être calculée. En pratique, un référentiel arbitraire de la roche est

défini (en général fondé sur les éléments macroscopiques comme la foliation et la linéation). Le tenseur conductivité thermique du cristal est défini dans le repère du cristal, en fonction de sa symétrie (e.g., Nye, 1972). Si l'orientation du cristal est mesurée par rapport au référentiel de la roche, alors le tenseur conductivité thermique défini dans le repère du cristal  $K_{kl}$  doit être calculé dans les coordonnées de la roche. Le nouveau tenseur dans le repère de la roche  $K_{ij}$  se calcule à l'aide des matrices de rotation  $g_{ij}$  (e.g., Nye, 1972) :

$$K_{ij} = g_{ik} \cdot g_{jl} \cdot K_{kl} \quad (2.41)$$

Le calcul des matrices rotation est immédiat lorsque l'orientation du cristal est déterminée dans le repère de la roche à l'aide des angles d'Euler (e.g., Bunge, 1985). Pour calculer les propriétés de la roche dans une direction donnée, il reste à calculer la fraction volumétrique de cristaux orientés dans une direction donnée  $g$ . Cette fraction  $v(g)$  correspond à la distribution spatiales des orientations de l'ensemble des cristaux, ou ODF (Orientation Distribution Function). Le calcul des propriétés se fait par exemple en utilisant les moyennes utilisées plus haut (eq. 2.39 – 2.40), en ajoutant pour chaque minéral les informations sur son orientation :

$$\langle K_{ij} \rangle_{\text{voigt}} = \sum K_{ij}(g) \cdot v(g) \quad \text{ou} \quad \langle K_{ij} \rangle_{\text{Reuss}} = \left( \sum (K_{ij}(g))^{-1} \cdot v(g) \right)^{-1} \quad (2.42)$$

Cette méthode est très couramment utilisée pour modéliser les vitesses des ondes acoustiques d'agrégats polycristallins (Mainprice et Humbert, 1994). Ce sera la méthode utilisée dans la thèse (chapitres 4 et 5). Les mesures d'orientations cristallographiques (angles d'Euler) seront réalisées par la méthode EBSD (décrite en annexe 2).

Ces modèles de moyennes découlent physiquement du concept de conductivité thermique défini par la loi de Fourier. Ils peuvent ainsi être comparés à des mesures directes de conductivité thermique. Pour ces dernières, des précautions doivent être prises. Elles sont souvent fondées sur la mesure d'un gradient de température et sur l'évaluation d'un flux de chaleur (méthodes stationnaires – voir chapitre 3). Dans le cas de matériaux anisotropes, les flux de chaleur ne sont pas a priori parallèles au gradient de température (ou perpendiculaire aux isothermes) (e.g., Nye, 1972 - p.198). Les mesures suivant les axes principaux du tenseur conductivité thermique assurent un parallélisme entre le flux de chaleur et le gradient de température et permettent de réaliser une mesure correcte de la conductivité.

Concernant la diffusivité thermique (souvent déterminée expérimentalement), elle peut être modélisée en divisant simplement la conductivité thermique par la capacité thermique moyenne et la masse volumique moyenne du matériau (eq. 2.4). Cependant, le concept de diffusivité thermique n'est pas applicable aux matériaux hétérogènes, puisque son introduction dans l'équation de la chaleur suppose que la conductivité thermique ne varie pas dans l'espace (eq. 2.2 – 2.3). Si à l'échelle du manteau, le matériau peut être considéré comme homogène, à l'échelle du laboratoire, ce concept de diffusivité thermique peut ne pas être utilisable (ainsi que l'équation de la chaleur 2.3). Une étude expérimentale a toutefois montré que la diffusivité thermique mesurée sur des matériaux très hétérogènes (matériaux lités, dispersés ou fibreux) est en bon accord avec les conductivités thermiques attendues (Taylor, 1983). Les propriétés effectives d'un milieu hétérogène (roche) peuvent donc être, a priori, déterminées expérimentalement par des mesures de diffusivités thermiques. Elles pourront être comparées aux modèles présentés ci-dessus. C'est l'hypothèse de base du travail expérimental proposé dans les chapitres suivants. On s'attachera à vérifier cette hypothèse (chapitre 5).

Le calcul des propriétés effectives des roches dans le cas des tenseurs de rang deux (expansion thermique, conductivités thermique et électrique) est l'objet d'une publication en préparation (Mainprice et al., 2004), dont l'objectif est de détailler les calculs présentés

succinctement dans cette partie et d'en donner des illustrations. Des exemples de calculs seront pris parmi les divers résultats obtenus dans la thèse (Chapitre 5 traitant du quartz et de l'olivine).

## 2.5 Conclusion

Les propriétés de transport thermique des minéraux impliquent des processus à l'échelle atomique dont la description théorique est très complexe. Les modèles fondés sur l'analyse des modes de vibrations apparaissent très limités pour la détermination de la conductivité thermique des minéraux complexes. En particulier, ils ne permettent pas d'évaluer une valeur absolue de la conductivité ou de la diffusivité thermique. Ils suggèrent également des dépendances en température qui sont toujours controversées, en particulier concernant une valeur limite de la conductivité thermique à haute température. Le développement des calculs de dynamiques moléculaires devrait apporter de nouvelles contraintes sur la conduction thermique. Des modélisations ont été récemment réalisées sur des verres jusqu'à 1000K et montrent un bon accord avec les données expérimentales (Jund et Jullien, 1999). Des modélisations sur des silicates (quartz et zéolithes) ont été également conduites à basses températures (McGaughey and Kaviany, 2002). Enfin, le passage des propriétés des minéraux aux propriétés des agrégats est bien décrit par les considérations théoriques concernant les transferts par les phonons. Les défauts cristallins, les joints de grains et l'ensemble des impuretés présentes à l'échelle de la roche ne peuvent pas avoir d'effets importants à température ambiante ou à haute température. Par contre, les mesures expérimentales de diffusivité ou de conductivité thermique sur les matériaux du manteau semblent s'opposer à ces prévisions.

La contribution radiative n'est évaluée qu'à partir des données d'absorption I.R., et certains auteurs remettent en question l'utilisation de ces données (e.g., Hofmeister, 1999). Pour ce type de transfert, les conditions imposées par les études en laboratoires, si éloignées des conditions du manteau (équilibre radiatif), alimentent les controverses. A l'échelle de la roche, le rôle des joints de grain est encore mal connu et il n'est pas contraint expérimentalement.

Pour étudier les transferts thermiques dans les minéraux et roches du manteau, la mesure directe de la conductivité ou de la diffusivité thermique reste un moyen efficace d'investigation. À l'exception des modèles semi-empiriques fondés sur l'analyse des spectres I.R., cette démarche expérimentale est d'ailleurs la seule utilisée en Sciences de la Terre. C'est la démarche adoptée dans cette thèse. Les mesures réalisées seront néanmoins systématiquement comparées aux considérations théoriques.

### 3 Mesures en laboratoire des propriétés de transport thermique des minéraux et des roches



L'analyse des données de conductivité ou de diffusivité thermique montre que la méthode de mesure utilisée, outre la qualité des échantillons, est la principale cause d'écarts souvent élevés parmi les différents jeux de données. Pour un même minéral, des écarts de plus de 30% peuvent ainsi être observés. Dans ces conditions, il est apparu pertinent d'utiliser différentes méthodes de mesures, pour déterminer les propriétés de transport thermique dans les cristaux d'olivine et dans les péridotites. Après un rappel des méthodes de mesure les plus fréquemment utilisées en Sciences de la Terre, les méthodes utilisées dans cette étude seront décrites en détail.

### **3.1 Généralités sur les méthodes de mesure de la diffusivité (ou conductivité) thermique en Sciences de la Terre**

Le choix de la méthode de mesure des propriétés de transfert de chaleur en Sciences de la Terre est souvent dicté par les conditions de pression et de température dans lesquelles l'expérimentateur veut opérer. Il est également dicté par les processus de transfert de chaleur qu'il désire explorer, c'est-à-dire, la contribution des phonons ou la contribution du rayonnement, et par l'échelle à laquelle il veut étudier ces processus (roches ou monocristal). La majorité des méthodes usuelles consiste à générer et analyser un signal thermique sur un point ou une surface de l'échantillon, et analyser le signal résultant en un autre point de cet échantillon. L'analyse des signaux en entrée et sortie se fait généralement par mesure de température à l'aide de thermocouples en contact avec l'échantillon. La résolution de l'équation de la chaleur dépend ensuite de la situation envisagée.

L'expression du Laplacien est imposée par la géométrie:

- pour les méthodes cylindriques, pour lesquelles la chaleur se propage radialement dans la direction  $r$ :

$$\Delta T = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \quad (3.1)$$

- pour les méthodes linéaires où la propagation de la chaleur se fait dans la direction  $x$  :

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

Un terme de pertes par unité de surface est introduit pour des échantillons finis. Ce sont le plus souvent des pertes  $Q$  par rayonnement dans un milieu à température constante  $T_0$ :

$$Q = \sigma \cdot \varepsilon \cdot (T^4 - T_0^4) \quad (3.3)$$

où  $\sigma$  est la constante de Stephan-Boltzman,  $\varepsilon$  est l'émissivité du matériau.

Dans le cas de faibles gradient de température, ces pertes deviennent :

$$Q = \sigma \cdot \varepsilon \cdot T_0^3 \cdot (T - T_0) = \nu \cdot (T - T_0) \quad (3.4)$$

où  $\nu$  est une constante ne dépendant que de la température pour un matériau donné.

Le terme temporel dépend de la nature stationnaire ou transitoire de la méthode. Trois types de méthodes en sont issues :

- les méthodes stationnaires : le flux d'énergie délivré par l'élément chauffant est constant dans le temps et la résolution de l'équation de la chaleur revient à celle de l'équation de Fourier. C'est pourquoi ces méthodes ne donnent accès qu'à la conductivité thermique.

- Les méthodes transitoires. Certaines étudient la période transitoire associée à l'établissement d'un régime stationnaire. D'autres étudient la propagation d'un pulse d'énergie dont la durée peut s'étendre de quelques microsecondes à plusieurs secondes. Ces méthodes permettent de déterminer la diffusivité thermique. Selon la géométrie, la conductivité thermique peut également être évaluée.
- Les méthodes hybrides : la propagation d'un signal périodique est étudiée. Seule la diffusivité thermique est évaluée.

### 3.1.1 Méthodes stationnaires

Les méthodes stationnaires sont fondées sur l'application directe de la loi de Fourier pour laquelle la connaissance du flux de chaleur et du gradient de température permet le calcul de la conductivité thermique.

#### 3.1.1.1 Méthode « Divided-bar »

La méthode la plus répandue pour la mesure de la conductivité thermique est la « divided-bar-method » (Popov et al., 1999; Pribnow et al., 1995). Cette méthode se fonde sur la création d'un gradient de température constant le long de l'échantillon, en utilisant deux sources à température constante, l'une chaude et l'autre froide (figure 3.1).

Pour définir un gradient de température homogène sur tout l'échantillon, les variations latérales de température liées aux pertes sur les côtés sont limitées par l'utilisation d'échantillons plats (rapport diamètre/longueur  $\geq 3$ ). Un bon contact entre les thermocouples et les disques (échantillon et standard) est assuré en appliquant une faible pression uni-axiale. Pour éviter l'évaluation du flux de chaleur, nécessaire au calcul de la conductivité, un

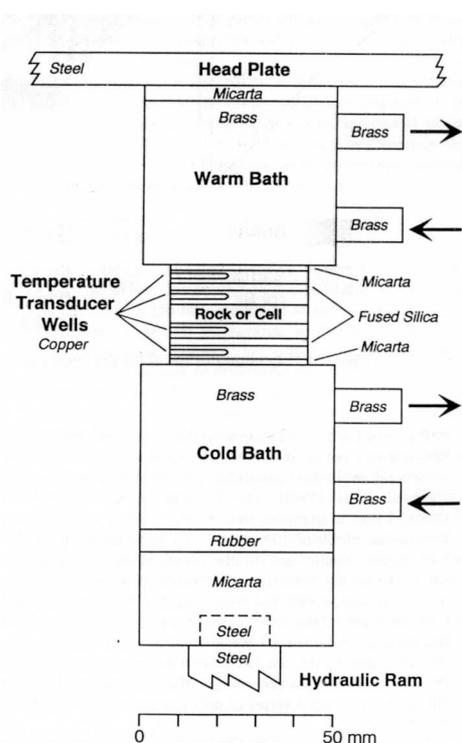


Figure 3.1 : schéma de principe de la méthode 'divided bar'.

matériau standard est intercalé entre les sources de chaleur et l'échantillon. La comparaison entre les gradients de température mesurés dans les standards et dans l'échantillon permet de calculer la conductivité thermique de l'échantillon, connaissant celle du standard.

Le gradient de température étant défini, le flux de chaleur d'un échantillon anisotrope est fonction de son orientation par rapport au gradient thermique. L'anisotropie de conductivité thermique se mesure alors en orientant l'échantillon de façon à aligner successivement les axes principaux du tenseur de conductivité thermique avec le gradient de température (Popov et al., 1999).

L'intérêt de la méthode est qu'elle permet d'utiliser des échantillons relativement longs (30 mm) ce qui permet de mesurer une conductivité thermique représentative d'un échantillon polycristallin (roche), même si ce dernier présente des tailles de grain de l'ordre du mm. La rapidité de mise en œuvre est également un avantage. Par contre, elle ne permet pas de réaliser des mesures à haute

température ou sous pression de confinement.

### 3.1.1.2 Méthode ‘hot wire’ en régime permanent

Dans ce type de méthode, un fil chauffant libère une énergie constante  $I$  par effet joule et la propagation radiale de cette énergie dans l'échantillon est analysée en un ou plusieurs points de l'échantillon à une distance connue du fil chauffant (Carslaw et Jaeger, 1959). La géométrie utilisée est souvent une géométrie cylindrique, où le fil chauffant se positionne à l'axe du cylindre (Beck et al., 1978; Schloessin et Dvorak, 1972). L'équation de la chaleur est résolue dans l'hypothèse d'un échantillon infini où l'énergie se dissipe dans la direction radiale uniquement (Beck et al., 1978). Après un régime transitoire, un gradient de température entre le centre et la périphérie de l'échantillon s'établit et la mesure de la température à deux distances différentes  $R1$  et  $R2$  du fil chauffant permet de calculer la conductivité thermique, connaissant la puissance dissipée par unité de longueur de fil  $Q$  (Carslaw and Jaeger, 1959) :

$$K = \frac{Q}{2\pi} \cdot \frac{\ln(R1/R2)}{T_1 - T_2} \quad (3.5)$$

La principale incertitude provient du terme de production d'énergie, car ce dernier est évalué directement à partir de la mesure de la tension aux bornes du fil chauffant et de l'intensité circulant dans le fil, selon l'hypothèse que l'énergie se dissipe de façon homogène dans le fil. Les dissipations locales d'énergie liées à des résistances de contact ou à des variations de résistivité du fil (à cause de la température) ne sont donc pas prises en compte, ce qui peut induire des erreurs importantes.

## 3.1.2 Méthodes transitoires.

Ces méthodes se caractérisent par l'utilisation d'un signal thermique de courte durée (de quelques micro-secondes à quelques secondes). Les transferts de chaleur se font exclusivement en géométrie linéaire.

### 3.1.2.1 Méthode Flash

Parmi ces méthodes, la méthode Flash est la plus utilisée, aussi bien en Physique des matériaux qu'en Sciences de la Terre (Parker et al., 1961). La géométrie utilisée est un disque de large diamètre (1 à 3 cm) pour une épaisseur de quelques millimètres. Le pulse, produit le plus souvent par un laser, a une durée de quelques millisecondes et est appliqué sur une face de l'échantillon. La température est enregistrée sur l'autre face de l'échantillon avec un thermocouple ou un détecteur Infra-Rouge. L'équation de la chaleur est résolue en négligeant l'effet des pertes latérales (ce qui est justifié par la géométrie plate de l'échantillon). L'élévation de la température au détecteur est de la forme, pour un échantillon de longueur  $l$  et un pulse de très courte durée et d'énergie  $q$ :

$$dT = \frac{q}{\rho C_p l \pi r^2} \left( 1 + 2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-n^2 \frac{\pi^2 \cdot D \cdot t}{l^2}\right) \right) \quad (3.6)$$

La diffusivité est obtenue soit en ajustant la courbe théorique sur les valeurs mesurées, soit en déterminant un temps caractéristique. Ce temps est souvent pris comme le temps écoulé entre le début du pulse et le moment où l'élévation de température atteint son demi-maximum. Une relation simple est généralement obtenue entre la diffusivité thermique, la longueur de l'échantillon et  $t_{1/2}$ . La simplicité de mise en œuvre de la méthode, ainsi que le traitement des données est souvent un avantage par rapport à d'autres méthodes. Cette méthode est très

utilisée à haute température, et peut être utilisée à très haute pression (Osako et Ito, 1997). Dans ce cas, un élément chauffant planaire dissipe de l'énergie par effet joule dans un échantillon très fin (diamètre 3.8mm, 1 mm d'épaisseur), et la réponse est enregistrée à une distance donnée de l'élément chauffant. Le transfert de chaleur est là aussi unidimensionnel.

Le principal inconvénient de ces méthodes est l'utilisation d'échantillons relativement fins (<5mm), ce qui ne permet pas d'évaluer un éventuel transfert radiatif. Par ailleurs, l'émission de fortes énergies, associée à une longueur d'échantillon faible, favorise un transport radiatif direct depuis la source de chaleur (LASER) jusqu'au détecteur. Malgré un traitement des faces de l'échantillon par des matériaux opaques (films d'argent, de platine ou de carbone) l'élévation de température résultante peut être modifiée par un transport direct, entraînant des erreurs systématiques sur la détermination de la diffusivité thermique.

Enfin il existe des méthodes transitoires proches de la méthode flash traditionnelle, mais qui utilisent des pulses plus longs (quelques secondes) et dont la géométrie des échantillons est moins contraignante. Les différents types de transport thermique (rayonnement et phonons) sont alors évalués par des modèles numériques (Schilling, 1999). Ce type de méthode sera discuté en détail dans le paragraphe 3.3.

### 3.1.2.2 Méthode «hot wire» transitoire.

Le dispositif expérimental (géométrie, position du fil chauffant et des thermocouples) est sensiblement le même que dans les méthodes « hot wire » stationnaires, mais l'énergie du fil chauffant est dissipée sous forme d'un pulse durant quelques secondes. L'évolution temporelle de la température enregistrée par un thermocouple à une distance connue du fil chauffant permet l'évaluation de la diffusivité thermique tandis que le bilan d'énergie donne une évaluation de la conductivité. Selon les dispositifs expérimentaux et les conditions de température ou de pression, le milieu est considéré comme infini (Seipold, 1988), ou les limites de l'échantillon sont prises comme des isothermes égales à la température de l'enceinte (par exemple à haute pression (Kieffer et al., 1976)). La méthode de Seipold, (1988) est une des plus utilisées et sera décrite en détail dans la suite. L'avantage de ces méthodes est la mesure simultanée de la conductivité et de la diffusivité thermique et la possibilité de travailler à haute pression ou à haute température. La précision des mesures de la conductivité souffre toutefois des problèmes relatifs à l'évaluation de l'énergie dissipée par le fil chauffant déjà discutée au paragraphe 3.1.1.2.

Parmi les méthodes « hot wire », certaines étudient le régime transitoire associé à une production d'énergie constante par le fil chauffant. Il est montré que l'élévation de la température de l'échantillon avec le temps suit une loi logarithmique (e.g., Horai et Susaki, 1989). Dans le cas où un thermocouple est placé proche du fil chauffant, l'élévation de température, en fonction du temps  $t$ , lorsque le fil dissipe une énergie par unité de longueur  $Q$ , est de la forme :

$$T = \frac{Q}{4\pi K} \ln(t) + \text{constante} \quad (3.7)$$

L'avantage de la méthode est qu'elle n'utilise qu'un seul thermocouple, placé très proche du fil chauffant, ce qui évite les erreurs sur la position relative des 2 thermocouples. Dans les expériences à haute pression, et dans le cas des roches, ceci représente un grand avantage puisque aucune correction (de compressibilité intrinsèque ou de fermeture de cracks ou pores) n'est à évaluer (e.g., Horai and Susaki, 1989).

Le principe de cette méthode est utilisé pour les mesures sous conditions ambiantes de matériaux issus de forages (e.g., Huenges et al., 1990 ; Pribnow et Sass, 1995) (« line-source method »). Elle a été adaptée pour mesurer des fragments de carottes (à l'aide d'une mixture

roche/eau) et pour évaluer une éventuelle anisotropie lorsque des marqueurs macroscopiques sont présents (foliations et linéations). Son avantage est la rapidité de mise en œuvre.

Enfin, ce type de méthode peut être utilisé sur des poudres de cristaux mélangées à de l'eau distillée dont la conductivité est connue. Pour des minéraux anisotropes, il est ainsi possible de mesurer la conductivité moyenne du milieu (orientation des grains aléatoire dans le liquide). C'est la méthode du « needle probe » (Horai, 1971).

### 3.1.3 Méthode Angström ou harmonique

La méthode Angström (proposé par Angström en 1861) est une méthode périodique stationnaire dans le sens où une excitation thermique sinusoïdale est appliquée de façon permanente sur une face de l'échantillon. La détermination du déphasage et/ou de l'atténuation de l'amplitude à une distance définie de cette face permet de calculer la diffusivité thermique. L'analyse des oscillations thermiques se fait à l'aide de thermocouples et la production des oscillations à l'aide d'éléments chauffants (tubes de graphite, fils chauffants). Des géométries linéaires ou cylindriques peuvent être utilisées (Kanamori et al., 1969), permettant de réaliser des mesures à haute pression et/ou à haute température. La méthode Angström est le dispositif le plus couramment utilisé à très haute pression (>10 GPa) et très haute température (>1500K) (Fujisawa et al., 1968; Kanamori et al., 1969; Katsura, 1993; Katsura, 1995; Katsura, 1997; Khedari et al., 1995; Mirkovich, 1977). L'avantage de cette méthode est qu'il n'est pas nécessaire d'introduire de fortes variations de température (contrairement aux méthodes transitoires), car un bon rapport signal-bruit peut être obtenu en faisant varier la période (de 1s à plus de 400s) en fonction de la taille et de la diffusivité thermique de l'échantillon. L'équilibre thermique de l'échantillon est donc faiblement modifié, ce qui est fondamental pour l'évaluation du transfert radiatif. Les détails théoriques et expérimentaux de cette méthode seront exposés par la suite (§3.4).

Une variante de la méthode Angström classique a été proposée par Schatz et Simmons (1972). Elle a pour particularité de séparer la contribution des phonons et des photons à la diffusivité thermique. Pour cela, des oscillations thermiques sont induites par un laser à la surface d'un échantillon plat et l'analyse de la réponse se fait à l'aide d'un détecteur Infra-Rouge. La résolution de l'équation de la chaleur se fait en séparant les transferts par rayonnement et par phonons (Schatz et Simmons, 1972), alors que pour la plupart des autres méthodes, ces deux contributions sont incluses dans un seul et même paramètre (diffusivité apparente). Une relation complexe entre le coefficient d'extinction moyen (opacité), la conductivité par les phonons et la différence de phase entre la source laser et le détecteur est ainsi obtenue. La résolution de cette équation exige de travailler à diverses périodes d'oscillations (au moins deux, permettant d'obtenir deux déphasages différents, ce-dernier dépendant de la période), et les deux paramètres (coefficient d'extinction et conductivité par les phonons) sont déterminés de telle sorte qu'ils reproduisent le déphasage mesuré dans un intervalle de confiance donné (90%). Les incertitudes résultantes sont souvent supérieures à celles obtenues par d'autres méthodes. Lorsque le milieu est trop transparent (optiquement fin, à basse température pour l'olivine), l'intervalle de confiance de 90% conduit à des incertitudes très élevées sur ces 2 paramètres. Par contre, la méthode s'avère très efficace à très haute température et s'applique jusqu'à 1900K. Les données obtenues à très haute température pour l'olivine sont souvent considérées comme des données de références.

### 3.1.4 Autres méthodes.

Les méthodes exposées précédemment sont souvent considérées comme classiques pour des raisons de technologies (fil chauffant, thermocouples) et de traitement des données (résolution de l'équation de la chaleur). La principale critique qu'elles suscitent quant à leur

fiabilité est relative aux problèmes de contact entre les thermocouples et les échantillons et aux problèmes de conditions aux limites. Ces points seront abordés lors de la discussion des résultats (chapitre 5). Les deux méthodes qui vont être décrites par la suite sont des méthodes très récentes utilisées tout particulièrement en Sciences de la Terre. Les derniers résultats majeurs publiés concernant l'olivine et les minéraux du manteau en sont issus. Elles ne sont pas utilisables pour les roches.

### 3.1.4.1 Méthode « Picosecond Transient Grating Spectroscopy » (PTGS).

C'est une méthode qui exploite les possibilités des spectroscopies photo-acoustiques (« Impulsive Stimulated Scattering » ou « Laser Induced Phonon Spectroscopy ») (Zaug et al., 1992). L'interférence de deux trains d'ondes électromagnétiques (polarisés parallèlement) émis par un laser Nd-YAG (1064 $\mu\text{m}$ ) sur un monocristal induit une variation périodique de l'intensité lumineuse dans ce cristal (fig. 3.2).

Si le cristal absorbe une partie de ce rayonnement, une variation spatiale de la température et de la densité est attendue, conduisant à la propagation d'ondes acoustiques. Ceci conduit à une variation spatiale de l'indice de réfraction. L'échantillon se comporte alors comme un « réseau photo-acoustique » dont la largeur caractéristique  $d$  est égale à :

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} \quad (3.8)$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde du laser et  $\theta$  est l'angle entre la normale à l'échantillon et la direction de propagation du faisceau laser. Ce réseau est alors analysé en utilisant un troisième faisceau laser. L'intensité des franges d'interférences obtenues est analysée en

fonction du temps (picosecondes), grâce à une ligne à retard. Une fois que le réseau photo-acoustique est créé, il s'amortit car les variations de température (et donc les variations d'indice de réfraction) s'atténuent par diffusion thermique. Il peut être montré, via les relations liant indice de réfraction et température, que l'intensité des franges d'interférences est proportionnelle au carré de l'amplitude des variations spatiales de la température.

Ainsi l'amortissement de l'intensité diffusé par ce réseau et mesuré par le troisième laser est directement lié à la décroissance de la température. Comme dans les méthodes exposées précédemment, la diffusivité thermique est déduite en considérant la décroissance de l'intensité, donc de la température, en fonction du temps. Pour une diffusion thermique uni-

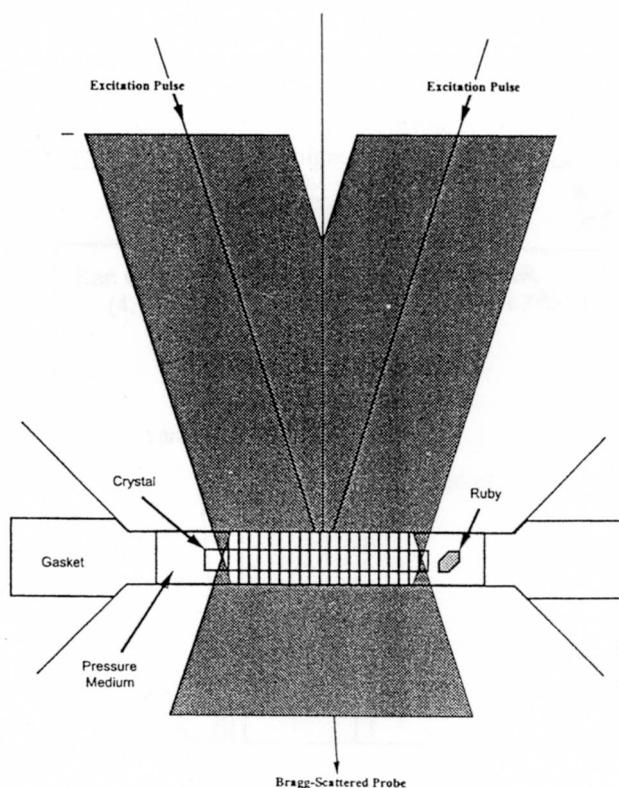


Figure 3.2 : méthode PTGS montée dans une cellule à enclume de diamant (Zaug, 1992)

dimensionnelle, le temps caractéristique de la décroissance exponentielle de l'amplitude de température dans le réseau est :

$$\tau = \frac{d^2}{4\pi^2 \cdot D_{th}} \quad (3.9)$$

d'où, l'intensité diffusée en fonction du temps :

$$\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = -\frac{2t}{\tau} \quad (3.10)$$

Cette méthode permet de mesurer uniquement la contribution des phonons (épaisseur optique très faible car les longueurs d'échantillons sont très inférieures au mm), et ce à haute pression (Zaug et al., 1992) et à haute température (Harrell et al., 2002). Elle souffre toutefois d'un manque de calibration sur des matériaux standard. En particulier, les mesures obtenues sur un verre de silice sont inférieures à celles généralement admises dans la littérature (voir discussion sur les valeurs absolues de la diffusivité - chapitre 5).

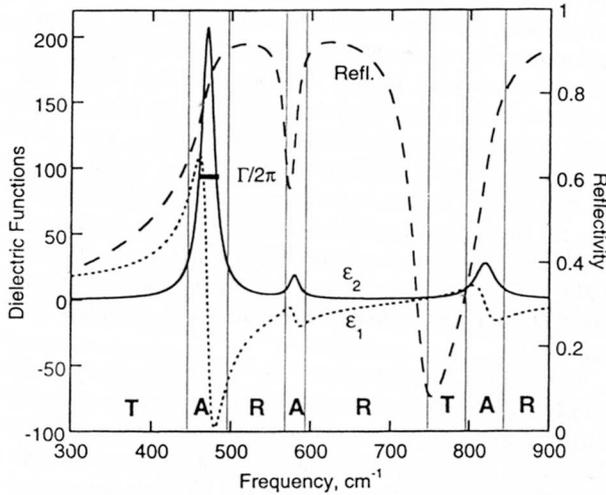
### 3.1.4.2 Méthode par le calcul des temps de vie des phonons.

Les relations définies dans le chapitre 2 suggèrent que la connaissance du temps de vie des phonons permet de calculer la conductivité thermique, connaissant les vitesses acoustiques et la capacité thermique à pression constante. Outre la possibilité de les calculer de façon théorique (voir chapitre 2), ces temps de vie peuvent être déterminés par des méthodes spectroscopiques (Raman ou Infra-Rouge). Dans le cas de la spectroscopie I.R. (transmission ou réflexion), les pics d'absorption observés correspondent à l'excitation des modes de phonons optiques. Les temps de vie de ces phonons y apparaissent de façon implicite car ils sont reliés à la largeur de ces pics. Une largeur de pic finie et non nulle suggère un amortissement du mode de vibration excité. Pour les phonons, cet amortissement est dû aux interactions entre les divers modes de phonons.

La détermination des temps de vie à partir des données spectroscopiques se fonde sur l'analyse classique de l'oscillateur harmonique amorti excité par un champ électrique extérieur (rayonnement I.R., par exemple) - le modèle de Lorentz. Le temps de vie des phonons  $\tau$  (oscillateurs excités par un rayonnement) est lié au coefficient d'amortissement  $\Gamma$  par la relation suivante :

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \quad (3.11)$$

Le terme  $\Gamma$  est déduit de chaque raie d'absorption I.R. (correspondant aux divers modes de vibrations du réseau), donc de la partie imaginaire de la fonction diélectrique  $\epsilon_2$ , par la mesure de la largeur à mi-hauteur des pics (fig. 3.3).



**Figure 3.3 :** Principe de l'extraction des temps de vie des phonons par l'étude de la réflectivité I.R.. Spectre synthétique comportant 3 oscillateurs amortis. La réflectivité mesurée est représentée par des tirets. La partie imaginaire  $\epsilon_2$  de la fonction diélectrique est représentée en trait plein et sa partie réelle  $\epsilon_1$  en pointillés. Le spectre montre les zones de réflexion (R), de transmission (T) et d'absorption (A).

En pratique, la réflectivité I.R. d'un cristal est analysée de façon à obtenir la fonction diélectrique en utilisant des relations de type Kramers-Kronig (Hofmeister, 1995). Un spectre synthétique est alors construit en considérant un ensemble d'oscillateurs harmoniques amortis dont les variables sont la fréquence de vibration (position des pics), leur largeur à mi-hauteur et leur intensité.

Dans le modèle de Hofmeister (2001), la vitesse de groupe  $v$  des phonons optiques, souvent considérée comme faible (voir discussion dans le chapitre 2), est assimilée à la vitesse des phonons acoustiques. Le temps de vie des phonons est égal à la moyenne des temps de vie obtenus grâce aux spectres I.R.. La contribution des phonons à la conductivité thermique est alors égale à :

$$K_L = \frac{1}{3} \sum_i C_i v_i k = \frac{1}{3} \sum_i C_i v_i^2 \frac{1}{\Gamma_i} \quad (3.12)$$

Pour les minéraux complexes, les phonons acoustiques sont négligés car leur nombre est faible par rapport à celui des modes optiques. De plus, la détermination de leur temps de vie est délicate (dans le cas de la diffusion Brillouin, la largeur de bande est souvent affectée par des perturbations liées aux instruments). Les résultats obtenus pour l'olivine sous conditions ambiantes sont en bon accord avec les mesures. Pour obtenir des conductivités à haute température, la méthode pourrait s'appliquer de la même façon en utilisant des spectres I.R. réalisés à haute température. Cependant, ces spectres ne sont disponibles qu'à des températures modérées (600-700K).

La contribution radiative est évaluée en considérant que le temps de vie des photons est égal au temps de vie des phonons, à cause de l'interaction réciproque entre phonons et photons lors de l'absorption I.R. (Hofmeister, 2000). C'est le résultat majeur de cette approche, car elle implique un libre parcours moyen de photons très faible (de l'ordre de quelques dizaines de microns). Cela conduit à proposer une contribution radiative négligeable jusqu'à des températures de l'ordre de 3000K (Hofmeister, 1999; Hofmeister, 2001).

Cette approche est intéressante dans le sens où elle permet de quantifier la diffusion thermique de façon indirecte, en étudiant des processus à l'échelle microscopique. Cependant, elle souffre d'un certain nombre de lacunes d'ordre expérimental (manque de spectres à haute température, indétermination des temps de vie des phonons acoustiques, calcul des vitesses de groupe des phonons optiques). Pour améliorer le modèle et le rendre plus rigoureux, il faudrait être capable d'évaluer la contribution de chaque mode de phonon à la conductivité.

### 3.1.5 Conclusion : choix d'une méthode ?

L'objectif de cette étude est de caractériser la diffusivité thermique dans le manteau. Ceci implique, outre la détermination de la diffusivité à des conditions ambiantes et de ses dérivées en température et pression, d'étudier le transfert d'échelle entre le cristal d'olivine et roches mantelliques. Cela suppose que :

- pour étudier la diffusion thermique à l'échelle de la roche, la méthode devra permettre des mesures sur des échantillons représentatifs. Pour cela, il faudra que la mesure échantillonne le maximum de grains dans la roche. Il est aussi nécessaire que le transfert de chaleur soit uni-dimensionnel afin de pouvoir déterminer l'anisotropie des propriétés de diffusion thermique.
- Pour étudier le transfert d'échelle entre roche et monocristal, une seule et unique méthode doit être utilisée, afin d'écartier tout problème lié à des erreurs expérimentales intrinsèques aux différentes méthodes de mesure. Il est donc nécessaire de disposer d'une méthode où la taille de l'échantillon peut être variable, afin de réaliser des mesures sur des petits cristaux aussi bien que sur des roches représentatives.
- Les mesures à haute température devront être effectuées sur des échantillons optiquement épais (équilibre radiatif), afin d'obtenir des informations sur la contribution radiative. La taille des échantillons devra donc être maximale.
- Les conditions de fugacité d'oxygène devront être contrôlées pour assurer la stabilité de l'olivine et évaluer de façon rigoureuse le transfert radiatif. Des expériences sous un flux d'argon et hydrogène sont donc nécessaires.
- Le développement de la fracturation thermique devra être limité, afin de ne pas modifier le comportement de la roche. Des expériences sous pression de confinement seront donc souhaitables.

De ces conditions résulte une exigence : celle de réaliser des mesures sur de grands échantillons. L'utilisation de grands échantillons pose toutefois des problèmes expérimentaux quant à la précision des mesures et quant à la réalisation de mesures à haute pression et haute température. Par conséquent, une seule et unique méthode ne peut pas rassembler toutes ces conditions.

Bien que certaines d'entre elles remplissent certains objectifs, les méthodes de mesures de conductivités thermiques nécessitent un bilan d'énergie souvent difficile à contraindre, surtout à haute température, et ce pour des raisons de conditions aux limites et d'incertitudes quant à l'énergie fournie par l'élément chauffant. La propriété mesurée dans cette étude sera par conséquent la diffusivité thermique. Le passage de la diffusivité à la conductivité thermique, dont la connaissance est indispensable dans les modèles numériques conductifs par exemple, se fera aisément à l'aide de l'expansion thermique, du coefficient de capacité calorifique à pression constante et de la masse volumique.

Trois méthodes de mesures de la diffusivité thermique ont été utilisées. Deux méthodes purement transitoires de type « hot wire » et « flash » modifiée, élaborées à Potsdam indépendamment l'une de l'autre, sont utilisées. La première est une méthode très contrainte pour la mesure des propriétés de transport thermique des roches de la croûte à haute température et à haute pression (Seipold, 1988). La seconde, plus récente (Schilling, 1999), montrent des avantages pour les mesures sur monocristaux et pour l'étude du transfert radiatif à haute température. Enfin, une méthode de type Angström en géométrie linéaire a été mise en œuvre à Montpellier au cours de la thèse. Elle permet des mesures à haute température sur roches et monocristaux, et son extension aux mesures à haute pression/haute température en géométrie cylindrique est abordée.

### 3.2 Méthode (1) transitoire en géométrie cylindrique (Seipold, 1988)

#### 3.2.1 Principe physique.

C'est une méthode de type « hot wire » transitoire qui permet d'obtenir la conductivité et la diffusivité thermique. Un fil chauffant délivre un pulse d'énergie (par effet joule) d'une durée de 3 secondes à l'axe d'un échantillon cylindrique de 43 mm de long et 27 mm de diamètre. Un thermocouple échantillonne la réponse à une distance de 7 mm du fil chauffant (fig. 3.4).

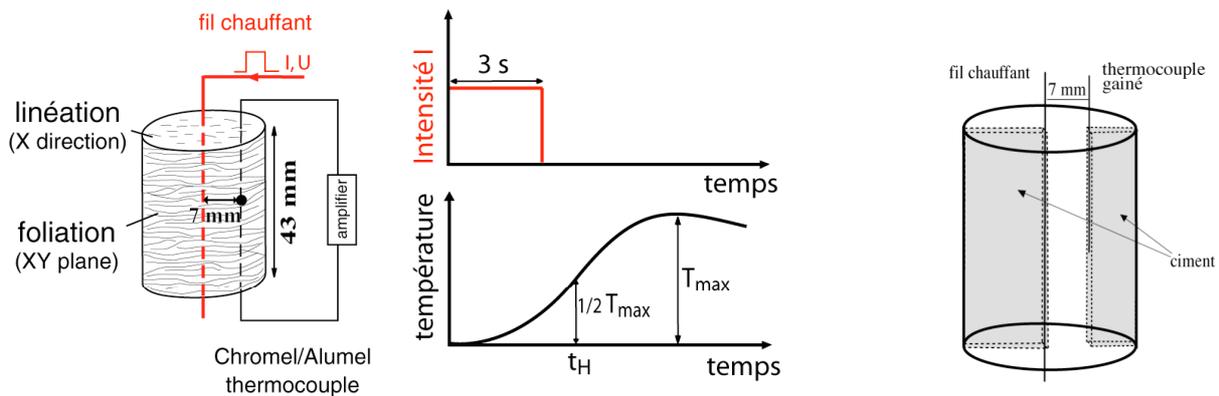


Figure 3.4 : A gauche, schéma de principe de la méthode 1, à droite montage du fil chauffant et du thermocouple dans l'échantillon cylindrique.

Dans cette configuration, la solution de l'équation de la chaleur correspond au cas d'une source linéaire émettant de l'énergie dans un milieu infini. Cette solution est connue quand le pulse a une durée infiniment petite (Carslaw et Jaeger, 1959, p.258). L'évolution de température est de la forme :

$$T = \frac{Q}{4\pi l K t} \times \exp\left(\frac{-a^2}{4Dt}\right) \times \operatorname{erf}\left(\frac{l}{(4Dt)^{0.5}}\right) \quad (3.13)$$

où  $Q$  est l'énergie totale délivrée par le fil chauffant,  $l$  est la longueur du fil chauffant,  $K$  la conductivité thermique,  $D$  la diffusivité thermique,  $a$  est la distance séparant le point de mesure du fil chauffant. Pour un pulse de durée non nulle (ici il est d'une durée de 3s pour une énergie d'environ 80 joules), le calcul de l'élévation de température est réalisé en subdivisant le pulse en  $n$  sous-pulses de très courtes durées et en sommant la réponse à chaque sous-pulse donnée par l'équation (3.13). Cette sommation de températures est réalisable en considérant que chaque apport d'énergie est responsable d'une même élévation de température, via une capacité calorifique supposée constante et homogène dans l'échantillon. La température à une distance  $a$  du fil chauffant s'écrit sous la forme :

$$T(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} T(t-k\Delta t) \quad (3.14)$$

où le terme  $T(t-n\Delta t)$  est la réponse au  $n$ -ième sous-pulse (équation (3.13)). Les conditions expérimentales sont choisies de telle sorte que le terme comprenant la fonction erreur dans l'équation (3.13) soit proche de 1.

Comme dans beaucoup de méthodes transitoires, la réponse du milieu au pulse est caractérisée par le temps mis pour atteindre le demi-maximum de l'élévation de température,  $t_{1/2}$  (fig. 3.4). On montre, en calculant numériquement la réponse du milieu pour un grand nombre de valeurs de diffusivité thermique (par la combinaison des équations (3.13) et (3.14) et en s'affranchissant du premier facteur impliquant la conductivité et l'énergie), qu'il existe diverses relations simples impliquant le temps  $t_{1/2}$ . Parmi ces relations, on note que celle qui lie le temps mis pour atteindre le maximum  $t_{max}$  au temps  $t_{1/2}$  :

$$t_{max}=2,649.t_{1/2}-2,296 \quad (3.15)$$

La température maximale  $T_{max}$  atteinte est de la forme :

$$T_{max}=0,3323-\frac{0,1834}{t_{1/2}}+\frac{21,94}{t_{1/2}} \quad (3.16)$$

La diffusivité thermique est de la forme :

$$D=\frac{a^2}{10,77.t_{1/2}-16,55} \quad (3.17)$$

Connaissant  $t_{1/2}$ , la diffusivité thermique peut donc être calculée. La connaissance du maximum mesuré  $T(t_{max})$  et du  $t_{1/2}$  permet de calculer la conductivité, en la comparant avec  $T_M$  calculé par l'équation (3.16) :

$$K=\frac{Q}{4\pi l}\frac{T_{max}}{T(t_m)} \quad (3.18)$$

Outre les paramètres géométriques (distances  $a$  et  $l$ ) qui sont constants pour une expérience donnée, chaque mesure est par conséquent caractérisée par l'énergie du pulse  $Q$ ,  $t_{1/2}$  et  $T(t_m)$ . L'énergie du pulse est déterminée en mesurant toutes les 1.7 ms l'intensité et la tension délivrée aux bornes du fil chauffant, puis en intégrant ces valeurs sur la durée totale du pulse (3 s). La température est enregistrée par le thermocouple (10 mesures/seconde), puis ajustée par une fonction polynomiale d'où sont extraits le temps à mi-hauteur  $t_{1/2}$  et la température maximale  $T_M$ .

## 3.2.2 Procédure expérimentale.

### 3.2.2.1 Géométrie de l'échantillon et caractéristiques de la source et capteur

Le principe de la méthode tel qu'il est donné plus haut présente des inconvénients quant à la préparation de l'échantillon. Le positionnement d'un fil chauffant de 0.5 mm de diamètre à l'axe d'un cylindre de 43 mm de long et d'un thermocouple de 0.2 mm de diamètre à 7 mm de l'axe est difficile à réaliser. Devant l'impossibilité technique de réaliser des trous si fins, deux fentes de 0.5mm d'épaisseur sont taillées parallèlement à l'axe du cylindre. Le fil chauffant et le thermocouple sont alors cimentés par une mixture de poudres de roche (fig. 3.4), dont les

propriétés de conduction thermique sont supposées être équivalentes à celle de la roche. Dans cette configuration, le contact entre les fils et la roche est supposé être optimal.

Le fil chauffant utilisé est un fil de NiChrome qui a le principal avantage de ne pas s'oxyder ou se réduire à l'air libre, à haute température. Cependant sa résistance demeure limitée à haute température, compte tenu de son faible point de fusion. Les thermocouples utilisées sont des thermocouples gainés de type K (Chromel-Alumel), particulièrement adaptés à l'intervalle de température étudié.

### 3.2.2.2 Acquisition des données

Dans la version actuelle du dispositif, le système d'acquisition de données n'est pas entièrement automatisé. En particulier, l'amplification du signal du thermocouple nécessite une calibration préalable avant chaque mesure. Cette calibration permet de n'amplifier que la différence entre la température initiale de l'échantillon (mesurée par le thermocouple juste avant le déclenchement du pulse) et la température enregistrée après le déclenchement du pulse. Enfin, les incréments de température ou de pression sont contrôlés directement par l'opérateur.

### 3.2.2.3 Mesures à haute température et haute pression

Pour les expériences réalisées à haute température, le cylindre est positionné dans un tube de Macor dont l'objectif est double : prolonger l'échantillon pour satisfaire une continuité dans la direction radiale (échantillon est considéré comme infini dans le traitement des données), et éviter la micro-fracturation thermique. Un four à 3 zones de chauffage est utilisé pour garantir un gradient thermique radial et longitudinal le plus faible possible. Les expériences peuvent être conduites jusqu'à 1000°C. Elles sont limitées par la résistance mécanique du fil chauffant, qui dans la plupart des cas rompt à environ 900°C. Les conductivités et diffusivités thermiques sont mesurées tous les 25 ou 50°C, dépendant de la variation de ces paramètres avec la température.

A haute pression et température ambiante, une presse hydraulique de type MTS (200 tonnes) associée à une enceinte à milieu de confinement liquide (huile de silicone) de 50 mm de diamètre interne est utilisée (pression maximale de 1GPa). Pour éviter la pénétration de l'huile dans l'échantillon, ce dernier est enrobé d'une pâte au silicone. La continuité radiale de l'échantillon est donc assurée par l'huile. Les mesures sont réalisées tous les 25 MPa à basse pression (variation les plus élevées attendues à basse pression) et tous les 50 MPa à plus haute pression.

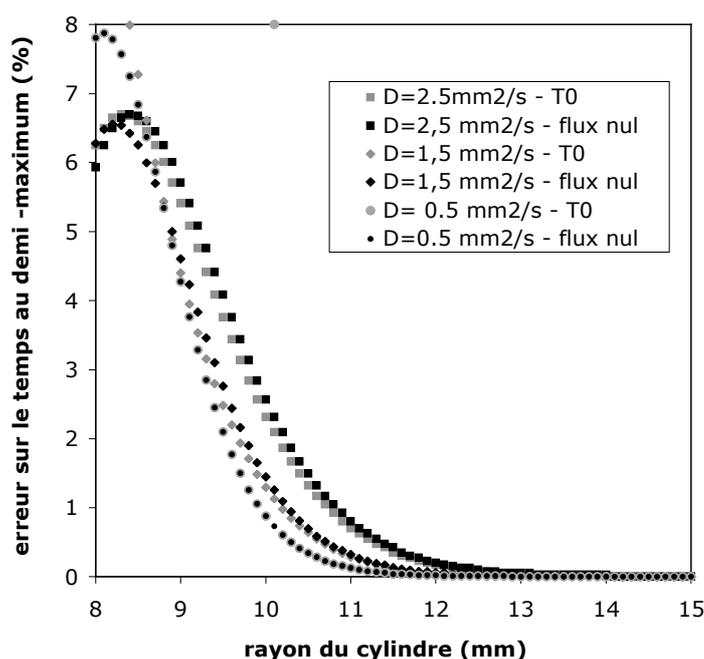
### 3.2.2.4 Procédure expérimentale et précision interne de la méthode.

Que ce soit à haute température ou haute pression, toute mesure est précédée par un laps de temps d'environ 30 ou 40 minutes afin que l'échantillon retrouve un équilibre thermique après l'augmentation de pression ou de température. A chaque température ou pression, 3 mesures successives sont réalisées afin de vérifier la précision de la mesure et d'évaluer les incertitudes liées aux problèmes internes d'équilibre thermique de l'échantillon et de bruit électronique. Entre deux mesures successives, un intervalle de temps d'environ 5 minutes permet de rétablir l'équilibre thermique perturbé par le pulse. La précision obtenue est meilleure que 3%. Une autre source d'incertitude, systématique celle-ci, est celle concernant la distance séparant le thermocouple du fil chauffant. L'avantage d'utiliser un système de fentes associé à la cimentation des éléments est que la position des fils de thermocouples est connue exactement par la mesure directe, avant l'expérience, de la distance  $a$ . L'incertitude est donc liée à la dimension non nulle de ces fils. Le diamètre du thermocouple étant de 0.2

mm, l'incertitude sur la dimension des fils est prise comme égale à 0.1mm. Cela conduit à une erreur d'environ 3% sur la diffusivité thermique. Pour la conductivité thermique, l'erreur sur la mesure de l'énergie du pulse, nécessaire à son calcul, s'ajoute aux précédentes et conduit à une erreur d'environ 5%.

S'ajoutant à ces incertitudes liées à la mesure des paramètres acquis lors d'une expérience, les incertitudes associées à la méthode même sont difficilement quantifiables, et en particulier celles concernant les conditions aux limites, particulièrement importantes lorsque le traitement mathématique proposé est valable pour un milieu infini. La calibration de la méthode avec des matériaux standard ou la modélisation numérique sont donc nécessaires pour contraindre les hypothèses de départ (milieu infini). Pour cela, un modèle différences finies en géométrie cylindrique a été construit et testé pour modéliser l'effet de la condition aux limites aux bords du cylindre (surfaces latérales) sur le calcul de la diffusivité thermique. Deux cas extrêmes ont été envisagés : température constante et flux nul (aucune perte) sur la surface latérale ; cela correspond aux cas où le cylindre est prolongé par un milieu de conductivité infini et un milieu de conductivité nulle, respectivement. Pour chacun de ces cas, le temps à mi-hauteur  $t_{1/2}$ , nécessaire pour calculer la diffusivité est évalué. Le test consiste à faire varier le rayon du cylindre depuis une valeur très élevée (supposée infinie) et d'évaluer l'erreur commise sur le temps à mi-hauteur. Dans les 2 cas, et pour des diffusivités thermiques proches de celles attendues pour des péridotites (environ  $2 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ), le temps  $t_{1/2}$  n'est pas affecté par la condition aux limites, pour le rayon choisi dans les expériences, c'est-à-dire 13.5 mm (fig. 3.5). Par conséquent, le matériau utilisé pour prolonger le cylindre ne peut avoir que peu d'influence sur une mesure. L'accord entre les mesures conduites dans un tube de Macor ou dans l'huile, pour un même matériau, constitue aussi une preuve expérimentale de la validité de l'hypothèse d'un milieu infini (Seipold, 2001).

Enfin, le ciment utilisé pour remplacer la roche dans l'entaille de 0.5 mm d'épaisseur (fig. 3.4) est une importante source d'incertitude. En effet, même s'il est constitué d'une poudre de roche dont les propriétés thermiques sont très proches de celles des péridotites, il est forcément poreux et sans doute très sensible à la température (déshydratation). Sa conductivité thermique est probablement inférieure à celle de la roche. L'effet de ce ciment n'a pas été testé numériquement.



**Figure 3.5 :** Effet de la condition aux limites aux bords du cylindre sur le temps au demi-maximum. Deux cas extrêmes sont envisagés: un flux constant et une température constante imposées sur la surface du cylindre. Les diffusivités thermiques sont choisies dans la gamme attendue des diffusivités thermiques des roches du manteau.

### 3.2.3 Calibration et mesures antérieures.

La taille de l'échantillon étant assez grande et le positionnement des thermocouples assez contraignant, cette méthode ne peut pas s'appliquer aux cristaux et ne peut pas être calibrée sur des standards de type quartz ou verre de silice. Elle n'est utilisable que pour les roches ou les céramiques. C'est pourquoi elle a été initialement calibrée avec du Macor et du Pyroceram. Par ailleurs, des mesures sur des granulites en utilisant cette méthode ont été comparées à des données obtenues par la méthode « divided-bar » au Geological Survey of Finland (Kukkonen et al., 1999 ; Seipold, 2001). Les écarts mesurés sont de l'ordre de grandeur des barres d'erreurs attendues pour ces deux méthodes (environ 3%).

Les mesures issues de cette méthode concernent principalement les roches de la croûte continentale (granites, granulites, gneiss, amphibolites, pyroxénites) et des serpentinites (Seipold, 1990; Seipold, 1992; Seipold, 1996; Seipold, 1998; Seipold et Huenges, 1998). A haute température, la méthode a notamment permis de mettre en évidence l'effet de la transition  $\alpha$ - $\beta$  du quartz sur la conductivité et la diffusivité thermique des granites, l'effet de la déshydratation sur les paramètres thermiques des serpentinites et également les dépendances en température de la diffusivité thermique pour une grande variété de roches (Seipold, 1998 ; Seipold, 2001). À haute pression, elle a permis d'étudier avec grande précision l'effet de la fermeture des microfractures sur la diffusivité et la conductivité thermique (Seipold et al., 1998).

### 3.2.4 Discussion : avantages et inconvénients.

#### 3.2.4.1 Types d'échantillons

La distance entre le fil chauffant et le thermocouple étant d'environ 7 mm, une mesure est donc représentative des propriétés locales des minéraux situés entre le fil et le thermocouple. Pour que les propriétés locales de la roche soient représentatives de la roche totale, il faut que la taille de grains soit bien inférieure à 7 mm. Des tailles de grains inférieures à 1 mm ainsi qu'une homogénéité de la roche sont donc les conditions nécessaires pour obtenir une mesure représentative. Pour des péridotites, où la taille de grains peut varier de quelques dizaines de microns à plusieurs millimètres, mais où les granulométries grossières prédominent, les mesures peuvent ne pas être représentatives.

Par ailleurs, l'énergie se propageant radialement (idéalement dans un milieu homogène, assimilable à une propagation uni-dimensionnelle), la position du thermocouple peut être choisie afin de mesurer les propriétés suivant une direction donnée. La méthode est donc adaptée à la mesure d'échantillons anisotropes (préalablement caractérisés par des mesures de fabriques cristallographiques ou des éléments macroscopiques tels que la foliation et la linéation).

#### 3.2.4.2 Mesures à haute pression.

Le dispositif expérimental permet d'appliquer une pression hydrostatique qui ne modifie pas la géométrie cylindrique de l'échantillon. Par contre, la position du thermocouple n'est plus connue avec précision lorsque la pression est appliquée. Si les effets liés à la compressibilité des minéraux à haute pression sont corrigeables, il est plus difficile d'évaluer les effets dus à la fermeture des microfractures à basse pression. Dans ces deux cas, le thermocouple se rapproche du fil chauffant, et si sa position n'est pas corrigée, cela conduit à une surestimation des propriétés mesurées, et donc des dérivées en pression. La méthode

proposée par Horai et Susaki, 1989 est de ce point de vue plus efficace, puisque le thermocouple est située au centre de l'échantillon. L'autre inconvénient majeur de ces expériences à haute pression est l'impossibilité de contrôler la température dans l'enceinte. Des variations de quelques degrés de la température de l'enceinte peuvent contrarier la représentativité des mesures, sachant qu'à température ambiante la conductivité et la diffusivité thermique varient fortement en fonction de la température.

### 3.2.4.3 Mesures à haute température.

La méthode présentée permet des mesures jusqu'à 1000°C, donc à des températures où le transfert radiatif peut être prépondérant. Dans ces conditions, il faut s'assurer que la propagation du pulse n'entraîne pas une modification de l'équilibre radiatif. D'après les exemples expérimentaux, ou bien les calculs théoriques, l'élévation de température au thermocouple est toujours inférieure à 1.5K. Le gradient thermique est donc relativement faible. Ceci est principalement dû à l'utilisation d'un pulse d'une durée relativement étendue. De ce point de vue, cette méthode transitoire est plus fiable qu'une méthode de type flash, où le gradient créé est très élevé à cause de la courte durée du pulse. De plus, d'après les considérations concernant les conditions de diffusion de Boltzman, la distance entre le thermocouple et le fil chauffant est primordiale. Elle doit être suffisamment supérieure à celle du libre parcours moyen des photons pour que le transfert radiatif soit évalué. Pour beaucoup de minéraux semi-transparents, et selon la température, cette distance peut être insuffisante. L'inconvénient majeur de la méthode est qu'elle ne permet pas de faire varier la distance suivant laquelle l'énergie se propage (elle est constante et égale à 7 mm). Si les transferts radiatifs peuvent être évalués, il ne sera pas possible de savoir s'ils sont évalués dans leur totalité ou si seulement une fraction est évaluée. Par ailleurs, la configuration proposée ne permet pas de contrôler la fugacité d'oxygène. L'oxydation pouvant conduire à une augmentation de l'opacité des minéraux comme l'olivine, le transfert radiatif pourra être altéré sous l'effet de l'oxydation.

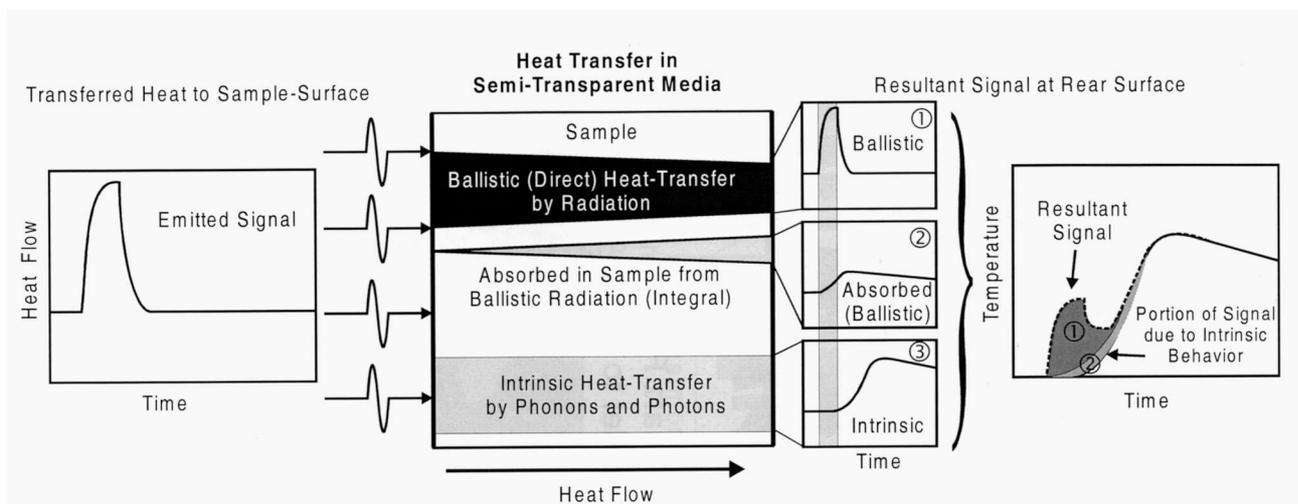
En conclusion, cette méthode est bien adaptée pour réaliser des mesures sur des roches à haute pression et à des températures modérées (jusqu'à 950°C). Le fait de pouvoir réaliser des mesures sur des échantillons anisotropes sera exploité prioritairement. Cependant, elle ne permet ni les mesures sur des cristaux ni de traiter de façon rigoureuse les aspects liés aux transferts radiatifs, c'est pourquoi des méthodes alternatives et complémentaires sont utilisées dans la suite.

### 3.3 Méthode (2) transitoire en géométrie linéaire (Schilling, 1999).

#### 3.3.1 Principe

Cette méthode utilise des échantillons de formes quelconques qui possèdent deux faces parallèles. Un pulse d'énergie de quelques secondes généré par un fil de platine crée une élévation de température sur la face supérieure (1) (fig. 3.6 et 3.8). La température de l'échantillon s'équilibre alors dans le temps et le retour à l'équilibre est enregistré sur la face inférieure (2) par un thermocouple (TC2). La forme du pulse est enregistrée par un thermocouple (TC1) situé entre le fil chauffant et l'échantillon (sans contact). L'élévation de température  $dT$  du TC1 est proportionnelle à l'énergie délivrée par le fil de platine  $dq$  via la capacité thermique du fil de thermocouple.

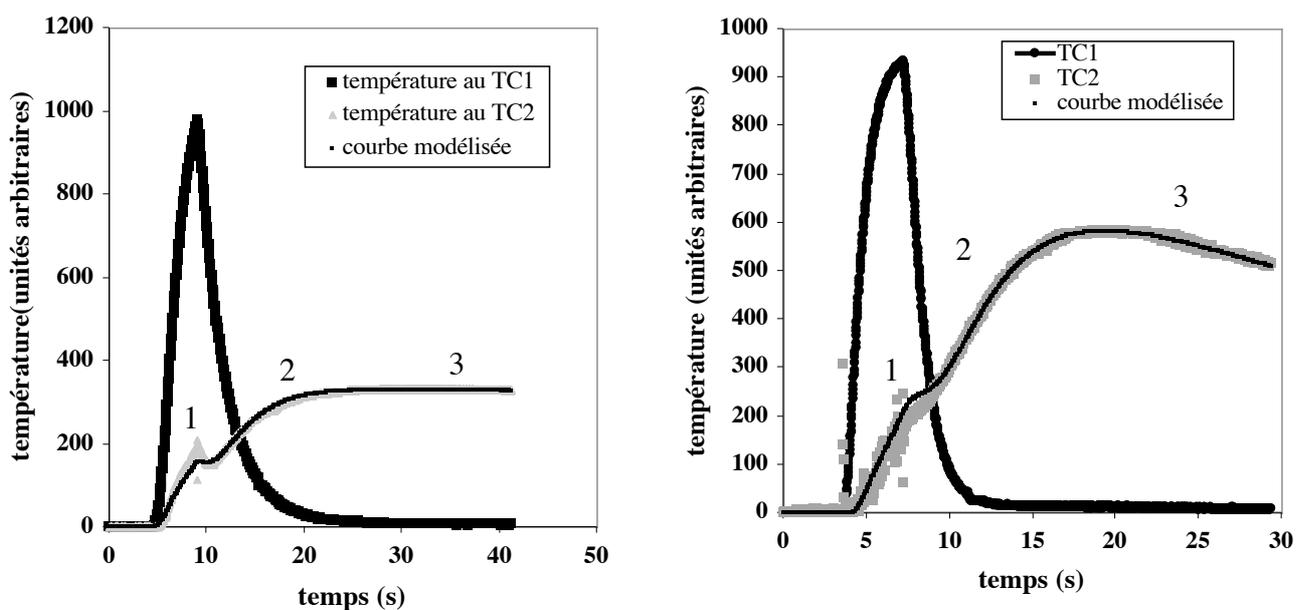
L'énergie transférée au TC1 est proportionnelle à celle transférée à la surface (1) de l'échantillon. Le procédé d'évaluation n'impose pas la connaissance de la température sur la surface (1), ni du flux de chaleur la traversant. La courbe de température mesurée par le TC2 est ajustée par une courbe calculée par un modèle en différences finies unidimensionnel dont la donnée d'entrée est la forme du pulse sur la face (1) et dont les paramètres variables sont la diffusivité thermique et les pertes sur les surfaces de l'échantillon (exemple de courbes fig. 3.7). Le modèle comporte entre 40 ou 100 éléments de tailles identiques et le pas de temps est optimisé en fonction de la condition de convergence (schéma explicite-annexe 1). Les pertes sur les surfaces latérales sont évaluées en considérant qu'elles sont proportionnelles à la différence  $\Delta T$  entre la température de l'élément et celle du milieu environnant (équation (3.4)). Cette hypothèse est vérifiée lorsque  $\Delta T$  est faible (typiquement  $<10^\circ\text{C}$  pour cette méthode). Les pertes sont calculées en ajustant la partie (3) de la courbe mesurée au TC2 (fig. 3.7). Le modèle prend également en compte les divers types de transferts radiatifs pouvant accompagner l'émission du flux (fig. 3.6), en particulier le rayonnement balistique ou direct (partie (1) –fig. 3.6 et 3.7).



**Figure 3.6 :** Différenciation des processus de diffusion intrinsèques et des processus liés au rayonnement 'direct' dans la méthode transitoire 2.

En effet, la face (1) de l'échantillon est chauffée par rayonnement, et non par contact. Une partie du rayonnement n'est cependant pas absorbée par la surface (1) et traverse directement le matériau (partie 1 des figures 3.6 et 3.7). Pour limiter cet effet, la surface (1) est rendue absorbante par le dépôt d'un film fin de laque d'argent ou de graphite. Malgré ces précautions, un flux de chaleur balistique est toujours présent si le matériau est transparent ou semi-transparent. Ce flux est directement absorbé par le thermocouple TC2. L'élévation de température résultante au TC2 est alors proportionnelle au flux émis par le fil chauffant. La proportionnalité dépend du traitement de la surface. Une autre portion du rayonnement direct est partiellement absorbée lors de son trajet dans le matériau, ce qui contribue à élever la température du TC2 (partie 2 de la figure 3.6). Cette portion est proportionnelle au flux de chaleur balistique et dépend de l'absorption du matériau. Le modèle prend en compte le rayonnement direct en ajoutant un signal de température proportionnel à l'énergie émise par le fil chauffant sur l'élément proche du TC2. Ce transfert balistique est ajusté par le modèle afin d'obtenir un accord maximal entre les courbes mesurées et calculées.

Le modèle permet d'évaluer la composante intrinsèque du transfert radiatif qui s'ajoute au transfert par les phonons (partie (2) des figures 3.7 et (3) de la figure 3.6).



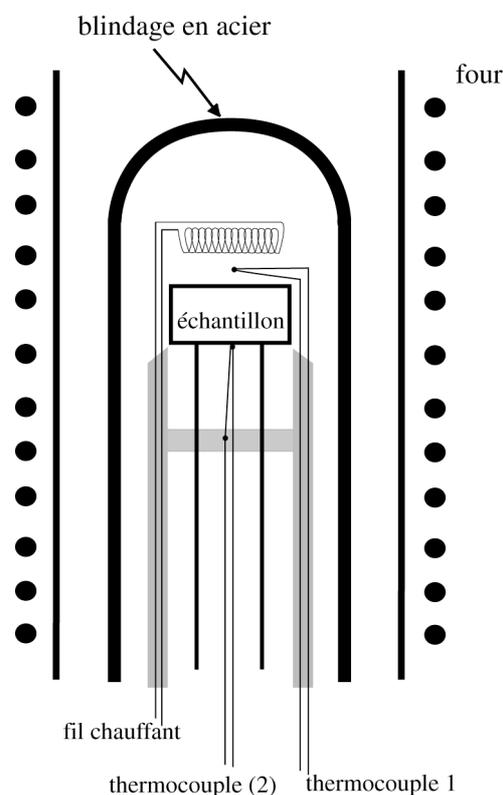
**Figure 3.7 :** Exemples de courbes obtenues sur deux monocristaux d'olivine différents. A gauche, mesure à température ambiante : les pertes (partie (3)) de la courbe sont très faibles et le transfert direct (partie (1)) est important. A droite, mesure à 800°C : le rayonnement direct reste important et les pertes sont plus importantes. La partie (2) représente les transferts thermiques dus aux processus intrinsèques (diffusivité réseau et radiative).

### 3.3.2 Dispositif expérimental

La géométrie des échantillons requise impose seulement deux faces polies et parallèles. Elle peut être cylindrique, parallélépipédique ou de forme quelconque. Afin de limiter les pertes sur les surfaces latérales et d'augmenter le signal sur le TC2, des échantillons de forme plate sont préférés. La longueur des échantillons (distance entre les deux faces parallèles) peut varier de 3 à 18 mm, et les diamètres de 8 à 13 mm environ. Le dispositif est par conséquent

simple et permet un montage rapide de l'échantillon (fig. 3.8). Ce-dernier est supportée par deux fines baguettes d'alumine et par le thermocouple TC2. Le TC2 garantissant l'équilibre de l'échantillon, ce-dernier est donc nécessairement en contact avec la face (2). Le fil de platine est disposé à une distance d'environ 5 mm de la face (1) et il est alimenté sous 20V-1.2A durant une période variable adapté suivant les caractéristiques de l'échantillon (2 à 5 secondes généralement). Le TC1 est disposé entre la face (1) et le fil de platine, sans contact. Les deux thermocouples sont de type K. Le TC2 est constitué de deux jonctions permettant de mesurer la différence entre la température de la face (2) et une température de référence (non affectée par le signal du fil chauffant). Ainsi seulement l'élévation de température est amplifiée. La température ambiante du four est mesurée par le thermocouple supérieur.

Le dispositif est monté dans un four tubulaire (atteignant 1000°C) dont la température est contrôlée par ordinateur. Un tube d'inox relié électriquement à la terre est situé entre les enroulements du four et l'échantillon. Il permet de réduire le gradient thermique et de limiter le bruit électronique généré par le four. L'ensemble du dispositif est automatisé sous labview : programmation des incréments de température, déclenchement de la mesure et enregistrement des données.



**Figure 3.8 :** Montage expérimental de la méthode 2 et photo montrant la disposition de l'échantillon dans le four (monocristal d'olivine).

### 3.3.3 Conditions de mesure et précision.

La précision de la mesure est fortement conditionnée par la taille de l'échantillon, sa diffusivité thermique et son opacité. En effet, le procédé d'évaluation de la diffusivité thermique impose une séparation des signaux relatifs au transfert balistique et de ceux relatifs au transfert conductif intrinsèque au matériau. Pour une taille donnée d'échantillon, deux cas de figure se présentent : si sa diffusivité thermique est élevée et si son opacité est faible, l'énergie transportée par conduction va se superposer dans le temps à celle transportée par le transfert balistique (partie 2 et 1 de la figure 3.7). Si son opacité est forte (roche, par exemple,

ou minéraux opaque), l'effet sera moindre. Dans l'autre cas, si sa diffusivité est faible, alors il sera possible de séparer, quelque soit l'opacité du matériau, les deux types de transfert. Des exemples obtenus pour des monocristaux d'olivine et des péridotites illustrent ce propos dans le chapitre 5. Dans ces conditions, la taille de l'échantillon est choisie en fonction de la diffusivité thermique attendue et éventuellement de son opacité. D'après des essais de reproductibilité, une mesure est jugée valide si le transfert balistique n'entraîne pas une élévation de température supérieure à la moitié de l'élévation de température totale. Dans le cas où la taille de l'échantillon n'est pas ajustable (monocristaux), la durée du pulse peut être modifiée : une courte durée de pulse limite la durée du transfert balistique, car celui-ci ne dépend que de la durée du pulse tandis que le transfert conductif intrinsèque ne dépend que des propriétés du matériau. Le problème est amplifié à haute température, car le transfert radiatif direct ou balistique est accentué à cause de la déstabilisation de la couche d'argent disposée sur la face (1). Dans ce cas, la diffusivité thermique ne peut pas être évaluée. Cela constitue le principal inconvénient de la méthode : la précision de la méthode chute rapidement au delà de 800-850°C.

Dans ces conditions, chaque réponse sera examinée attentivement et les mesures pour lesquelles le transfert direct est prédominant (+de 50% du signal) seront rejetées. Un coefficient de confiance subjectif sera attribué à chaque mesure, en fonction cette condition. La reproductibilité des mesures, en fonction de la taille des échantillons, constituera une vérification objective de cette condition.

Pour des échantillons dont la taille est bien adaptée à la mesure de la diffusivité thermique, l'appareil a une précision interne variant de 1 à 3% (Schilling, 1999). Cette précision a été évaluée en réalisant des mesures successives sur un même échantillon ; elles prennent en compte les erreurs liées au bruit électronique ou encore à la précision du modèle numérique. Cette précision varie cependant en fonction de la taille et de la diffusivité de l'échantillon.

Les erreurs liées à la longueur de l'échantillon sont très faibles car le thermocouple TC2 est en contact effectif avec l'échantillon (erreur <1%). Celles liées à la relation entre l'énergie absorbée par le thermocouple TC1 et l'énergie reçue par la face (1) sont estimées à 2%. Les hypothèses utilisées dans le modèle numérique conduisent à une erreur d'environ 1% sur la diffusivité. La précision externe de l'appareil est estimée à moins de 5%.

### 3.3.4 Calibration

La détermination de la précision de l'appareil et sa calibration ont été principalement conduites sur du quartz synthétique (Höfer et Schilling, 2002). Plusieurs tailles d'échantillon (15 mm de diamètre et de 8.5 à 20 mm de longueur) ont été testées et la reproductibilité est élevée (meilleure que 3%). Les valeurs absolues obtenues à température ambiante sont en très bon accord avec les mesures précédentes (Beck et al., 1978; Clauser et Huenges, 1995; Kanamori et al., 1968). La précision des mesures, ainsi que celle de la mesure de la température, sont révélées par la qualité des mesures au voisinage de la transition de phase. L'absence de mesure de transfert radiatif, attendue pour ce minéral transparent pour lequel des longueurs d'échantillons de 10-20 mm sont inférieures au libre parcours moyen des photons, montre que la méthode est capable de séparer efficacement le transfert balistique du transfert intrinsèque. Le fait que la variation de taille des échantillons ne modifie pas la diffusivité thermique mesurée montre aussi que seul le transfert par les phonons est mesuré.

Préalablement à cette étude, la diffusivité thermique d'un verre de silice (Heraeus QuartzGlass) a été également déterminée à température ambiante. Pour ce type de matériau très transparent, la qualité de la couche de laque d'argent sur la face (1) a un rôle prépondérant sur la reproductibilité des mesures. Dans le cas où le transfert balistique est

limité, la diffusivité calculée varie entre 0.85 et 0.9 mm<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>, ce qui est légèrement supérieur aux valeurs préconisées par le fabricant (0.84 mm<sup>2</sup>.s<sup>-1</sup>).

### 3.3.5 Apport de la méthode

L'absence de contraintes sur la géométrie de l'échantillon est le principal avantage de la méthode. Elle peut par conséquent être utilisée pour mesurer la diffusivité thermique d'un cristal ou d'un polycristal (roche). La séparation du transfert balistique et du transfert radiatif intrinsèque, pour des tailles d'échantillons appropriées, est une amélioration importante des méthodes transitoires de type hot wire ou flash. Elle est donc particulièrement adaptée pour la mesure du transfert radiatif, même si elle n'est plus assez précise au delà de 850°C à cause d'un transfert balistique souvent trop élevé, mais également à cause d'une augmentation du bruit électronique.

## 3.4 Méthode (3) Angström linéaire (Laboratoire de Tectonophysique-Montpellier)

Les méthodes Angström mises en oeuvre au laboratoire de Tectonophysique sont fondées sur les méthodes initialement conçues dans le cadre des Sciences de la Terre par Kanamori (1969). Le principe physique est préservé, mais les conditions d'acquisition et de traitement de données ont été sensiblement améliorées. L'interprétation des résultats, le recours à la modélisation numérique et une calibration attentive complètent cette étude.

### 3.4.1 Géométrie linéaire finie (température ambiante).

Cette méthode est aussi connue sous le nom de méthode Angström modifiée. Elle est décrite par Kanamori (1969) et reformulée de façon plus rigoureuse par Horai (1981). Bien qu'elle ait été très largement utilisée en Sciences de la Terre, il va être montré par la suite que son application n'en demeure pas moins problématique.

#### 3.4.1.1 Principe

Cette méthode permet l'étude de la propagation d'une « onde sinusoïdale de température » dans un barreau allongé (de forme cylindrique ou parallélépipédique) de longueur  $l$  et de section d'une surface  $s$ . Une variation sinusoïdale de température est créée à la base de l'échantillon (surface 1) et est enregistrée par un thermocouple (TC1). A l'autre extrémité de l'échantillon, à une distance  $l$ , la température est également enregistrée par un thermocouple (TC2). Le transfert de chaleur est supposé uni-dimensionnel (dans la direction  $x$ ), et les pertes par les surfaces latérales par rayonnement sont prises en compte.

L'équation de la chaleur à résoudre est la suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \nu \cdot T \quad (3.19)$$

où  $\nu$  est appelée constante radiative. Le terme  $\nu \cdot (T - T_0)$  détermine les pertes par rayonnement de l'élément de volume  $s \cdot dx$  dans un milieu à la température constante  $T_0$ , dans l'approximation où  $(T - T_0)/T_0$  est très petit, ce qui est toujours vérifié (car  $(T - T_0)$  est inférieur

à 5°C) . Les pertes par la surface (2), d'aire  $s$ , ne sont pas prises en compte car supposées négligeables par rapport aux pertes par les surfaces latérales. Les pertes étant directement proportionnelles aux surfaces, cette hypothèse n'est valide que lorsque l'aire des surfaces latérales est bien plus élevée que l'aire des bases  $s$ , donc lorsque l'échantillon est très allongé dans la direction  $x$ . Ceci est donc l'hypothèse de base de la méthode.

La température en  $x=0$  , dont l'amplitude est  $A_1$  et la pulsation est  $\omega$  est égale à :

$$T(x=0,t)=A_0 + A_1 \cos(\omega.t) \quad (3.20)$$

Les pertes en  $x=l$  sont nulles, donc :

$$\frac{\partial T(x=l)}{\partial x} = 0 \quad (3.21)$$

La solution en ondes progressives de l'équation (3.19) est de la forme générale :

$$T_i = B_0 \exp(-q_0.x) + B_1 \exp(-q_1.x) \times \cos(\omega t - q_2.x) \quad (3.22)$$

$$\text{avec } q_0 = \left(\frac{\nu}{D}\right)^{1/2}, \quad q_1 = \left[ \frac{\nu}{2D} + \left(\frac{\nu^2}{4D^2} + \frac{\omega^2}{4D^2}\right)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad \text{et } q_2 = \left[ -\frac{\nu}{2D} + \left(\frac{\nu^2}{4D^2} + \frac{\omega^2}{4D^2}\right)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (3.23)$$

La condition (3.21) induit une réflexion de cette onde en  $x=l$ . Cette onde réfléchie est de la forme :

$$T_r = B_0 \exp(-q_0.(2l-x)) + B_1 \exp(-q_1.(2l-x)) \times \cos(\omega t - q_2.(2l-x)) \quad (3.24)$$

Selon (3.21)  $T = T_i + T_r$  , et en  $x=0$ , l'onde réfléchie induit la condition :

$$T = B_0 + B_1 \cos(\omega t) + B_0 \exp(-2q_0.l) + B_1 \exp(-2q_1.l) \times \cos(\omega t - 2q_2.l) \quad (3.25)$$

Si le terme  $\exp(-2.l.q_1) \ll 1$  (onde réfléchie n'affectant pas la condition en  $x=0$ ), alors la condition en  $x=0$  s'écrit comme l'équation (3.25), avec

$$B_1 = A_1 \quad \text{et} \quad B_0 = \frac{A_0}{1 + \exp(-2.l.q_0)} \quad (3.26)$$

Ainsi, la température à une distance  $x=l$  du barreau sachant que  $T = T_i + T_r$  :

$$T = \frac{2A_0 \exp(-q_0.l)}{[1 + \exp(-2lq_0)]} + 2A_1 \exp(-q_1.l) \times \cos(\omega t - q_2.l) \quad (3.27)$$

La connaissance de l'atténuation et du déphasage de l'onde en  $x=l$  par rapport à la référence en  $x=0$  permet de calculer les 2 paramètres  $q_1$  et  $q_2$  et donc la diffusivité  $D$  et la constante radiative  $\nu$  :

$$\text{atténuation} = a = \frac{1}{2 \exp(-q_1 l)} \quad \text{et} \quad \text{déphasage} = \Delta\Phi = q_2 l \quad (3.28)$$

$$\text{d'où} \quad q_1 = \frac{\ln(2a)}{l} \quad \text{et} \quad q_2 = \frac{\Delta\Phi}{l} \quad (3.29)$$

$$\text{et} \quad D = \frac{\omega}{2 \cdot q_1 \cdot q_2} \quad \text{et} \quad v = \frac{\omega(q_1^2 - q_2^2)}{2 \cdot q_1 \cdot q_2} \quad (3.30)$$

La condition  $\exp(-2 \cdot l \cdot q_1) \ll 1$  garantit la réalisation de la condition aux limites. En pratique, les mesures sont retenues seulement si ce facteur est inférieur à 0,05. Cette condition est réalisée en ajustant la période du signal en fonction de la diffusivité du milieu et de la longueur  $l$ .

### 3.4.1.2 Mise en œuvre

La méthode n'a été testée qu'à température ambiante, dans un dispositif très simple reprenant celui de (Kanamori et al., 1969). L'échantillon et les thermocouples (de type K) sont collés par de la laque d'argent sur la base chauffante et les bases de l'échantillon, respectivement. La laque d'argent (qui conduit bien la chaleur) est supposée limiter les résistances de contact thermique. La puissance débitée par le fil chauffant de Nichrome est de quelques watts et l'amplitude de l'onde thermique n'excède pas 2°C au TC1, soit environ 0.5°C au TC2, suivant la longueur de l'échantillon, sa diffusivité thermique et la période d'oscillation.

La détermination des paramètres expérimentaux (périodes, amplitudes d'oscillations,...), l'enregistrement des signaux des thermocouples et le traitement des données sont réalisés sous Labview. Les programmes seront détaillés dans la partie relative à la géométrie semi-infinie.

### 3.4.1.3 Calibrage de la méthode et représentativité des mesures.

La méthode a été calibrée sur du verre de silice (Heraeus QuartzGlass) de différentes longueurs et diamètres. L'avantage du verre de silice est que sa diffusivité thermique varie peu en fonction de la température, donc la température ambiante n'a pas besoin d'être connue avec précision. Les essais ont été réalisés en faisant varier systématiquement la longueur de l'échantillon et la période du signal (de 30s à 200s), tout en respectant la condition  $\exp(-2 \cdot l \cdot q_1) \ll 1$ . Les résultats obtenus sous vide montrent une assez bonne reproductibilité des mesures (fig. 3.9). La géométrie de l'échantillon ne semble pas affecter la mesure et l'hypothèse d'un barreau allongé semble être respectée même pour des longueurs assez faibles. Les valeurs obtenues sont toutefois légèrement inférieures aux mesures de référence (Clauser et Huenges, 1995) et à la diffusivité annoncée par le fabricant.

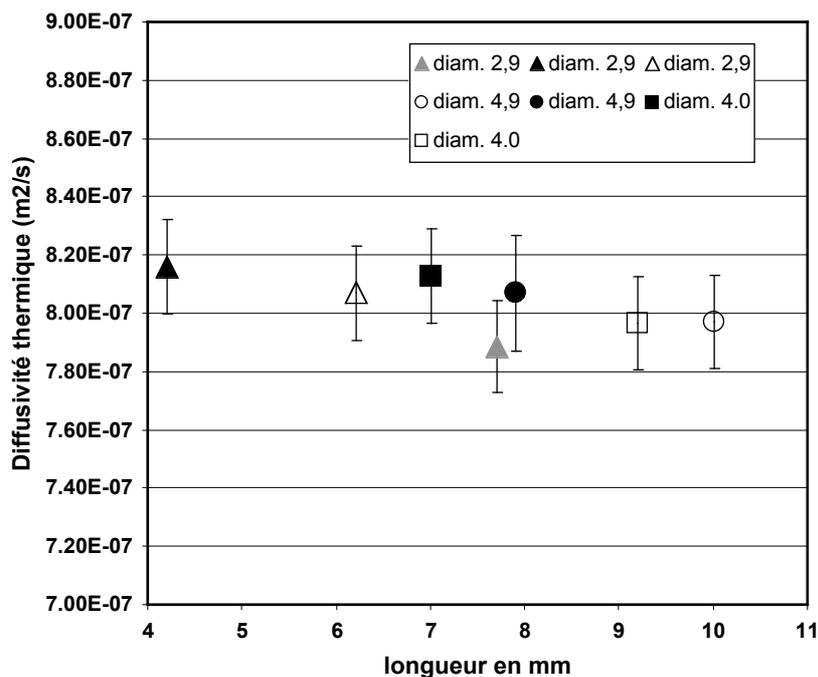


Figure 3.9: mesures sous vide ( $10^{-2}$  mbar) et à température ambiante de la diffusivité thermique du verre de silice. La valeur standard est de  $8,3 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Les valeurs obtenues sont légèrement inférieures à cette valeur de référence; cette sous-estimation de la diffusivité est due probablement à un mauvais contact thermocouples-échantillon. Les barres d'erreurs sont de 2%

A l'air libre (pression 1 bar), une forte variation des valeurs mesurées en fonction de la période d'oscillation est cependant observée (fig. 3.10). Ce problème est très peu documenté dans la littérature relative à la méthode Angström linéaire. Il est, par contre, bien contraint dans la méthode Angström en géométrie cylindrique. Dans cette géométrie, la variation de la diffusivité mesurée en fonction de la période est interprétée comme étant due à des problèmes de contact entre les thermocouples et le matériau. En particulier, la nature du milieu environnant (air, argon ou hélium) semble influencer cet effet (Benigni et Rogez, 1997).

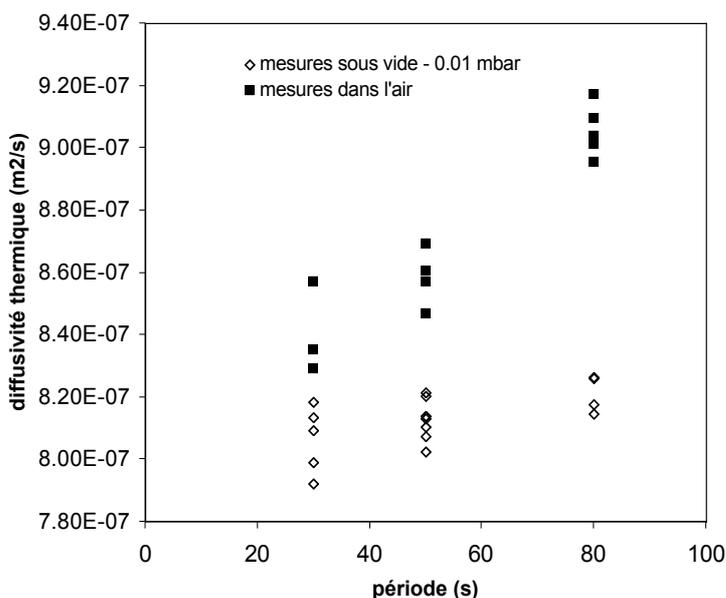


Figure 3.10: effet de la période et du milieu environnant (vide ou air libre) sur la diffusivité thermique d'un verre de silice de 4mm de diamètre et 7 mm de longueur.

Un paramètre H:

$$H=K/h \quad (3.31)$$

où K est la conductivité du matériau et  $1/h$  la résistance de contact entre les thermocouples et le matériau, est introduit afin de rendre compte de cet effet. Pour des valeurs de H importantes, la résistance thermique joue un rôle déterminant et la dépendance de la diffusivité à la période devient plus importante. Pour une résistance de contact constante (fonction du procédé expérimental, ici contact avec laque d'argent, ou du milieu environnant), la dépendance de la diffusivité à la période est accrue quand la conductivité du matériau augmente.

La comparaison entre mesures conduites à l'air libre ( $P=1$  bar) et sous vide montre que la mesure sous vide a pour effet de baisser la valeur de la diffusivité thermique mesurée, mais aussi de réduire l'effet de la période (fig. 3.10). La présence d'air améliore le contact thermique, ce qui implique l'augmentation de la diffusivité apparente. Par contre, le vide ne permettant pas la conduction de la chaleur, il ne contribue pas au contact entre le thermocouple et la roche, c'est pourquoi l'effet de la période sur la diffusivité est moindre. Cette observation suggère que l'effet de la période sur la diffusivité thermique est une conséquence d'une résistance de contact entre les thermocouples et le matériau. Dans ces conditions, la mesure de la diffusivité thermique par cette méthode souffre d'une sérieuse limitation d'ordre expérimental. S'il existe une résistance de contact entre les thermocouples et le matériau, alors la diffusivité thermique obtenue est sans doute une sous-estimation de la diffusivité thermique du matériau. Cet effet semble toutefois faible pour les verres car leur conductivité thermique est faible, donc le paramètre H est également faible. Pour des matériaux plus conducteurs, comme le quartz et l'olivine, (H grand), cet effet peut devenir prépondérant.

#### 3.4.1.4 Conclusion

Les problèmes de résistance de contact et la dépendance de la diffusivité mesurée à la période qui en résulte limitent l'utilisation de cette méthode. Par ailleurs, l'utilisation de cette configuration à haute température est délicate pour plusieurs raisons (Kanamori et al., 1969). Les pertes par rayonnement sur la face supérieure ne sont alors plus négligeables, car elles augmentent comme  $T^3$ . L'hypothèse de flux nul, valable à basse température, est donc très approximative à haute température. Par ailleurs, le contact thermocouple-matériau devient difficile à maintenir à cause de la déstabilisation de la laque d'argent. La majorité des études sont limitées à environ 800°C (Kanamori et al., 1968; Kobayashi, 1974; Osako et Ito, 1991). Cette géométrie a donc été abandonnée au profit de la suivante.

### 3.4.2 Géométrie linéaire semi-infinie (haute température)

#### 3.4.2.1 Principe

L'échantillon est maintenant considéré comme infiniment long dans la direction  $x$ , dans le sens où une variation de température en  $x=0$  ne modifie pas la température à l'autre extrémité de l'échantillon. Le barreau a une longueur totale  $l'$  et la température est mesurée en  $x=0$  et  $x=l$ , avec  $l \ll l'$ . Devant l'impossibilité de percer un trou de diamètre proche à celui du thermocouple (ici égal à 0.13mm) dans l'échantillon à  $x=l$ , ce dernier est coupé en deux morceaux (en  $x=l$ ) dont les faces basales sont polies et deux rainures d'environ 0.2 mm de

profondeur sont creusées sur une des deux faces de chaque morceau afin de placer les thermocouples à  $x=0$  et  $x=l$ . L'assemblage est collé (par une solution de sodium silicaté) et comprimé dans la direction axiale par des pistons d'alumine (5 à 20 MPa de contrainte) afin d'assurer un bon contact entre les thermocouples et la roche (fig. 3.11). En  $x=l'$ , la température est considérée comme constante, car l'échantillon est en contact avec un piston d'alumine. En effet, le diamètre du piston est de 15 mm tandis que celui de l'échantillon n'excède pas 10 mm et la conductivité de l'alumine est très élevée (voir ci-après) : l'énergie présente en  $x=l'$  est donc rapidement dissipée par ce milieu plus conducteur. Par ailleurs, la période du signal est choisie de sorte que l'onde soit fortement atténuée en  $x=l'$ . La condition d'atténuation sera décrite par la suite.

Pour un tel système, l'équation de la chaleur se résout de façon similaire à celle de la méthode précédente, mais toutefois, la deuxième condition aux limites s'écrit :

$$T(x=\infty)=T(x=l)=T_0 \quad (3.32)$$

La réponse attendue en  $x=l$  est alors

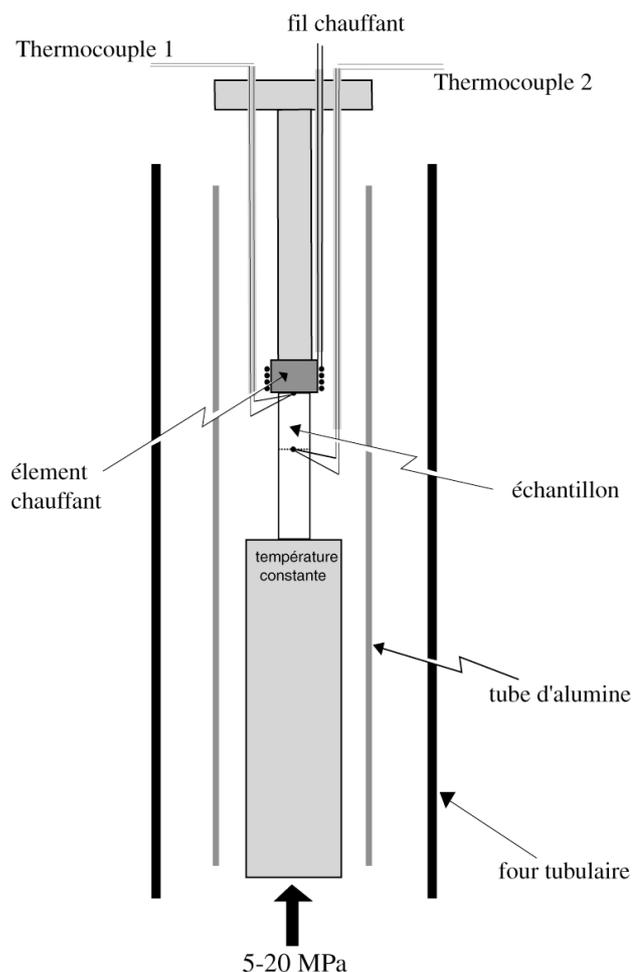
$$T_i=A_0 \exp(-q_0 x)+A \exp(-q_1 x) \times \cos(\omega t - q_2 x) \quad (3.33)$$

Avec  $q_1$  et  $q_2$  ayant la même forme que dans les relations (3.29).

La détermination de l'atténuation et de la différence de phase conduit à la diffusivité thermique  $D$  et à la constante radiative  $\nu$  en utilisant les mêmes relations que pour la méthode linéaire finie.

### 3.4.2.2 Dispositif expérimental

Afin de pouvoir réaliser des mesures en garantissant un bon contact entre les thermocouples et l'échantillon et un bon contact entre les deux parties du barreau, le montage est inséré dans un appareil de fluage à pression atmosphérique (Darot and Gueguen, 1981 ; Montardi, 1987). Cet appareil permet d'appliquer une contrainte axiale de quelques MPa et est muni d'un four tubulaire en carbure de silicium pouvant atteindre 1500°C. L'élément générant l'onde thermique est un barreau de nickel enrobé de ciment d'alumine servant d'isolant électrique autour duquel un fil de NiChrome de 0.5 mm de diamètre est enroulé. Les thermocouples sont de type K-non isolés de 0.13 mm de diamètre. Le TC1 est isolé du barreau de nickel par un feuillet de mica. Le montage est étanche et permet de travailler sous atmosphère contrôlée. La figure 3.11 présente le montage complet et la photo montre un échantillon avant la mesure.



*Figure 3.11 : montage de la méthode Angström linéaire dans l'appareil de déformation et photo de l'échantillon en position de mesure.*

Le contrôle de la température est rendu difficile par le tube chauffant dont la résistance varie fortement avec la température. La tension aux bornes du tube est ajustée à l'aide d'un rhéostat. A haute température, des instabilités de 1 à 2°C avec des périodes d'environ 1 à 5 minutes sont systématiquement observées. Elles viennent se superposer aux oscillations de quelques dizaines de secondes nécessaires pour les mesures. Ces instabilités contrarient fortement les calculs et une routine permettant de les corriger est utilisée dans le programme de traitement de données (voir plus bas). Le gradient thermique dans le four a été mesuré. Il varie de 1 à 5 degrés sur la longueur de l'échantillon  $l$ .

### 3.4.2.3 Acquisition et traitement des données.

L'acquisition des données est réalisée par l'intermédiaire d'une carte d'acquisition National Instrument associée à un programme développé sous le logiciel Labview. Ce programme contrôle la tension et la période aux bornes du fil chauffant. La carte ne débitant que de très faibles courants, la puissance est amplifiée par un amplificateur de type HIFI ou un amplificateur continu (30V-2A), dépendant de la nature du signal (alternatif ou continu). Une porteuse de 50Hz ou un signal continu peuvent être générés et modulés par la carte à la période voulue. Un courant continu est préféré car il permet de limiter l'induction électromagnétique du fil chauffant alors assimilable à une bobine. La puissance consommée par le fil chauffant est comprise entre 1 et 5W. Il permet de générer des ondes dont la période est au minimum de 20s et dont l'amplitude peut atteindre 1 à 2°C. Les tensions aux bornes des

deux thermocouples sont enregistrées sans amplification ni filtrage avec une fréquence de 2Hz. Les températures sont déduites à partir des tables de calibration et de la température ambiante (jonction froide). À température ambiante, et jusqu'à 900°C environ, le niveau de bruit est inférieur à 0.005°C.

Le programme de traitement de données (fig. 3.12) permet d'analyser les signaux enregistrés par les deux thermocouples par transformée de Fourier rapide complexe (FFT) appliquée sur quelques périodes (de 4 à 6 périodes en général). Son principe est le même que le celui du programme développé pour le perméamètre de précision mis en place au laboratoire de Tectonophysique (Larive, 2002)

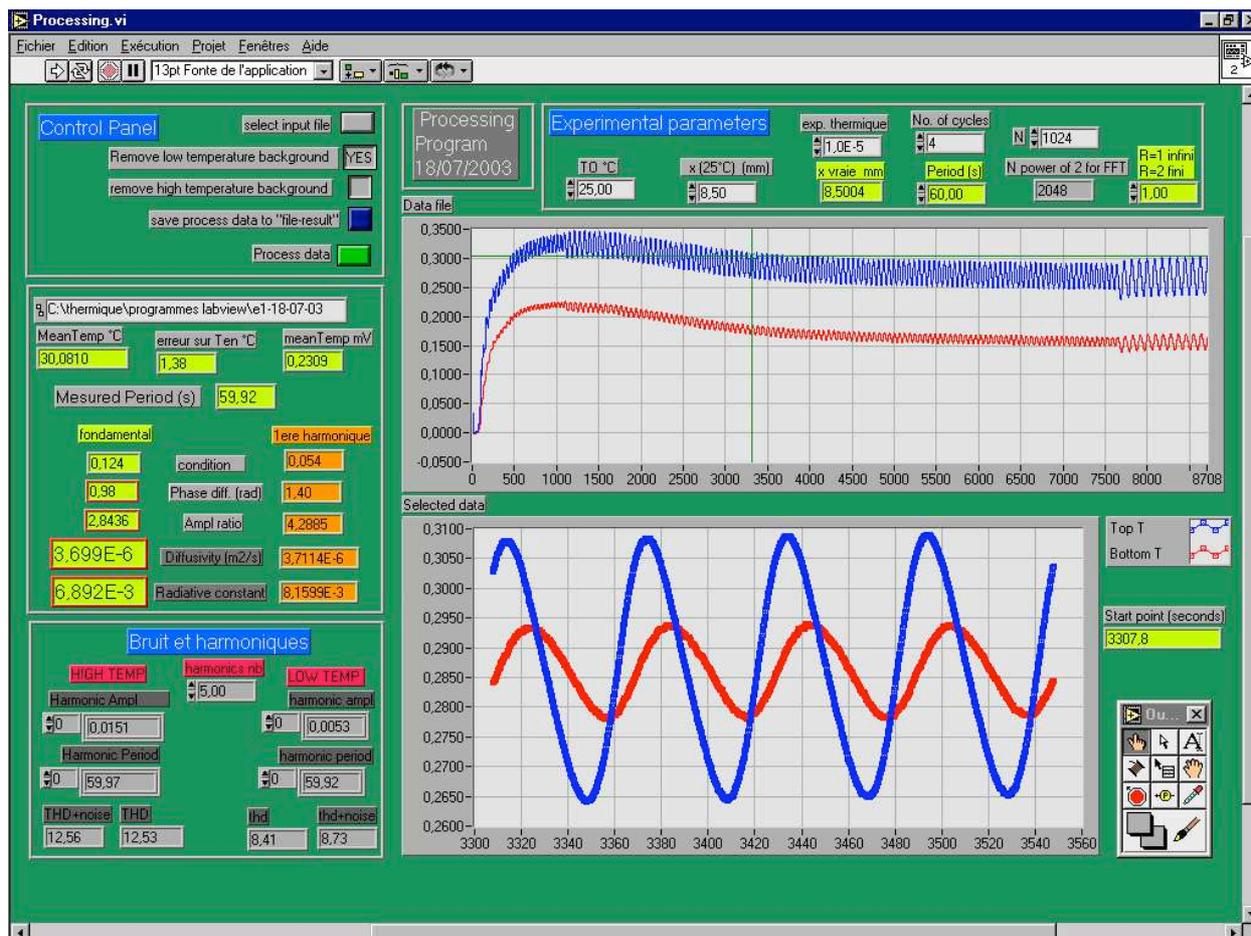


Figure 3.12 : face avant du programme de traitement de données développé sous Labview et exemple de traitement de données pour une quartzite sous condition ambiante.

Préalablement, le signal des thermocouples est découpé en  $2^n$  points par interpolation linéaire des points mesurés. La composante fondamentale et les  $n$  harmoniques sont alors caractérisées par une phase et une amplitude. La distorsion du signal est alors calculable : elle correspond à la proportion (en %) de l'énergie d'un nombre choisi d'harmoniques par rapport à la fréquence fondamentale (distorsion harmonique totale). Le système de chauffage présenté conduit à un signal au TC1 où les première et deuxième harmoniques contribuent pour environ 10 à 15% au signal total. Le reste des harmoniques (constituant alors le bruit) contribuent pour 0 à 2% suivant le niveau de bruit. Dans ces conditions, la diffusivité thermique est simultanément calculée pour la fondamentale (période  $T$ ) et la première harmonique ( $T/2$ ). Cependant, il peut être montré que la surimposition d'un autre signal au

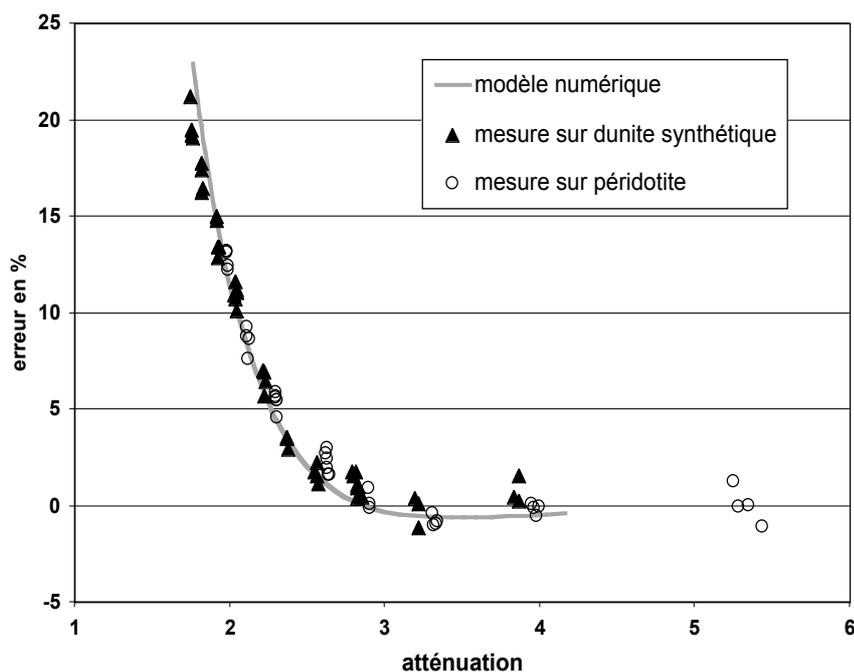
signal sinusoïdal, par exemple, une augmentation linéaire non contrôlée dans le temps de la température, contraire fortement l'application de la FFT et conduit à des résultats erronés et incohérents. Il a fallu donc prévoir, et ceci est l'originalité de ce programme de traitement de données, une correction de la dérive des oscillations lorsqu'un signal est surimposé au signal sinusoïdal du fil chauffant. Par conséquent, ce programme permet de réaliser des mesures lorsque l'échantillon n'est pas en équilibre thermique avec le milieu ambiant (sa température augmente ou décroît tandis qu'il subit les oscillations thermiques). Cela permet de réaliser des mesures en continu dans le temps et d'avoir une grande quantité de point de mesures en fonction de la température. C'est un point important pour l'étude des transitions de phase (voir ci-après).

#### 3.4.2.4 Validité des mesures et effet de la période

La variation de la diffusivité thermique avec la période n'est a priori pas l'expression d'une propriété intrinsèque du matériau. Elle est souvent à relier à des problèmes de contact entre les thermocouples et l'échantillon. L'effet de la période a été ici testé sur des dunites de longueur  $(l, l')$  avec  $l' = 3.l$  afin de satisfaire la conditions  $T(l') = \text{constante} = T_0$ . L'augmentation de la période du signal s'accompagne d'une augmentation de la diffusivité thermique, de façon analogue à ce qui était observé dans la méthode précédente. Cependant, une stabilisation de la diffusivité thermique est observée pour des faibles périodes. Une faible période, donc une forte atténuation, conduirait donc à des résultats reproductibles et ne variant pas avec la période. Or, la condition aux limites en  $x=l'$  est d'autant plus justifiée que l'atténuation est grande tandis qu'elle est remise en cause par de faibles atténuations. Elle serait dans ce cas la cause de ces variations avec la période.

Cet effet de la condition aux limites est évalué par un modèle numérique en différences finies uni-dimensionnel, qui modélise exactement les conditions de l'expérience. Dans ce modèle, le champ de température est calculé au premier ordre (Annexe 1). La taille des éléments est fixée à 0.1mm et le pas de temps est optimisé pour obtenir un temps minimum de calcul, tout en respectant la condition de convergence du calcul explicite. Le modèle est calibré par le calcul analytique présenté précédemment. Comme dans les expériences précédentes, la température est calculée en  $x=l$  et  $l' = 3l$  et  $T(l') = \text{constante} = T_0$ . Un couple  $D, \nu$  est choisi et le modèle fait varier systématiquement la période et pour chaque période, la diffusivité thermique est calculée, en utilisant le programme développé sous Labview. L'écart entre la diffusivité calculée et celle imposée est alors évalué. Lorsque les variations de diffusivité thermique avec la période sont présentées en fonction de l'atténuation, un très bon accord est trouvé avec les mesures expérimentales (Fig. 3.13). Cet accord suggère que pour cette méthode, les variations avec la fréquence sont dues au non-respect des conditions aux limites "idéales", e.g.,  $T(x=\infty) = T(x=l) = T_0$ , dans les expériences.

Pour une longueur d'échantillon donnée, on peut donc déduire à partir de quelle valeur d'atténuation la mesure est représentative du comportement intrinsèque de l'échantillon. Pour  $l' = 3.l$ , il faut utiliser des atténuations de l'ordre de 2.7 au minimum pour avoir une erreur inférieure à 1%. Cette atténuation est obtenue en faisant varier la période du signal. Expérimentalement, des atténuations de 2.7 sont largement mesurables, et pour les roches, la géométrie choisie sera toujours telle que  $l' = 3.l$ . Pour des cristaux, pour lesquels les contraintes géométriques sont plus complexes, le modèle pourra être utilisé pour déterminer la période maximale à utiliser. Enfin, si la condition sur l'atténuation est respectée, la variation de diffusivité avec la période reste faible, ce qui suggère que les effets de résistance de contact entre l'échantillon et les thermocouples sont faibles.



*Figure 3.13 : erreur commise sur la mesure de la diffusivité thermique en fonction de l'atténuation. En accord avec le modèle numérique, les mesures montrent que la condition aux limites n'est plus respectée pour de faibles atténuations.*

### 3.4.2.5 Précision de l'appareil

La configuration actuelle permet de mesurer des échantillons dont  $l$  est compris entre 3mm et 10 mm ( $l'$  est varié alors de 9 à 30mm pour  $l'=3.l$ ), tout en respectant la condition d'atténuation ( $a > 2,7$ ), sachant que pour des échantillons courts, les périodes utilisées devront être très courtes. Des échantillons cylindriques ou parallélépipédiques de diamètre compris entre 3mm et 10mm sont mesurables. L'effet de la discontinuité liée au collage des deux parties de l'échantillon sera évalué par des mesures de calibration sur des standards. Cette configuration permet des mesures aisées sur des roches. La mesure sur monocristaux nécessite une forme régulière difficile à obtenir.

Comme dans la méthode de Seipold (1988) (1), la distance entre les deux thermocouples n'est pas exactement connue. L'incertitude est estimée à environ 0.1mm par thermocouple, soit 0.2 mm. Pour  $l=5mm$ , l'erreur résultante sur la diffusivité est de 8%. La précision interne liée à l'acquisition de données (bruit électronique), au traitement mathématique (correction de la dérive en température) est estimée en réalisant plusieurs mesures à la même température. Dans les conditions ambiantes (température très stable), l'erreur résultante est inférieure à 2%. Au delà de 900°C, le bruit électronique pose problème et la reproductibilité est de l'ordre de 5%. Cette erreur varie avec la période : en effet, de longues périodes s'accompagnent de grandes amplitudes, donc d'un rapport signal/bruit élevé, et donc à une meilleure précision. De courtes périodes, utilisées pour des échantillons courts ou de diffusivités thermiques élevées, conduisent à une erreur plus élevée.

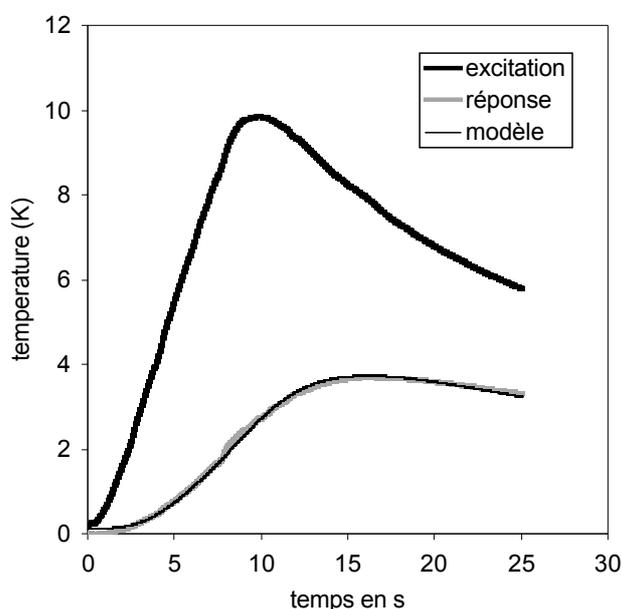
La température de l'échantillon est mesurée par les thermocouples TC1 et TC2. Une différence est toujours observée en ces deux mesures. Elles sont dues au gradient du four et également à la diffusion thermique du signal fourni par l'élément chauffant. La température de l'échantillon est prise comme la moyenne des deux températures et l'incertitude n'excède jamais 5°C. Une calibration de la mesure de la température sera faite en utilisant la transition  $\alpha$ - $\beta$  du quartz.

L'effet des pertes sur les surfaces latérales n'a pas été estimé. En effet, ces pertes supposées rayonnantes et proportionnelles à l'écart de température entre l'échantillon et son

environnement, peuvent avoir une composante convective. Dans ce cas, les pertes ne varient plus linéairement avec la température (Carslaw et Jaeger, 1959). Cependant, dans le cas de faible différences de température ( $<2-5^{\circ}\text{C}$  dans nos expériences), ces pertes seront supposées linéaires.

### 3.4.2.6 Utilisation en régime transitoire

La méthode peut se convertir en une méthode transitoire en remplaçant l'excitation sinusoïdale par un signal thermique de forme quelconque, typiquement en appliquant aux bornes du fil chauffant une tension constante durant quelques secondes, de manière analogue aux méthodes transitoires présentées précédemment. La diffusivité thermique et les pertes latérales sont alors calculées à l'aide du modèle numérique présenté plus haut. La température



*Figure 3.13 bis : exemple d'utilisation en régime transitoire sur un verre. La diffusivité thermique calculée est de  $0.77 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  et le coefficient de pertes  $\nu$  est de 0.04.*

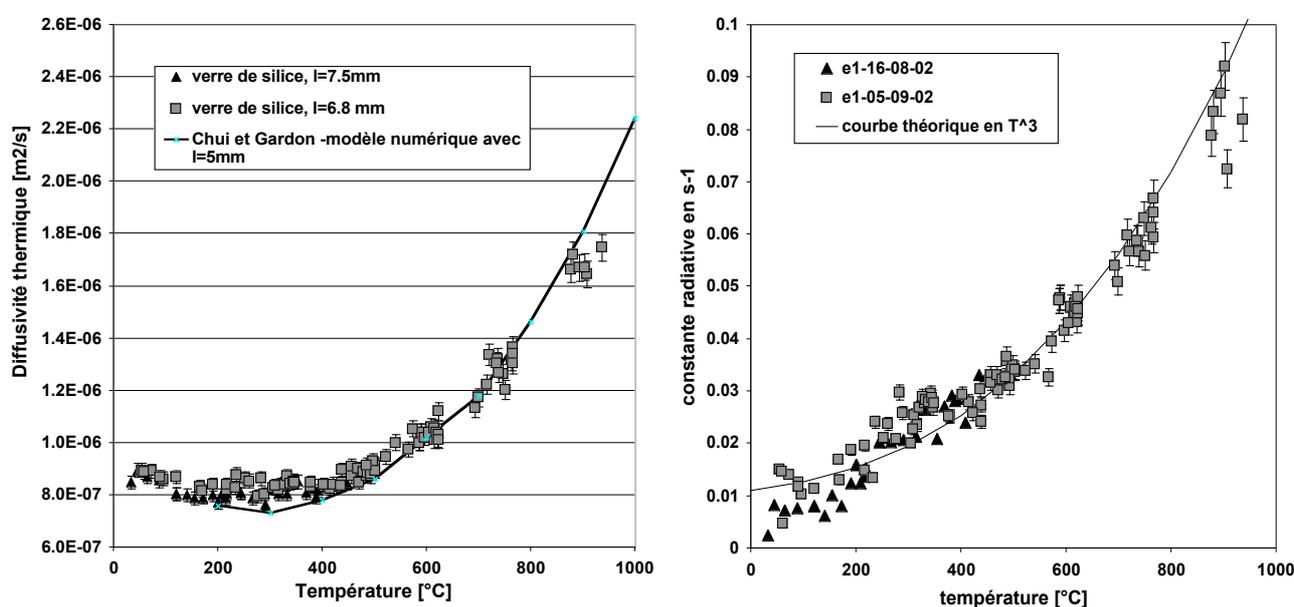
mesurée au TC1 sert de conditions aux limites en  $x=0$ . La diffusivité thermique et les pertes sont ajustées afin d'obtenir un bon accord entre la température modélisée en  $x=l$  et celle mesurée au TC2. Des essais à température ambiante sur des verres et sur une dunite ont été réalisés et s'accordent avec les paramètres mesurés avec la méthode Angström. L'intérêt de cette méthode est cependant limité car elle nécessite un bon équilibre thermique de l'échantillon, ce qui est difficile à réaliser dans le cas d'un four au carbure de silicium. Elle ne permet pas un enregistrement en continu de la variation de la diffusivité thermique en fonction de la température. Il a donc été décidé d'abandonner cette méthode et de ne pas optimiser le modèle numérique.

### 3.4.3 Calibration de la méthode : étude du verre de silice, du quartz, et de l'alumine.

La calibration de la méthode a été réalisée sur des verres et du quartz, car ces matériaux sont généralement pris comme standards en Sciences de la Terre (Beck et al., 1978; Clauser et Huenges, 1995). De plus, les résultats seront comparés à ceux obtenues par la méthode 2. L'alumine est également très étudiée (Benigni et Rogez, 1997; Khedari et al., 1995). Ces expériences de calibration ont permis également d'étudier les propriétés des matériaux utilisés.

### 3.4.3.1 Rayonnement thermique dans les verres

Pour les verres, les effets liés à la taille des échantillons (diamètre, longueur) ont été systématiquement testés. Les mesures (Fig. 3.15) ne mettent en évidence aucune variation significative des valeurs absolues, comme dans la méthode Angström modifiée. La reproductibilité des mesures (d'un assemblage à un autre) s'inscrit les barres d'erreurs définies précédemment (de l'ordre de 3%). Elle suggère aussi que l'erreur de 0.2 mm sur la position des thermocouples est quelque peu sur-estimée (car elle induirait 8% d'erreur pour  $l=5\text{mm}$ ). Par ailleurs, ces résultats sont en très bon accord avec les données de la littérature et du fournisseur (Heraeus QuartzGlass). Ceci montre notamment que la discontinuité liée au collage des deux parties de l'échantillon n'induit pas d'erreur significative. Une pression de quelques MPa suffit en effet à assurer un bon contact thermique, ce qui était aux vues des études à haute pression (Seipold, 2001). La colle permet aussi d'éviter toute présence d'air à l'interface et assure la continuité thermique.

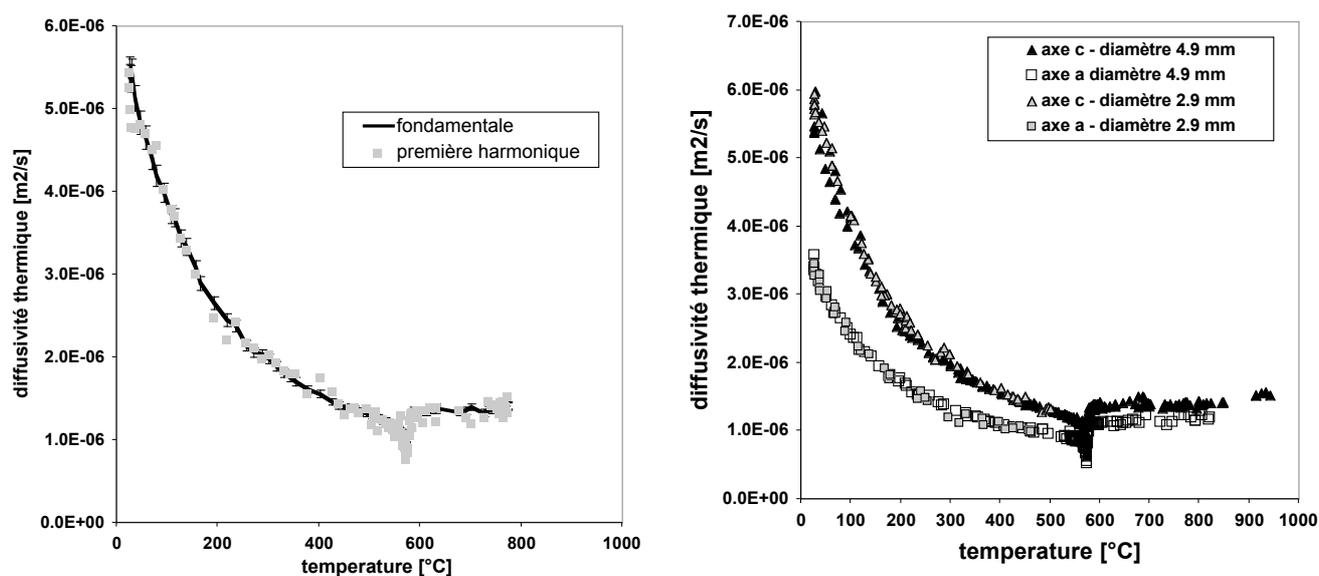


**Figure 3.15 :** Diffusivité thermique (à gauche) et coefficient de pertes par rayonnement (à droite) d'un verre de silice (longueur 6.7 mm et diamètre 4.9 mm). La diffusivité thermique est comparée aux modèles théoriques de Chui et Gardon (1969) pour des verres ( $l=5\text{ mm}$ ). Les pertes suivent bien une loi en  $T^3$ , ce qui prouve qu'elles sont surtout dues au rayonnement.

Pour tous les échantillons de verre de silice, une faible diminution de la diffusivité est observée jusqu'à environ  $300^\circ\text{C}$ , puis une forte augmentation est mesurée. La diminution de la diffusivité est due aux processus liés aux phonons, tandis que l'augmentation est due au transfert radiatif. La comparaison du transfert radiatif mesuré ici avec celui évalué théoriquement (Chui et Gardon, 1969) montre que la méthode permet de mesurer de manière effective la contribution du rayonnement. La période des oscillations d'environ 60-80s et les faibles amplitudes utilisées ( $1^\circ\text{C}$  environ au TC1 et moins de  $0.4^\circ\text{C}$  au TC2) permettent de ne pas modifier significativement l'équilibre radiatif. De toutes les méthodes présentées précédemment, cette méthode est celle qui respecte au mieux cet équilibre. Enfin, la détermination du coefficient de pertes  $\nu$  montre une augmentation avec la température, qui suit une loi en  $T^3$ , comme prédit par l'équation (3.4). Le rayonnement est donc la source principale de pertes sur les surfaces latérales.

### 3.4.3.2 Transition $\alpha$ - $\beta$ du quartz

Des mesures sur des monocristaux de quartz synthétiques orientés parallèlement et perpendiculairement à l'axe c du quartz, et de diamètre de 2.9 et 4.9 mm, ont été réalisées dans les conditions  $l'=3.l$ . Les mesures montrent que la diffusivité thermique ne dépend pas du diamètre de l'échantillon ni de sa longueur (Fig. 3.16). Le calcul de la diffusivité thermique utilisant la première harmonique est en très bon accord avec celui utilisant la fondamentale (Fig. 3.16), ce qui montre une faible dépendance avec la période. Le bon accord observé entre différentes séries de mesures sur le même échantillon donne une idée de la fiabilité de la méthode. Enfin, ces mesures sont en très bon accord avec les mesures effectuées par la méthode 2 (Höfer et Schilling, 2002) (fig. 3.17) et par Beck et al. (1978).

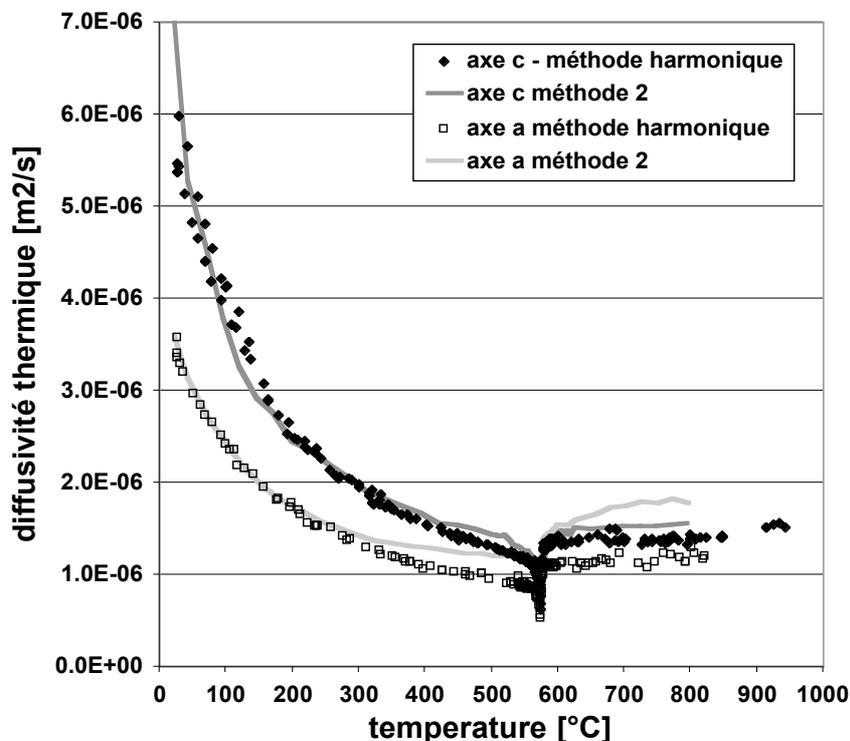


**Figure 3.16 :** Vérification expérimentale du calcul de la diffusivité thermique par la FFT sur une mesure de l'axe c du quartz (à gauche) : le calcul utilisant le mode fondamental et la première harmonique sont en très bon accord, ce qui montre qu'il n'y a pas d'effet de la période. Le diamètre de l'échantillon (à droite) n'a pas non plus d'effet sur la mesure, ce qui montre notamment que les pertes latérales, qui dépendent de ce diamètre, sont bien prises en compte dans le traitement de données.

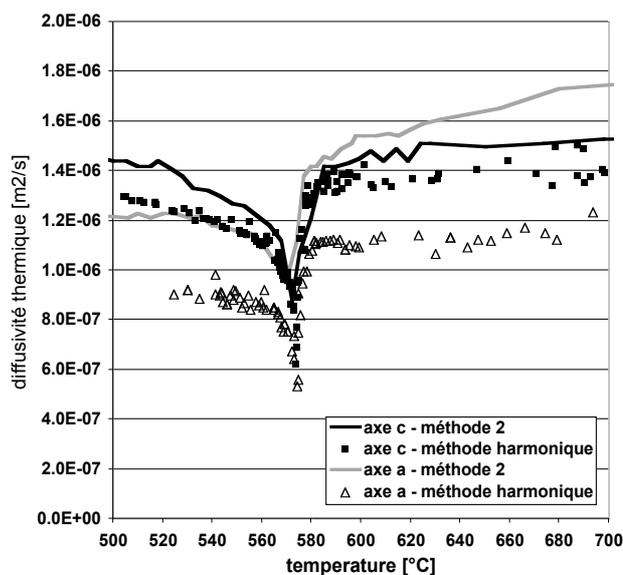
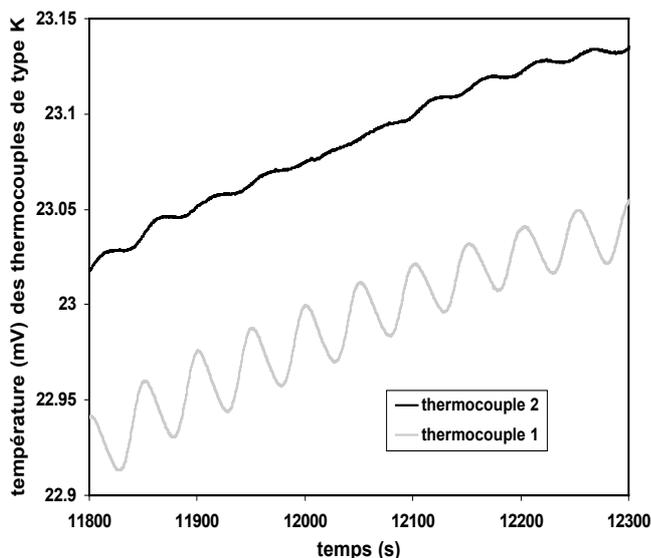
La transition de phase a été examinée avec précision en faisant varier faiblement la température à entre 550 et 600°C (fig. 3.18). La possibilité de calculer la diffusivité thermique lorsque l'échantillon n'est pas en équilibre a permis de suivre de façon continue l'évolution de la diffusivité autour de la transition de phase (fig. 3.18). La transition est marquée par une atténuation complète du signal, suggérant que l'énergie fournie par le fil chauffant est consommée pendant la transition. Elle a été observée de façon reproductible à la température de 573°C avec une incertitude d'environ 1°C (à cause du gradient présent entre le TC1 et le TC2), ce qui calibre la mesure de la température du système, car elle est en bon accord avec la température prédite pour la transition  $\alpha$ - $\beta$  du quartz à pression ambiante. Pour la direction [001], l'accord entre ces mesures et celles obtenues avec la méthode 2 est très bon avant et après la transition. Par contre, une forte différence est observée pour la direction perpendiculaire à [001], surtout après la transition. Cette différence fondamentale pourrait être due à une importante fracturation de l'échantillon, résultant de l'application d'une trop forte contrainte dans cette expérience. Ne disposant que d'un seul échantillon dans cette direction, l'inversion de l'anisotropie, suggérée par les mesures de la méthode 2, n'a pu être confirmée.

Enfin, la transition de phase correspond à une forte diminution de la diffusivité thermique qui est alors proche de la diffusivité thermique d'un verre à la température de la transition (8

$\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  à  $573^\circ\text{C}$ ) (fig. 3.15). A la transition de phase, le quartz se comporte comme un verre du point de vue du transport de chaleur par les phonons. L'état de désorganisation du système cristallin du quartz à la transition rejoint donc celui d'un verre. La désorganisation, qu'elle soit thermique (vibrations des atomes, à proximité du point de fusion par exemple) ou structurale (transition de phase), s'accompagne donc d'un minimum de diffusivité thermique.



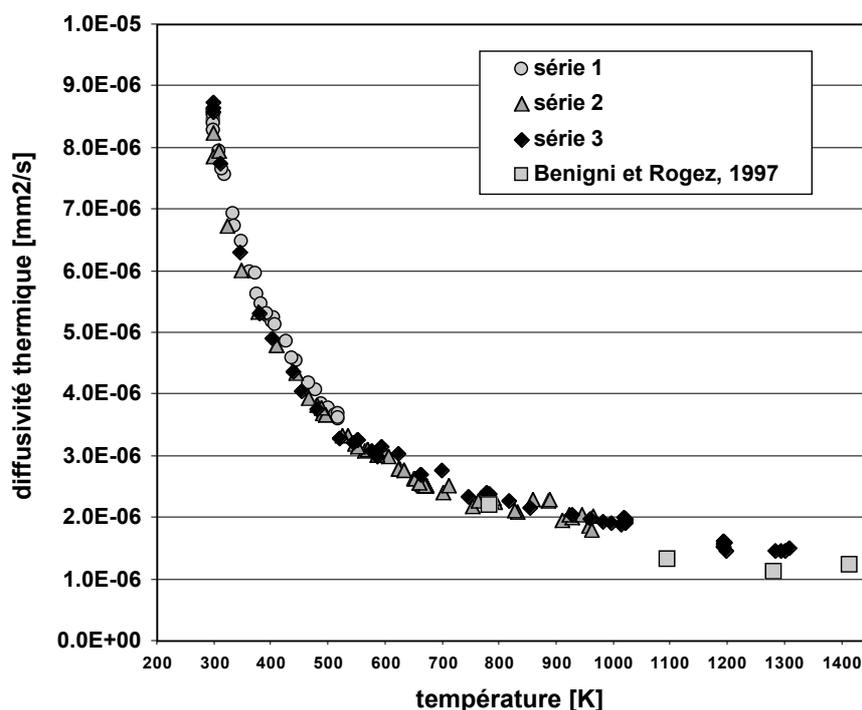
**Figure 3.17 :** Diffusivité thermique du quartz  $\alpha$  et  $\beta$  selon les axes  $a$  et  $c$  jusqu'à  $950^\circ\text{C}$ . Chaque courbe comprend 3 cycles de montée-descente en température et montre donc la bonne reproductibilité des résultats. Les mesures par la méthode harmonique (Montpellier) sont comparées avec celles obtenues à Potsdam avec la méthode 2 (Höfer et Schilling (2002))



**Figure 3.18 :** A gauche, signaux enregistrés par les 2 thermocouples lors de la transition de phase. L'onde thermique (TC2) est totalement atténuée lors de la transition de phase, alors que l'onde incidente est constante (TC1). A droite, zoom sur la transition de phase et comparaison avec la méthode 2 (Hoefer et Schilling (2002)).

### 3.4.3.3 Alumine

La calibration de la méthode par des mesures sur l'alumine est intéressante car la diffusivité thermique de l'alumine est très élevée à température ambiante. Ces mesures permettent donc de tester plus précisément les problèmes de résistance de contact entre les thermocouples et l'échantillon. Or les mesures à température ambiante sont en bon accord avec les valeurs standard (Clauser and Huenges, 1995), ce qui indique un bon contact thermique. Les mesures à haute température ( $>1000^{\circ}\text{C}$ ) sont aussi en bon accord avec celles de Benigni (1997), ce qui valide aussi le système à très haute température. La reproductibilité des mesures observées sur 3 séries successives est élevée (fig 3.19). L'absence apparente de contribution radiative est également à noter et est en accord avec les mesures sur des agrégats polycristallins d'alumine (Kingery, 1962).



*Figure 3.19 : mesure de la diffusivité thermique d'un échantillon polycristallin d'alumine lors de 3 séries de montée-descente en température.*

### 3.4.3.4 Conclusion

La méthode développée permet de réaliser des mesures sur roches et monocristaux à haute température tout en minimisant le déséquilibre thermique. Les amplitudes du signal thermique utilisé en entrée (de l'ordre du  $1^{\circ}\text{C}$ ) sont plus faibles que les deux précédentes méthodes et que la majorité des méthodes usuelles. Ceci va permettre d'évaluer la présence ou non de transfert radiatif dans les monocristaux et agrégats d'olivine. Comme les deux méthodes précédentes, elle n'est toutefois opérationnelle qu'à haute température et pression ambiante.

Néanmoins, le principe de la méthode peut être étendu à haute pression et haute température, en utilisant une géométrie cylindrique (e.g., Kanamori et al., 1969; Katsura, 1995). Un dispositif a pour cela été mis en place dans la presse Paterson du laboratoire de Tectonophysique.

### 3.5 Méthode (4) Angström en géométrie cylindrique (Laboratoire de Tectonophysique-Montpellier)

#### 3.5.1 Intérêt

Le développement des méthodes à haute pression/haute température a pour but d'éviter la microfracturation, toujours présente à pression ambiante, mais aussi de connaître les dérivées en pression et éventuellement les dérivées croisées (pression-température). Dans les conditions du manteau supérieur, si les dérivées en pression sont assez bien contraintes par des calculs théoriques et des mesures directes (e.g., Katsura, 1995), l'effet de la température est toujours mal connu. La méthode présentée ici, *devrait* permettre d'évaluer l'effet de la température jusqu'à 1000-1200°C, sous une pression suffisante pour éviter la microfracturation. Le principe général de la méthode n'est que brièvement exposé dans la suite, sachant que la méthode est en cours de développement.

#### 3.5.2 Principe

Une variation sinusoïdale de la température est imposée sur les faces latérales d'un échantillon cylindrique de rayon  $R$ , supposé infiniment long dans la direction axiale.

$$T(r = R, t) = A_0 + A_1 \cdot \cos(\omega \cdot t) \quad (3.34)$$

Par ailleurs, le flux de chaleur est supposé nul à l'axe du cylindre :

$$\left( \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=0} = 0 \quad (3.35)$$

La température à une distance  $r$  de l'axe du cylindre a alors pour expression (e.g., Khedari et al., 1995):

$$T(r, t) = A_1 \frac{J_0(e \cdot r \cdot i^{3/2})}{J_0(e \cdot R \cdot i^{3/2})} \cdot \exp(i\omega t) \quad (3.36)$$

où  $e = \sqrt{\frac{\omega}{D}}$  et  $J_0$  est la fonction de Bessel d'ordre 0.

En utilisant la relation :

$$J_0(x \cdot i^{3/2}) = ber(z) + i \cdot bei(z) \quad (3.37)$$

avec  $ber(z) = \sum_0^{n=\infty} \frac{(-1)^n}{((2n)!)^2} \left(\frac{z}{2}\right)^{4n}$  et  $bei(z) = \sum_0^{n=\infty} \frac{(-1)^n}{((2n+1)!)^2} \left(\frac{z}{2}\right)^{4n+2}$  (e.g., Carslaw and Jaeger, 1959),

le rapport des amplitudes entre  $r=R$  et  $r$  devient :

$$att = \frac{(ber^2(e \cdot r) + bei^2(e \cdot r))^{1/2}}{(ber^2(e \cdot R) + bei^2(e \cdot R))^{1/2}} \quad (3.38)$$

et le déphasage devient :

$$\Delta\Phi = \tan^{-1} \left( \frac{(ber(e.r).bei(e.R) - bei(e.r).ber(e.R))}{(ber(e.r).bei(e.R) + bei(e.r).ber(e.R))} \right) \quad (3.39)$$

Si la température est mesurée en deux points distants de  $r=r_1$  et  $R=r_2$  de l'axe, le déphasage *ou* le rapport d'amplitude des températures mesurées permettent de calculer la diffusivité thermique. Si la température est mesurée au centre ( $r=0$ ), alors :

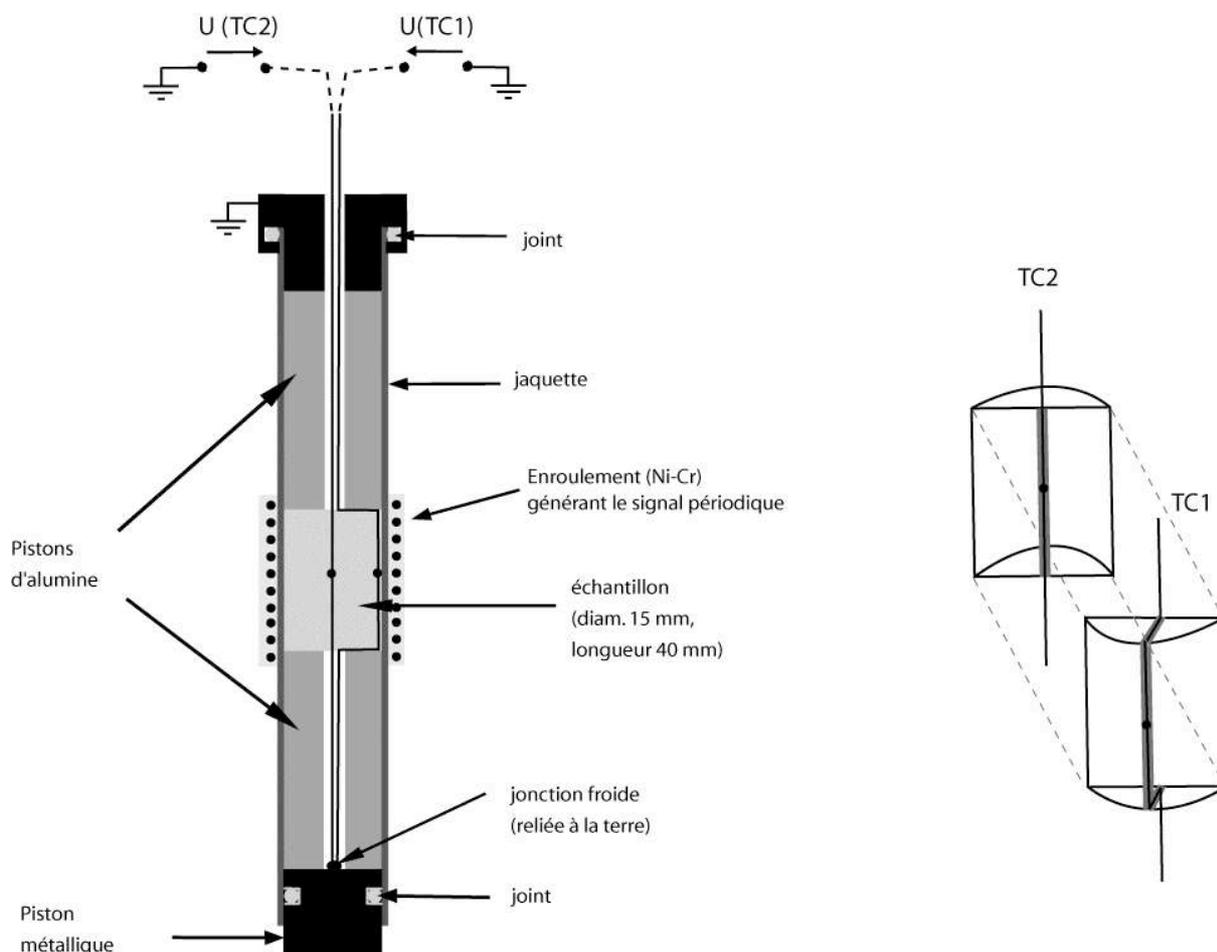
$$att = \frac{1}{(ber^2(e.R) + bei^2(e.R))^{1/2}} \quad et \quad \Delta\Phi = \tan^{-1} \left( \frac{bei(e.R)}{ber(e.R)} \right) \quad (3.40)$$

Dans le dispositif expérimental proposé, la température sera mesurée à l'axe de l'échantillon ( $r=0$ ) et à l'extérieur ( $r=R$ ). Pour évaluer la diffusivité thermique, celle-ci est ajustée numériquement sous le logiciel Labwiev de façon à obtenir le déphasage ou l'atténuation mesurée (solution unique car ces derniers sont des fonctions monotones de la diffusivité thermique).

### 3.5.3 Montage dans la presse Paterson

La presse Paterson est une presse à milieu de confinement gazeux (argon) (pour les détails concernant la presse Paterson, se reporter à Seront (1993), par exemple). Elle est utilisée essentiellement pour déformer des échantillons polycristallins à haute pression/haute température, mais des dispositifs de mesures physiques peuvent y être adaptés. C'est le cas pour cette étude. L'avantage que présente ce type de presse est d'une part la pression parfaitement hydrostatique qu'elle assure et d'autre part la possibilité d'utiliser des échantillons de diamètres élevés (15 mm au maximum). Son utilisation dans le cadre de mesures physiques pose surtout des problèmes pour les connexions électriques.

Pour cette étude, la jaquette (en acier ou cuivre) est enrobée de ciment d'alumine autour duquel le fil chauffant de Nichrome est enroulé et collé (fig. 3.20). L'échantillon a un diamètre de 15 mm et une longueur variant de 30 à 40 mm, ce qui est supposé suffisant pour pouvoir utiliser l'hypothèse d'un échantillon infiniment long (Katsura, 1993). Les thermocouples sont disposés dans l'échantillon selon la méthode proposée par Katsura (1993) afin de pouvoir minimiser la taille des thermocouples (ici 0.13mm) et éviter les résistances de contact. L'échantillon cylindrique est composé de deux demi-cylindres taillés suivant l'axe et deux rainures de 0.3 mm de profondeur sont taillées (fig. 3.20): une sur l'axe d'un demi-cylindre et l'autre sur la surface latérale. Les thermocouples sont collés dans ces deux rainures. La pression est supposée assurer un bon contact entre les deux demi-cylindres, dont les faces sont polies. L'assemblage est montré sur la figure 3.20. L'échantillon est comprimé axialement par deux pistons d'alumine de 8 mm de longueur chacun. La pression qui s'exerce sur les pistons (transmise par le piston métallique du bas) est la même que celle qui est appliquée sur la surface de la jaquette (le système est plongé totalement dans l'argon et l'étanchéité est assurée par des joints toriques).



**Figure 3.20 :** Mesure de la diffusivité thermique dans la presse Paterson. A gauche, disposition de l'échantillon et dispositifs de génération du signal périodique et de mesure de la température (noter que la jonction froide des thermocouples est reliée à la terre par l'intermédiaire de la jaquette et du piston inférieur). A droite, mise en évidence des deux demi-cylindres et de la disposition des thermocouples.

### 3.5.4 Premiers tests

Des mesures sur une dunite ont été réalisées à température ambiante et haute pression, jusqu'à 250 MPa (fig. 3.21). Le système de chauffage périodique est très efficace et permet d'atteindre des amplitudes de 1 à 3 °C au TC1 et de 0.5 à 1°C au TC2. Le rapport signal sur bruit est par conséquent excellent, d'autant plus que les thermocouples sont protégés par la jaquette conductrice reliée à la terre et que le bruit s'élève à quelques millièmes de degrés. Les mesures montrent cependant un comportement inattendu à basse pression (<50-100 MPa), contraire à la majorité des études antérieures qui prévoient une augmentation de la diffusivité thermique associée à la fermeture des microfractures. La diffusivité thermique calculée varie fortement avec la période et les calculs utilisant le rapport d'amplitude et le déphasage donnent des résultats différents (eq. 3.40). Conformément à la discussion du paragraphe 3.4 et

à l'étude de Benigni et Rogez (1997), la présence d'un mauvais contact thermique peut expliquer cela. Des zones mal comprimées où subsiste de l'air peuvent être présentes soit entre la jaquette et l'échantillon, soit entre les faces des deux demi-cylindres. Une jaquette, même en cuivre trempé, a une résistance mécanique trop élevée. Pour les études à basse pression (et basse température), une isolation de l'échantillon par une matière molle (gaine thermorétractable, ou colle au silicone comme dans la méthode 1) est préférable.

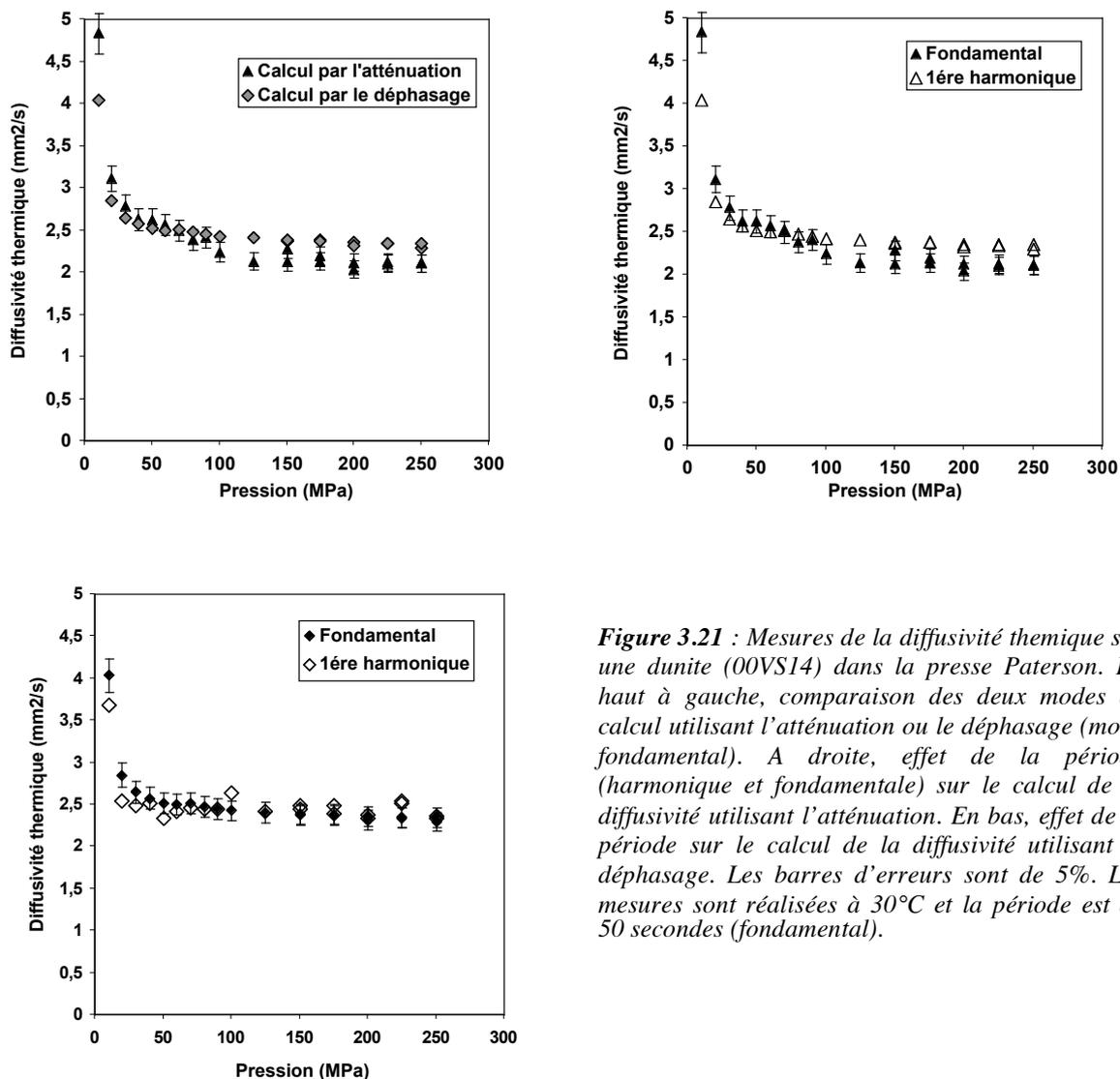


Figure 3.21 : Mesures de la diffusivité thermique sur une dunite (00VS14) dans la presse Paterson. En haut à gauche, comparaison des deux modes de calcul utilisant l'atténuation ou le déphasage (mode fondamental). A droite, effet de la période (harmonique et fondamentale) sur le calcul de la diffusivité utilisant l'atténuation. En bas, effet de la période sur le calcul de la diffusivité utilisant le déphasage. Les barres d'erreurs sont de 5%. Les mesures sont réalisées à 30°C et la période est de 50 secondes (fondamental).

A plus haute pression (>100 MPa), ces effets s'estompent et la diffusivité thermique varie très peu avec la pression. Elle dépend très peu de la période dans le cas du calcul utilisant le déphasage (différences inférieures à 5% - fig. 3.21). Les deux modes de calculs donnent des valeurs différentes d'environ 5% à 10%, ce qui est commun pour cette méthode (e.g., Benigni et Rogez, 1997). Cela prouve que la méthode est efficace si l'étude de la diffusion thermique à basse pression (notamment l'étude de la fermeture des microfractures à des pressions inférieures à 100 MPa) n'est pas envisagée, ce qui est le cas pour cette étude. La calibration de la méthode sur du pyroceram est envisagée, car ce matériau a été très étudié par une méthode similaire (Durham et al., 1987).

### 3.5.5 Evolution de la méthode

La méthode est très similaire à celle développée par (Mirkovich, 1977) et utilisée en Sciences de la Terre par Durham et al. (1988). En effet, un milieu de confinement gazeux permet d'assurer une pression hydrostatique et permet ne pas déformer l'échantillon. Un milieu de confinement solide peut modifier la géométrie cylindrique de l'échantillon et causer des erreurs systématiques (Fujisawa et al., 1968; Kanamori et al., 1969; Katsura, 1993 ; Seipold et Gutzeit, 1980; Staudacher, 1973). L'avantage de la méthode développée ici par rapport à celle de Mirkovich (1977) est qu'un four interne peut atteindre de hautes températures (1200°C au maximum contre 400°C pour Durham et al. (1988)), en assurant un gradient thermique faible. Le développement d'un nouveau four adapté aux mesures physiques (problèmes de connexions électriques) est en cours, mais n'a pas pu être réalisé dans le cadre de la thèse.

## 3.6 Conclusion

La combinaison de ces trois méthodes devrait donc permettre d'atteindre les objectifs suivants :

- la méthode 1 (Seipold, 1988), va permettre d'étudier les transferts de chaleur à l'échelle de la roche à haute température et à haute pression .
- la méthode 2 (Schilling, 1999), sera utilisée pour étudier les transferts thermiques à l'échelle du monocristal et de la roche. Elle est tout particulièrement bien adaptée à l'évaluation du transfert radiatif.
- La méthode Angström linéaire 3 permettra des mesures à haute température (jusqu'à 1000°C) sur des roches, avec un bon contrôle de la fugacité d'oxygène.

La méthode Angström cylindrique 4 sera utilisée à haute température et sous pression de confinement (200-300MPa) afin d'éviter la microfracturation liée à l'expansion thermique.



4 Anisotropie de la  
diffusivité thermique dans  
le manteau : expériences à  
haute température et à  
haute pression



## 4.1 Introduction

La déformation plastique dans le manteau conduit au développement d'orientations préférentielles de réseau (OPR) des minéraux d'olivine et des pyroxènes (e.g., Nicolas et Poirier, 1976). Elle conduit alors à une anisotropie des propriétés physiques à l'échelle de la roche. Une illustration de ce comportement anisotrope des matériaux mantelliques déformés est l'anisotropie de propagation des ondes acoustiques, qui est à l'origine du déphasage des ondes SKS enregistré par la grande majorité des stations sismiques du globe (Silver, 1996). D'un point de vue thermique, la combinaison de l'anisotropie de la diffusivité thermique des minéraux du manteau et du développement d'OPR devrait conduire, à l'échelle de la roche, à une anisotropie de la diffusivité thermique. L'influence des variations de diffusivité ou de conductivité thermique dans le calcul des géothermes ou dans les processus de convection suggère qu'une anisotropie des propriétés de transport thermiques des roches peut avoir des implications sur certains processus géodynamiques. Il est donc nécessaire, à partir des données sur monocristaux d'olivine et de fabriques cristallographiques typiques de celles qui sont rencontrées dans le manteau, d'évaluer comment s'effectue le transfert d'échelle du monocristal à la roche. En particulier :

- dans quelle mesure l'anisotropie du monocristal est conservée : effet de la force de fabrique?
- quelle est la relation entre la distribution spatiale de la diffusivité thermique et la déformation de la roche dont les marqueurs sont des paramètres microstructuraux tels que la foliation et la linéation.
- La température et la pression ont-elles un effet sur l'anisotropie de la diffusion thermique ?
- La microfracturation contribue-elle à l'anisotropie ?

La première partie de ce chapitre est constituée par l'article 'Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle' publié dans la revue *Nature*. Cet article expose, à partir de modèles numériques calculant les propriétés thermiques à l'échelle de la roche, et de mesures directes sur des roches mantelliques (par la méthode 1), dans quelle mesure une roche du manteau naturellement déformée a un comportement anisotrope du point de vue du transport de chaleur. Outre la présence d'une anisotropie significative, il y est montré que l'anisotropie se conserve à haute température, dans les conditions du manteau.

L'article 'Thermal diffusivity of upper mantle rocks : influence of temperature, pressure and the deformation fabric' publié dans le *Journal of Geophysical Research* (deuxième partie du chapitre) étend l'étude précédente par une étude à haute pression (méthode 1) et discute l'effet de la température sur la diffusivité thermique. Cette étude se propose également de compiler et discuter les résultats obtenus dans les études précédentes. Une comparaison entre les propriétés thermiques et acoustiques est également conduite afin de relier les propriétés anisotropes observées à grande échelle (vitesses sismiques) aux propriétés anisotropes de transport de chaleur.

Cette étude est fondée sur la mesure des OPRs des minéraux constitutifs des péridotites par la méthode EBSD. Un bref descriptif de la méthode et du dispositif EBSD utilisé à Montpellier est donné en annexe 2.

Les problèmes soulevés par cette étude seront discutés en conclusion. Ils ont amené la conduite d'une étude plus approfondie des propriétés de transport de chaleur dans les minéraux et roches du manteau (chapitres 5 et 6). En particulier, le rôle de la méthode de mesure sera documenté.

## 4.2 Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle.

### letters to nature

models and quantify its effects, we need to be able to predict the anisotropy of thermal diffusivity that will result from a given upper-mantle flow. Polycrystal plasticity models allow the simulation of the development of olivine lattice-preferred orientations in the upper mantle<sup>6-9</sup>. If the crystallographic orientations and the single-crystal tensor of an anisotropic physical property are known, we may estimate the three-dimensional distribution of this property in a polycrystalline aggregate by averaging the individual grain tensors<sup>10</sup>. Indeed, a strong correlation between olivine fabric and thermal diffusivity anisotropy was observed in a dunite at ambient conditions<sup>1</sup>. Temperature derivatives of the olivine thermal diffusivity tensor are nevertheless poorly constrained. Whereas thermal diffusivity data for olivine and pyroxene crystals showed a constant anisotropy independent of temperature<sup>1</sup>, more recent thermal conductivity determinations in olivine crystals<sup>5</sup> exhibited a decrease in anisotropy with increasing temperature, similar to that observed for quartz<sup>11</sup>. Moreover, this simple petrophysical model does not consider parameters that may influence heat transport at the sample and larger scales such as a variation in thermal diffusivity at grain boundaries. These effects as well as the relationship between crystallographic orientation and anisotropy may nevertheless be constrained by comparison between model predictions and thermal diffusivity measurements on real rock samples.

We have thus determined the three-dimensional thermal diffusivity of three mantle rocks by both petrophysical modelling and laboratory measurements between 290 and 1,250 K. Two spinel lherzolites (BALM4 and BALD1) from the Balmuccia and Baldissero massifs in the Italian Alps were chosen as representative

### Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle

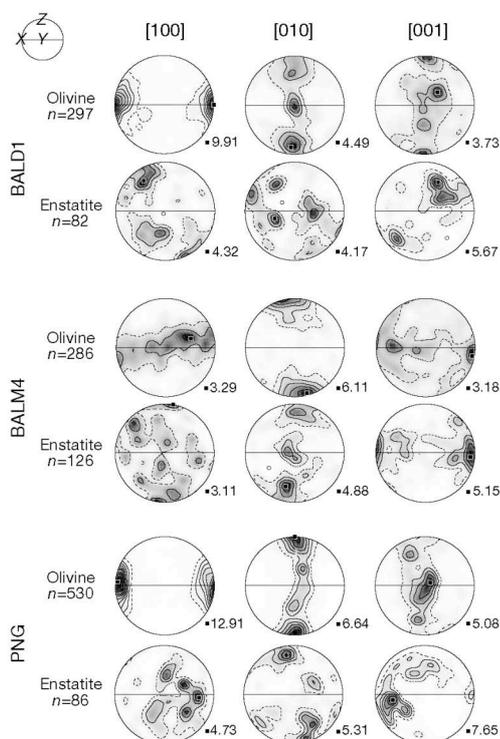
Andréa Tommasi\*, Benolt Gibert\*, Ulfert Seipold† & David Mainprice\*

\* Laboratoire de Tectonophysique, CNRS/Université de Montpellier II, F-34095 Montpellier cedex 5, France

† GeoForschungsZentrum Potsdam, Telegrafenberg, D-14473 Potsdam, Germany

Heat transfer in the mantle is a key process controlling the Earth's dynamics. Upper-mantle mineral phases, especially olivine, have been shown to display highly anisotropic thermal diffusivity at ambient conditions<sup>1,2</sup>, and seismic anisotropy data<sup>3</sup> show that preferred orientations of olivine induced by deformation<sup>4</sup> are coherent at large scales (>50 km) in the upper mantle. Thus heat transport in the upper mantle should be anisotropic. But the thermal anisotropy of mantle minerals at high temperature<sup>1,5</sup> and its relationship with deformation have not been well constrained. Here we present petrophysical modelling and laboratory measurements of thermal diffusivity in deformed mantle rocks between temperatures of 290 and 1,250 K that demonstrate that deformation may induce a significant anisotropy of thermal diffusivity in the uppermost mantle. We found that heat transport parallel to the flow direction is up to 30 per cent faster than that normal to the flow plane. Such a strain-induced thermal anisotropy implies that the upper-mantle temperature distribution, rheology and, consequently, its dynamics, will depend on deformation history. In oceans, resistive drag flow would result in lower vertical diffusivities in both the lithosphere and asthenosphere<sup>6</sup> and hence in less effective heat transfer from the convective mantle. In continents, olivine orientations frozen in the lithosphere may induce anisotropic heating above mantle plumes, favouring the reactivation of pre-existing structures.

To investigate the interdependence between flow and thermal anisotropy, that is, to introduce this anisotropy in geodynamical



**Figure 1** Olivine and enstatite lattice-preferred orientations for the studied samples. Lower hemisphere equal-area projection,  $n$  measurements, contour intervals are at multiples of a uniform distribution. Inverse-log shading varies from white (minimum density) to black (maximum density, also indicated by a solid square). Full line marks the foliation ( $X$ - $Y$  plane); lineation ( $X$  direction) is horizontal.

letters to nature

of the subcontinental mantle and a spinel harzburgite (PNG) from the Papua New Guinea ophiolite was selected as representative of the suboceanic mantle. Modal compositions are: BALM4 (76% olivine, 19% enstatite, 3% diopside and 2% spinel), BALD1 (74% olivine, 18% enstatite, 6% diopside and 2% spinel), and PNG (87% olivine, 12% enstatite and 1% spinel). All samples display coarser-grained porphyroclastic textures characteristic of deformation under high-temperature conditions (>1,100°C) and are devoid of alteration minerals and macroscopic fractures. Olivine displays a bimodal grain size distribution: porphyroclasts range from 5 to 2 mm, whereas recrystallized grains are smaller than 1 mm. Pyroxenes generally form clusters that may reach up to 5 mm. Foliation and lineation are defined by alignment of spinel crystals accompanied, in the lherzolites, by a weak shape-preferred orientation of olivine. In PNG, recrystallization by subgrain rotation leads to elongation of olivine porphyroclasts normal to the spinel lineation.

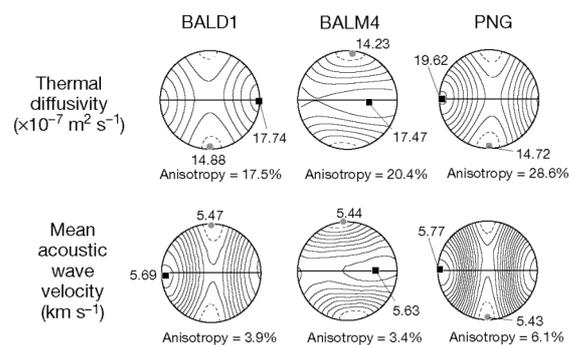
Lattice-preferred orientations (Fig. 1) are typical of peridotites deformed under high-temperature conditions, in which (010)[100] and (001)[100] are the dominant slip systems for olivine<sup>2</sup>. BALD1 and PNG display a strong concentration of olivine [100] axes subparallel to the lineation (flow direction) and a distribution of both [010] and [001] axes in a plane normal to the lineation, with secondary concentrations normal and parallel to the foliation (flow plane), respectively. BALM4, on the other hand, is characterized by a planar distribution of [100] and [001] along the foliation and a [010] concentration normal to it. Enstatite preferred orientations are weaker. BALM4 and PNG are characterized by a concentration of the main glide direction [001] close to the lineation and a weak concentration of [010] at high angle to the foliation. BALD1 enstatite preferred orientation is oblique to the foliation. Diopside displays very weak preferred orientations.

Petrophysical modelling using olivine and pyroxene thermal diffusivity tensors determined by spectroscopic methods at ambient conditions<sup>2</sup> indicates that all samples display a significant anisotropy of thermal diffusivity (between 17.5 and 28.6%; Fig. 2). Thermal diffusivity is maximum parallel to the olivine [100] concentration, that is, parallel to the lineation (X direction), and minimum parallel to the [010] concentration, that is, normal to the foliation (Z direction). Anisotropy depends on the strength of olivine lattice-preferred orientation; PNG displays the strongest lattice-preferred orientation and the most anisotropic behaviour. Thermal anisotropy also depends on the pyroxene content, which tends to weaken the anisotropy; this effect is enhanced when olivine

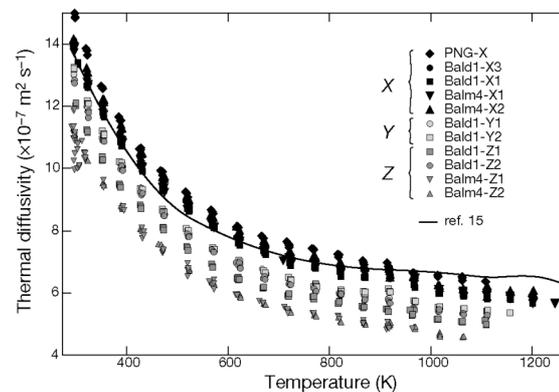
and estatite lattice-preferred orientations are uncorrelated, as in BALD1. In addition, thermal diffusivity of olivine varies more between [010] and [001] directions than between [001] and [100]. Thus the dispersion of [010] and [001] in a plane normal to the lineation (Y-Z plane) showed by BALD1 significantly weakens its anisotropy, whereas the dispersion of [100] and [001] in the foliation (X-Y plane) displayed by BALM4 only slightly reduces its maximum thermal diffusivity. Similar patterns, but higher anisotropies (between 23.9 and 38.4%), are predicted if more anisotropic olivine and enstatite diffusivity tensors<sup>1</sup> are used.

Modelling suggests that, at ambient conditions, upper-mantle rocks retain one-third to half of the olivine single crystal anisotropy. Is this anisotropy preserved at upper-mantle conditions? Does dispersion at grain boundaries affect the thermal diffusivity tensor? In order to answer these questions, we measured the thermal diffusivity of our samples at ambient pressure and temperatures between 290 and 1,250 K. Six measurements were performed parallel to the lineation (X direction, [100] concentration, for which the highest diffusivity is predicted), four normal to the flow plane (Z direction, [010] concentration), and two in the flow plane, but normal to the lineation (Y direction, [001] concentration). These measurements (Fig. 3) show a significant anisotropy of thermal diffusivity that remains roughly constant over the entire temperature range, in agreement with high-temperature thermal diffusivity data on olivine and pyroxene crystals<sup>1</sup>. Measured anisotropies (21% for BALM4 and 12% for BALD1) are consistent with predictions of petrophysical models using data from ref. 2 (Fig. 2). The higher anisotropy (31%) previously observed in a dunite<sup>1</sup> may be explained by the lower pyroxene content and very strong crystallographic orientation<sup>12</sup> of that sample (similar to PNG, for which 28% of anisotropy was predicted).

Maximum and minimum thermal diffusivities are coherent from sample to sample and their relative magnitudes match model predictions very well:  $K_{\text{PNG-X}} > K_{\text{BALD1-X}} \approx K_{\text{BALM4-X}} > K_{\text{BALD1-Y}} > K_{\text{BALM4-Z}}$ . Measured thermal diffusivities at 290 K are, however, systematically lower by 20% than model predictions; this difference may be attributed to isotropically distributed lattice imperfections



**Figure 2** Modelled three-dimensional thermal diffusivity and mean acoustic wave velocity distributions. Voigt-Reuss-Hill averages calculated from crystallographic orientation data and thermal diffusivity and elastic constants tensors for olivine and enstatite at ambient conditions<sup>2,27,28</sup>. As its full thermal diffusivity tensor is not known, diopside is assimilated to enstatite.  $V_{\text{mean}} = 3/(1/V_p + 1/V_{s1} + 1/V_{s2})$ . Lower hemisphere equal-area projections, contours at  $10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  and  $0.02 \text{ km s}^{-1}$  intervals, respectively. Full line marks the foliation (X-Y plane); lineation (X direction) is horizontal.



**Figure 3** Thermal diffusivity as a function of temperature as measured in oriented cores of PNG (diamonds), BALD1 (circles and squares), and BALM4 (triangles). Red symbols mark measurements parallel to the [100] axis maximum (X direction = lineation), blue symbols indicate measurements parallel to the [010] axis maximum (Z direction = normal to the foliation), and yellow symbols show measurements in the Y direction for BALD1. At each temperature, three successive measurements are performed in order to check data reproducibility. High dispersion in BALM4-Z1 low-temperature data results from electronic noise, eliminated in subsequent measurements. Error bars for individual measurements (not plotted) are of 2%. Relatively high thermal diffusivities displayed by BALD1 in the Z direction result from the dispersion of [010] and [001] in the Y-Z plane (compare Fig. 1). For comparison, the full black line represents thermal diffusivity data for a fine-grained isotropic olivine polycrystal at 100 MPa<sup>15</sup>.

## letters to nature

and microfractures in the samples. Indeed, thermal diffusivity measurements in crystalline rocks under increasing pressure conditions generally show a fast, non-linear increase in thermal diffusivity up to 200 MPa associated with closure of microfractures<sup>13,14</sup>. Thus petrophysical models using olivine and pyroxene thermal diffusivity tensors from ref. 2, our experimental constraints on the temperature-derivatives of the olivine and pyroxene thermal diffusivity tensors, as well as a weak linear dependence on pressure<sup>2,15</sup>, should provide good estimates of the upper-mantle thermal diffusivity.

Experiments were carefully carried out to minimize problems with radiative disequilibrium. Samples are large (heater–thermocouple distance is 6–7 mm) and low pulse amplitudes (<1.5 K at the thermocouple location) were used. Although the measurement distance is close to the photon mean free path in olivine crystals (~5 mm at 800 K; refs 16 and 17), in real mantle rocks, the latter should be reduced by scattering at grain boundaries and presence of more absorbing phases, like pyroxenes<sup>16,17</sup>. Thus an equilibrium diffusion process should control radiative heat transfer in the experiments and measured thermal diffusivity represents the sum of phonon and photon contributions. This hypothesis is supported by agreement between our data and thermal diffusivity measurements on olivine-rich polycrystalline samples with smaller grain sizes and dimensions<sup>15,18</sup>.

Relative contributions of phonon conduction and radiative transfer to the total diffusivity may be inferred from the temperature dependence of thermal diffusivity. Up to 600 K, thermal diffusivity is inversely proportional to temperature, suggesting that scattering of heat-conducting phonons by lattice imperfections and phonon–phonon interactions controls heat transport<sup>19</sup>. At higher temperature, deviation of this behaviour may be ascribed to the onset of radiative heat transfer. Above 900 K, this contribution (about 15% of the total diffusivity) is restrained by development of oxide films along grain boundaries (observed optically in thin sections of the measured cores). Thus lattice conduction is the dominant heat transfer mechanism over the entire temperature range of our measurements. Lattice conduction should also prevail in the Earth's upper mantle, as suggested by analysis of infrared absorption data<sup>20</sup>. Yet, although it is minor, the radiative contribution at high temperature may have been underestimated in our experiments.

Heat transfer by phonons depends essentially on phonon velocity and mean free path<sup>1</sup>. Anisotropy of phonon velocities, which may be approximated by the anisotropy of acoustic velocities<sup>1</sup>, is significantly lower than the anisotropy of thermal diffusivity (Fig. 2). Thus the observed thermal diffusivity anisotropy largely results from anisotropy of the phonon mean free path. This latter is controlled by interactions with lattice imperfections and phonon–phonon collisions. At high temperature, however, the contribution of phonon–phonon interactions is dominant. Preservation of a constant anisotropy over the entire temperature range suggests therefore that phonon mean free path and, hence, anisotropy are controlled by phonon–phonon collisions, which are more frequent along the [010] direction. Indeed, linear thermal expansion coefficients for olivine, which are also related to the anharmonicity of lattice potential, display a similar anisotropy,  $\alpha_{[100]} < \alpha_{[001]} < \alpha_{[010]}$  up to 2,000 K (ref. 22).

Through the association of petrophysical modelling and thermal diffusivity measurements on textured upper-mantle rocks, we show that deformation may induce a significant thermal diffusivity anisotropy in the uppermost mantle: heat transport parallel to the olivine [100] axes concentration (flow direction) is up to 30% faster than normal to the flow plane ([010] concentration). Moreover, because the anisotropy does not depend on temperature, it might be preserved under higher-temperature, asthenospheric conditions. Existence of a large-scale, strain-induced thermal anisotropy in the upper mantle implies that the temperature distribution, rheology, and, hence, the upper-mantle dynamics depend on its deformation history. Olivine orientations frozen in the continental

lithosphere may modify plume–lithosphere interactions. Enhanced thermal diffusivity along lithospheric-scale wrench zones—that is, parallel to the olivine [100] preferred orientation—may lead to anisotropic heating of the lithosphere, favouring the reactivation of these structures during continental break-up<sup>23,24</sup>. Such control of the pre-existing lithospheric structure on the propagation of a thermal anomaly may be inferred, for instance, from tomographic images of the east African rift<sup>25</sup>. In oceanic domains, deformation by resistive drag of the sublithospheric mantle leads to vertical orientation of olivine [010] axes in the lithosphere and asthenosphere<sup>6</sup>, which will result in reduced vertical diffusivity and hence in less effective heat transfer from the convective mantle. Reduced diffusivity across oceanic plates may also lead to slower heating of subducting slabs. Interactions between flow and anisotropy are nevertheless complex and a full investigation of the effect of an anisotropic thermal diffusivity on mantle convection may only be accomplished by integrating this strain-induced anisotropy in geodynamical models. □

## Methods

## Lattice-preferred orientation measurements

Crystallographic orientations were determined on a scanning electron microscope (JEOL JSM 5600) by indexation of electron back-scattered diffraction (EBSD) patterns generated by interaction of a vertical incident electron beam with a carefully polished thin section tilted at 70°. The pattern is projected onto a phosphor screen and recorded by a low-light, high-resolution charge-coupled device (CCD) camera. The image is then digitally processed and indexed in terms of crystal orientation using the CHANNEL+ software from HKL Technology.

## Thermal diffusivity measurements

For each sample, thermal diffusivity of one (PNG) to six (BALD1) oriented cores of 43 mm length and 27 mm diameter was determined using a finite pulse method<sup>26</sup>. The energy pulse (3 s) is generated at the core axis by a Nichrome heater. It propagates radially and is recorded by a Chromel/Alumel thermocouple placed at a distance  $d$  (6–7 mm) from the core axis. The temperature response is measured every 0.1 s during 40 s. From the measured temperature curve, the half-time value  $t_{1/2}$ , that is, the time span to reach half of the maximum temperature rise, is evaluated. Thermal diffusivity  $K$  is then calculated as  $K = d^2/(10.77t_{1/2} - 16.55)$ . A thick-walled pyrophyllite container prevents thermal convection around the sample and a drastic step in thermal properties at sample boundaries. The entire assemblage is fitted in a three-zone furnace. At each temperature, three successive measurements are performed in order to check data reproducibility. Moreover, for samples BALM4 and BALD1, two series of measurements (two cores) were performed in each direction.

Received 17 October 2000; accepted 25 April 2001.

- Kobayashi, Y. Anisotropy of thermal diffusivity in olivine, pyroxene, and dunitite. *J. Phys. Earth* **22**, 359–373 (1974).
- Chai, M., Brown, J. M. & Slutsky, L. J. Thermal diffusivity of mantle minerals. *Phys. Chem. Minerals* **23**, 470–475 (1996).
- Silver, P. G. Seismic anisotropy beneath the continents: Probing the depths of geology. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.* **24**, 385–432 (1996).
- Nicolas, A. & Christensen, N. I. in *Composition, Structure and Dynamics of the Lithosphere–Asthenosphere System* (eds Fuchs, K. & Froidevaux, C.) 111–123 (American Geophysical Union, Washington DC, 1987).
- Schärmeli, G. H. in *High-Pressure Researches in Geosciences* (ed. Schreyer, W.) 349–373 (E. Schweizerbart'sche, Stuttgart, 1982).
- Tommasi, A. Forward modeling of the development of seismic anisotropy in the upper mantle. *Earth Planet. Sci. Lett.* **160**, 1–13 (1998).
- Chastel, Y. B., Dawson, P. R., Wenk, H.-R. & Bennet, K. Anisotropic convection with implications for the upper mantle. *J. Geophys. Res.* **98**, 17757–17771 (1993).
- Blackman, D. K. *et al.* Teleseismic imaging of subaxial flow at mid-ocean ridges: travel-time effects of anisotropic mineral texture in the mantle. *Geophys. J. Int.* **127**, 415–426 (1996).
- Tommasi, A., Mainprice, D., Canova, G. & Chastel, Y. Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations. Implications for upper mantle seismic anisotropy. *J. Geophys. Res.* **105**, 7893–7908 (2000).
- Mainprice, D. & Humbert, M. Methods of calculating petrophysical properties from lattice preferred orientation data. *Surv. Geophys.* **15**, 575–592 (1994).
- Kanamori, H., Fuji, N. & Mizutani, H. Thermal diffusivity measurement of rock-forming minerals from 300°K to 1100°K. *J. Geophys. Res.* **73**, 595–605 (1968).
- Kasahara, I., Suzuki, I., Kumazawa, M., Kobayashi, Y. & Iida, K. Anisotropism of P wave in dunitite. *Zisin (J. Seismol. Soc. Jpn)* **21**, 222–228 (1968).
- Horai, K. & Susaki, J. The effect of pressure on the thermal conductivity of silicate rocks up to 12 kbar. *Phys. Earth Planet. Inter.* **55**, 292–305 (1989).
- Seipold, U., Mueller, H. J. & Tuisku, P. Principle differences in the pressure dependence of thermal and elastic properties of crystalline rocks. *Phys. Chem. Earth* **23**, 357–360 (1998).
- Katsura, T. Thermal diffusivity of olivine under upper mantle conditions. *Geophys. J. Int.* **122**, 63–69 (1995).
- Shankland, T. J., Nitsan, U. & Duba, A. G. Optical absorption and radiative heat transport in olivine at high temperature. *J. Geophys. Res.* **84**, 1603–1610 (1979).

## letters to nature

17. Schatz, J. F. & Simmons, G. Thermal conductivity of Earth materials at high temperatures. *J. Geophys. Res.* **77**, 6966–6983 (1972).
18. Holt, J. B. Thermal diffusivity of olivine. *Earth Planet. Sci. Lett.* **27**, 404–408 (1975).
19. Seipold, U. Temperature dependence of thermal transport properties of crystalline rocks—general law. *Tectonophysics* **291**, 161–171 (1998).
20. Hofmeister, A. M. Mantle values of thermal conductivity and the geotherm from phonon lifetimes. *Science* **283**, 1699–1706 (1999).
21. Klemens, P. G. Thermal conductivity and lattice vibrational modes. *Solid State Phys.* **7**, 1–98 (1958).
22. Bouhifd, M. A., Andraut, D., Fiquet, G. & Richet, P. Thermal expansion of forsterite up to the melting point. *Geophys. Res. Lett.* **23**, 134–1136 (1996).
23. Vauchez, A., Barruol, G. & Tommasi, A. Why do continents break up parallel to ancient orogenic belts? *Terra Nova* **9**, 62–66 (1997).
24. Tommasi, A. & Vauchez, A. Continental rifting parallel to ancient collisional belts: An effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle. *Earth Planet. Sci. Lett.* **185**, 199–210 (2001).
25. Achauer, U. & KRISP working group. New ideas on the Kenya rift based on the inversion of the combined dataset of the 1985 and 1989/90 seismic tomography experiments. *Tectonophysics* **236**, 305–329 (1988).
26. Seipold, U. Simultaneous measurements of thermal diffusivity and thermal conductivity under high pressure using thermal pulse of finite length. *High Temp.-High Press.* **20**, 609–613 (1988).
27. Abramson, E. H., Brown, M., Slutsky, L. J. & Zaug, J. The elastic constants of San Carlos olivine up to 17 GPa. *J. Geophys. Res.* **102**, 12252–12263 (1997).
28. Duffy, T. S. & Vaughan, M. T. Elasticity of enstatite and its relationships to crystal structure. *J. Geophys. Res.* **93**, 383–391 (1988).

### Acknowledgements

We thank C. Karger for participation in the measurements, and M. Ferrero and E. Boudier for providing the samples from Baldissero and Papua New Guinea, respectively. The Laboratoire de Tectonophysique's EBSD system was funded by the CNRS/INSU, Université of Montpellier II, and NSF project "Anatomy of an archaic craton". This work was supported by the CNRS/INSU programme "Action Thématique Innovante".

Correspondence should be addressed to A.T.  
(e-mail: deia@dstu.univ-montp2.fr).

### 4.3 Thermal diffusivity of upper mantle rocks : influence of temperature, pressure and the deformation fabric.

JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH, VOL. 108, NO. B8, 2359, doi:10.1029/2002JB002108, 2003

#### Thermal diffusivity of upper mantle rocks: Influence of temperature, pressure, and the deformation fabric

Benoit Gibert

Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II and CNRS, Montpellier, France

Ulfert Seipold

GeoForschungsZentrum Potsdam, Potsdam, Germany

Andréa Tommasi and David Mainprice

Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II and CNRS, Montpellier, France

Received 19 July 2002; revised 19 February 2003; accepted 1 April 2003; published 1 August 2003.

[1] Thermal diffusivity measurements of seven naturally deformed upper mantle rocks were made as a function of pressure (up to 1 GPa), temperature (up to 1250 K), and the deformation fabric of the samples. For each sample the strain-induced crystal preferred orientations of olivine and pyroxenes were measured, and petrophysical models, based on the thermal diffusivity tensors of the olivine and enstatite crystals, were used to evaluate the three-dimensional distribution of the thermal diffusivity. Both model predictions and measurements show that the anisotropy of thermal diffusivity remains large at the rock scale: 15–28%, depending on the strength of the olivine crystallographic fabric. The direction of maximum thermal diffusivity is parallel to the lineation (flow direction), and the minimum of thermal diffusivity is normal to the foliation plane (flow plane). This anisotropy is preserved at high temperature and pressure. However, measured thermal diffusivities are 20–30% lower than model predictions. This discrepancy between measurements and model predictions cannot be explained by the presence of cracks in the samples because the closure of these void spaces, evaluated through the high-pressure experiments, is found to have a negligible effect on measured thermal diffusivities. Thermal diffusivity for all samples displays a weak linear dependence on pressure of  $\sim 10\% \text{ GPa}^{-1}$ . Thermal diffusivities observed in the high-temperature experiments (1000–1250 K) are compatible with a weak radiative contribution to the total heat diffusion. *INDEX TERMS*: 5112 Physical Properties of Rocks: Microstructure; 5134 Physical Properties of Rocks: Thermal properties; 8120 Tectonophysics: Dynamics of lithosphere and mantle—general; 8130 Tectonophysics: Heat generation and transport; *KEYWORDS*: mantle rocks, thermal diffusivity, lattice diffusivity, radiative heat transfer, anisotropy, petrophysical models.

**Citation:** Gibert, B., U. Seipold, A. Tommasi, and D. Mainprice, Thermal diffusivity of upper mantle rocks: Influence of temperature, pressure, and the deformation fabric, *J. Geophys. Res.*, 108(B8), 2359, doi:10.1029/2002JB002108, 2003.

#### 1. Introduction

[2] Heat transfer is a key process for the upper mantle dynamics. In the lithosphere, heat transfer by conduction is expected to be the main process leading to thermal equilibrium. Thermal diffusivity is thus the key parameter that controls the temperature distribution as a function of time and, indirectly, through the temperature dependence of the rheology, the deformation pattern in the lithospheric mantle. Knowledge of pressure and temperature derivatives of thermal diffusivity of mantle materials is therefore essential to model the thermal evolution of the lithosphere. Thermal diffusivity of mantle rocks is known to decrease strongly with increasing temperature up to 1000 K. At

higher temperatures, it is supposed to either remain constant up to 1600 K [Katsura, 1995] or to increase due to an increasing contribution of radiative processes [Kanamori *et al.*, 1968]. Pressure dependence is expected to be low [Katsura, 1995]. At last, thermal diffusivity of olivine and pyroxene crystals is anisotropic [Chai *et al.*, 1996; Kobayashi, 1974].

[3] However, a close analysis of thermal diffusivity (and conductivity) data for mantle materials highlights a large scatter of the proposed thermal diffusivity values, depending on the experimental settings and on the type of sample used, that is, single crystals, sintered aggregates or natural rocks. Indeed, thermal diffusivity of single crystals and polymineralic rocks differs widely at ambient conditions [Beck *et al.*, 1978; Horai and Susaki, 1989; Kanamori *et al.*, 1968]. Thermal diffusivity data at high-temperature conditions, in which radiative heat transport becomes impor-

**Table 1.** Samples Origin, Modal Composition, Densities, and the Mean Forsterite Content of Olivine<sup>a</sup>

Sample	Peridotite Type	Origin	Modal Composition, %				Density, kg m <sup>-3</sup>	Mg/(Fe+Mg), %
			ol	en	di	sp		
BALM4	lherzolite	Balmuccia massif, Alps	76	19	3	2	3363	90
BALD1	lherzolites	Baldissero massif, Alps	75	18	5	2	3354	90
00BA1		Baldissero massif, Alps					3383	90
00BA2		Baldissero massif, Alps					3354	90
PNG	harzburgite	Papua New Guinea-ophiolitic nappe	87	12	0	1	3330	91.1
00VS11	dunitic lens within gabbros	Balmuccia massif	98	–	–	2	3429	84.2
00VS24	dunites	Balmuccia massif	98	–	–	2	3387	90.5

<sup>a</sup>Modal compositions (ol, olivine; en, enstatite; di, diopside; and sp, spinel) were calculated by image analysis performed on thin sections. Chemical analyses were performed on a CAMECA SX100 electron probe microanalyzer at the Institut des Sciences de la Terre, de l'Eau et de l'Espace de Montpellier.

tant, also exhibit a similar discrepancy between single-crystal and polycrystal behavior [Kanamori *et al.*, 1968; Katsura, 1995; Schatz and Simmons, 1972]. This discrepancy is also observed in high-pressure experiments, in which the effect of void spaces in the polycrystalline material is minimized [Horai and Susaki, 1989; Zaugg *et al.*, 1992].

[4] The additional effects expected in polycrystalline rocks, compared to single crystals, are (1) presence of cracks or open porosity, which should lower absolute values of thermal diffusivity and modify the anisotropy, (2) grain boundaries, which may reduce the thermal diffusivity through dispersion processes, (3) variations in modal composition of rocks, as well as in the chemical composition of the constitutive minerals, and (4) deformation, which induces the development of crystal preferred orientations and thus anisotropy of thermal diffusivity at the rock scale [Kobayashi, 1974; Tommasi *et al.*, 2001].

[5] The association of petrophysical simulations and measurements of thermal diffusivity of natural rock samples allows to establish a link between single-crystal and rock properties (i.e., polycrystalline aggregates) [Pribnow and Umsonst, 1993; Siegesmund, 1994]. For instance, in a recent study, we have shown that up to one half of the strong thermal diffusivity anisotropy of the olivine single crystal may be preserved at the rock scale [Tommasi *et al.*, 2001].

[6] In this paper, we continue the investigation of heat transfer properties of upper mantle rocks. Thermal diffusivity of seven peridotites was measured under high-temperature (up to 1250K) and high-pressure conditions (up to 1 GPa). Whole rock thermal diffusivities were also modeled using the olivine and pyroxenes single-crystal tensors. The comparison between measurements, model predictions, and previous thermal diffusivity data allows a discussion of the physical processes affecting the upper mantle thermal diffusivity under a large range of pressure and temperature conditions.

## 2. Sample Description

### 2.1. Microstructure

[7] Seven naturally deformed mantle rocks have been selected for both petrophysical modeling and laboratory measurements of thermal diffusivity. Four spinel lherzolites were chosen as representative of a subcontinental mantle. A harzburgite was selected as representative of the suboceanic mantle and two dunites were chosen as almost pure olivine

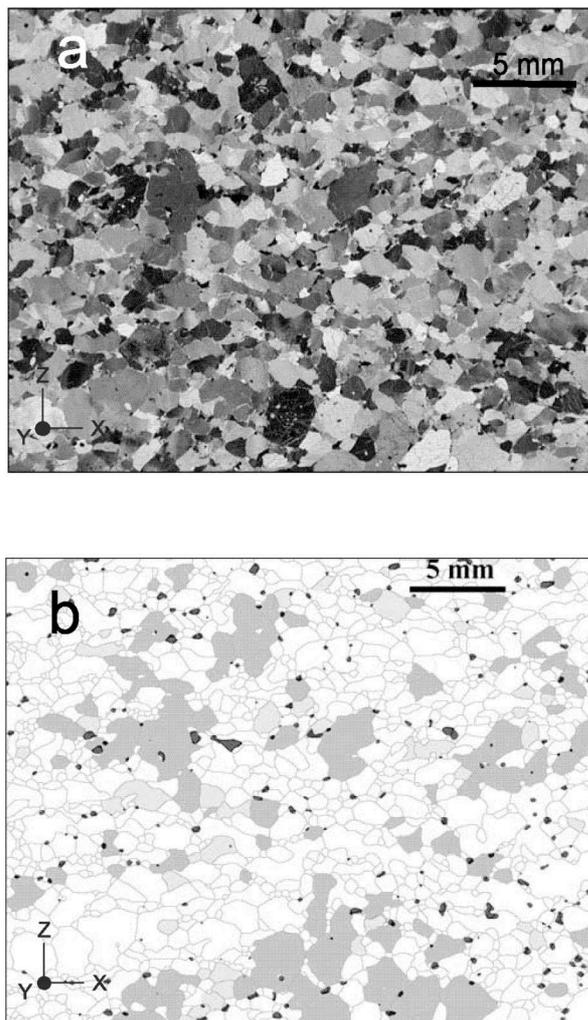
end-member samples. Apart from the harzburgite, which has been sampled in the Papua New Guinea Ophiolite, all the other samples come from the Ivrea Zone, Italy. Origin of the samples, their modal composition, densities, and the forsterite content of olivine in each sample are shown in Table 1.

[8] Optical observations on thin sections (Figure 1a) show that all samples are devoid of alteration minerals and macroscopic fractures. Densities measured by triple-weight method in dry and saturated conditions are close to those calculated using olivine pyroxenes and spinel single-crystal densities and are thus incompatible with presence of serpentine (Table 1). Connected porosity measured on 3–4 cm<sup>3</sup> samples is inferior to 0.2%; this confirms that open macrofractures are absent. Preferred orientations of intergranular or intragranular cracks are not observed on thin sections.

[9] All samples show a clear foliation and lineation defined by alignment of elongated spinels. Except for one dunite (00VS11), all samples display coarse-grained porphyroclastic textures characteristic of deformation under high temperature conditions (>1000°C). Olivine displays a bimodal grain size distribution: porphyroclasts range from 2 to 5 mm whereas recrystallized grains are smaller than 1 mm. In the lherzolites and harzburgite, orthopyroxenes form clusters that may reach up to 5 mm in diameter (Figure 1b). In the lherzolites, olivine grains are slightly elongated parallel to the lineation direction indicated by the stretching of spinel grains (Figure 1b). In the harzburgite PNG and the dunite 00VS24, intense recrystallization by subgrain rotation leads to elongation of olivine porphyroclasts normal to the spinel lineation. In the dunite 00VS11, olivine grains display a polygonal structure, with typical 120° triple junctions and spinel inclusions in olivine, which are indicative of static recrystallization at high temperature.

### 2.2. Crystal Preferred Orientations

[10] Crystal preferred orientations (CPO) of olivine and pyroxenes grains were determined by the electron-back-scattered diffraction (EBSD) technique in a JEOL 5600 scanning electron microscope. Diffraction patterns (Kikuchi bands), generated by the interaction of a vertical electron beam with a carefully polished thin section tilted to 70°, are automatically indexed by the CHANNEL+ software from HKL Technology. For each measured grain, the full crystallographic orientation is given by the three Euler angles ( $\varphi_1$ ,  $\Phi$ ,  $\varphi_2$ ) that describe the rotation needed to bring the macroscopic and crystallographic reference frames into



**Figure 1.** Microstructure of the lherzolite sample BALM4. The  $X$  direction is the lineation direction and the  $(XY)$  plane is the foliation plane. (a) Thin-section micrograph with crossed polarizers. (b) Line drawing. Spinel is represented in black, orthopyroxenes are in dark grey, clinopyroxenes are in light grey, and olivine is in white.

coincidence [Bunge, 1982]. Measured crystals preferred orientations (Figure 2) are typical of peridotites deformed under high temperature conditions ( $>1000^{\circ}\text{C}$ ). BALD1, PNG, 00BA1, and 00BA2 display a strong concentration of olivine  $[100]$  axes subparallel to the lineation ( $X$  direction, density  $>8$ ) and a girdle distribution of  $[010]$  and  $[001]$  axes in the plane perpendicular to the lineation. Within this girdle, a maximum of the  $[010]$  axes is observed perpendicular to the foliation plane ( $Z$  direction) and a secondary maximum is observed in the foliation plane (normal to the lineation) for 00BA2 and BALD1 ( $Y$  direction).  $[001]$  maxima, usually weaker than the  $[100]$  and  $[010]$  ones, are observed normal to the lineation, in the foliation plane ( $Y$  direction). This CPO pattern suggests a dominant activation of the high-temperature  $(010)[100]$  and  $(001)[100]$

slip systems. BALM4 displays a planar distribution of the  $[100]$  and  $[001]$  along the foliation plane and a strong concentration of the  $[010]$  axes normal to foliation. This olivine CPO pattern is characteristic of a flattening deformation (axial shortening or transpression, [Tommasi *et al.*, 1999]). The dunites, 00VS24 and 00VS11, show an olivine CPO with an orthorhombic symmetry, characterized by equivalent concentrations (maximum density  $\cong 5$  multiples of uniform distribution) of the  $[100]$ ,  $[010]$ , and  $[001]$  axes in the  $X$ ,  $Z$ , and  $Y$  directions, respectively. This CPO pattern is characteristic of single activation of the olivine high-temperature easy-glide system:  $(010)[100]$ , probably associated with an active grain boundary migration (also indicated by the microstructure of these dunites).

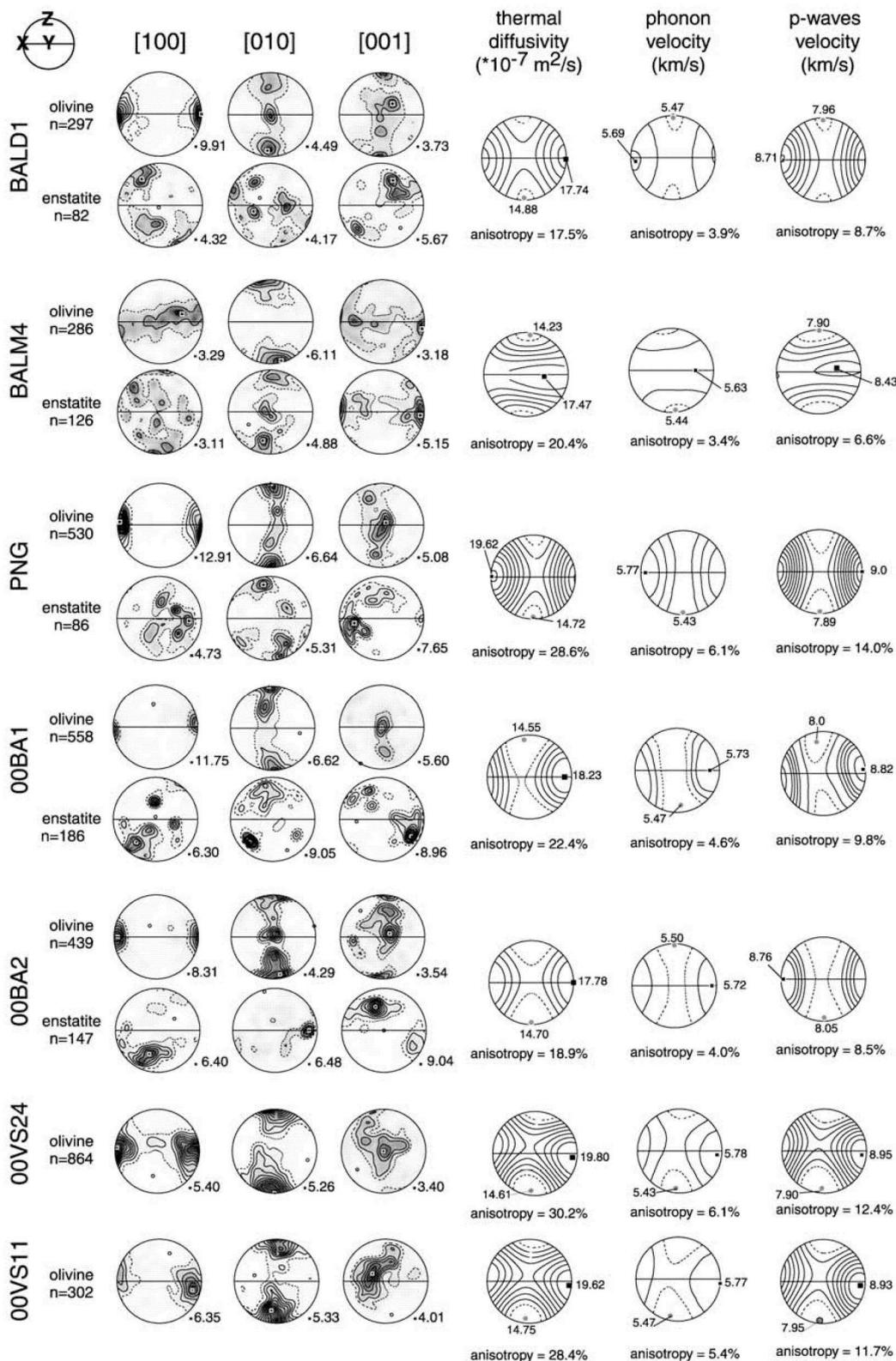
$[11]$  Enstatite CPO are, in general, well correlated with the olivine ones. The  $[001]$  axes tend to concentrate parallel or at low angle to both the spinel lineation and the  $[100]$  maximum of olivine, suggesting dominant glide parallel to the easy glide direction of orthopyroxenes  $[001]$ . A strong obliquity between the olivine and enstatite CPO is nevertheless observed for BALD1 and 00BA2, suggesting either dominant glide on the unusual  $(001)[010]$  slip system or a weaker deformation of the pyroxenes relative to the olivine matrix. Diopside crystal preferred orientations are very weak.

### 3. Modeling the Thermal Diffusivity at the Sample Scale

$[12]$  If the modal composition and the crystallographic orientations of a rock sample (polycrystalline aggregate) are known, the three-dimensional distribution of its thermal diffusivity may be calculated using the thermal diffusivity tensors of the constitutive phases [Mainprice and Humbert, 1994]. In the present models, we use olivine and enstatite single-crystal thermal diffusivity tensors (Table 2) determined by picosecond transient grating spectroscopy [Chai *et al.*, 1996]. The full thermal diffusivity tensor of monoclinic diopside is unknown, but measurements parallel to the  $[100]$ ,  $[010]$ , and  $[001]$  directions indicate that it is similar to the enstatite one [Kobayashi, 1974], so in the present models diopside is assimilated to enstatite. The aggregate thermal diffusivity is obtained by averaging the individual grain tensors in the macroscopic reference frame ( $XYZ$  structural directions). Each mineral phase is pondered by its volume fraction. Two kinds of averaging are used. The Voigt average is obtained by assuming that the thermal gradient is constant everywhere and equal to the macroscopic thermal gradient. The Reuss average is obtained by assuming that heat flux is everywhere constant. The Voigt average is an upper bound for thermal diffusivity estimation and the Reuss average is a lower bound [Taylor, 1983]. For our samples, because the diffusivity of olivine and pyroxenes are similar, these two bounds were very close. Thus we used their arithmetic mean: the Voigt-Reuss-Hill average.

$[13]$  These petrophysical models (Figure 2) show that all samples display a significant anisotropy of thermal diffusivity (between 17.5 and 29.8%). Thermal diffusivity is maximum parallel to the olivine  $[100]$  concentration, i.e., parallel to the  $X$  direction, and minimum parallel to the olivine  $[010]$  axes concentration, i.e., perpendicular to the foliation plane ( $Z$  direction). The good agreement between the aggregates

ECV 1 - 4 GIBERT ET AL.: THERMAL DIFFUSIVITY OF UPPER MANTLE ROCKS



**Table 2.** San Carlos Olivine (Fo89) and Orthopyroxene Thermal Diffusivity Tensors<sup>a</sup>

Axis	Olivine	Orthopyroxene
[100]	21.6	12.6
[010]	12.5	10.5
[001]	18.7	16.6

<sup>a</sup>From [Chai *et al.*, 1996]. In units of  $10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . Since olivine and orthopyroxene are orthorhombic minerals, thermal diffusivity measurements along the three principal crystallographic axes define the complete tensor. Maximum anisotropy for olivine is 54%.

and the olivine crystal thermal diffusivity tensors indicates that the three-dimensional distribution of thermal diffusivity at the rock scale is essentially controlled by the olivine crystal preferred orientation. However, the anisotropy depends not only on the strength of the olivine [100] axes concentration but also on the relative distribution of the [010] and [001] axes. In samples where the minimum diffusivity direction [010] and the intermediate direction [001] display a girdle distribution in the plane normal to the lineation ( $YZ$  plane), the anisotropy is weakened (e.g., BALD1 and 00BA2). In contrast, samples in which the [010] axes are strongly concentrated display a strong anisotropy (e.g., BALM4). Thermal diffusivity anisotropy depends also on pyroxene content. High pyroxene contents tend to weaken the anisotropy, even if the highest diffusive axis of pyroxenes, [001], is concentrated close to the highest diffusive axis of olivine. This effect is present for 00BA1, which displays the strongest olivine CPO, but a low anisotropy (22%). In comparison, the 00VS24 and 00VS11 dunites display a weaker CPO, but higher anisotropy ( $\cong 30\%$ ), because of their orthorhombic symmetry. Absolute values of thermal diffusivity are also strongly dependent on the pyroxene content of the samples because pyroxenes are less diffusive than olivine: the dunites and the harzburgite display higher thermal diffusivities than the lherzolites.

[14] In order to constrain the thermal diffusivity modeling, we have also calculated the  $P$  wave velocity distribution for our samples using elastic constants tensors of olivine and enstatite determined at ambient conditions [Abramson *et al.*, 1997; Duffy and Vaughan, 1988]. Comparison between the calculated thermal diffusivities and  $P$  wave velocities highlights a clear relationship between acoustic properties and thermal properties (Figure 2). The direction of maximum  $P$  wave velocity, which is parallel to the flow direction ( $X$  direction), is also the most diffusive direction and the direction of minimum  $P$  wave velocity corresponds to the less diffusive direction. Since the anisotropy intensity for both  $P$  wave propagation and thermal diffusivity depends directly on the olivine CPO, the samples with greatest anisotropy for the acoustic properties have also the greatest anisotropy for the thermal diffusivity. Thus a link exists between deformation of mantle rocks as probed

by measurements of the anisotropy of seismic velocities (e.g.,  $Pn$  anisotropy,  $SKS$  splitting) and anisotropy of thermal diffusivity. However, for all samples, the  $P$  wave velocity anisotropy is significantly lower than the thermal diffusivity anisotropy.

[15] In conclusion, petrophysical modeling suggests that, under ambient conditions, upper mantle rocks retain one third to one half of the anisotropy of thermal diffusivity of the olivine single crystal, depending on the strength of olivine crystallographic fabric and pyroxenes content. Heat diffusion is the fastest parallel to the direction of the olivine [100] concentration, i.e., parallel to the flow direction, and slowest perpendicular to the foliation plane. However, these models only consider the effect of the crystallographic orientation of the constituent phases on the whole rock thermal diffusivity. To investigate the influence of other parameters, such as heat dispersion at grain boundaries, crystalline imperfections, or microcracks, as well as the effect of pressure and temperature, on thermal diffusivity, we measured the thermal diffusivity of these rocks under increasing temperature (ambient pressure, up to  $1000^\circ\text{C}$ ), and increasing pressure (ambient temperature, up to 1 GPa). For each sample, we evaluated the anisotropy of thermal diffusivity by measuring the thermal diffusivity parallel to the lineation ( $X$  direction, in which the highest diffusivity is expected), normal to foliation ( $Z$  direction, the lowest diffusivity direction) and, in some samples, normal to the lineation within the foliation plane (along the  $Y$  direction).

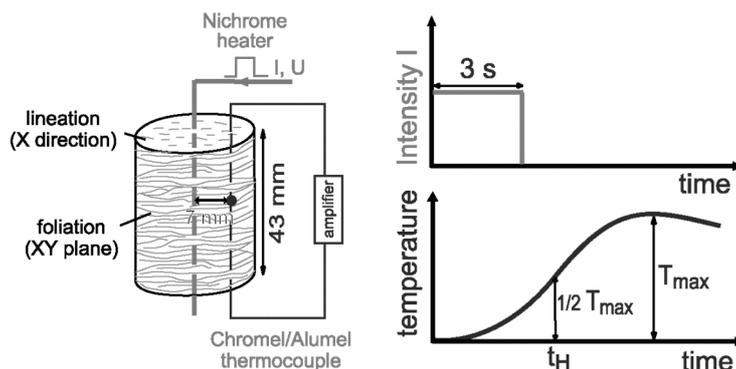
## 4. Thermal Diffusivity Measurements

### 4.1. Method and Errors Considerations

[16] A finite pulse method in cylindrical geometry is used to determine thermal diffusivity of rock cores with 27 mm in diameter and 43 mm length [Seipold, 1988]. A pulse of 3 s in duration and energy of  $\sim 80 \text{ J}$  is generated at the core axis by means of a Nichrome heater of 0.2 mm diameter. It propagates radially and is recorded by a chromel-alumel thermocouple placed at a distance  $d$  of 7 mm from the core axis. The temperature response is measured every 0.1 s during 70 s. The temperature evolution is fitted by a polynomial function from which the half-time value  $t_H$  the time span to reach half of the maximum temperature rise, is evaluated. Thermal diffusivity  $D$  is then determined using equation (1) [Seipold, 1988, equation 7], which is derived from the theoretical description of the radial propagation of a zero-length heat pulse in an infinite cylindrical sample [Carslaw and Jaeger, 1959]:

$$D = \frac{d^2}{10.77t_H - 16.55}. \quad (1)$$

**Figure 2.** (opposite) Olivine and enstatite crystal preferred orientations and calculated three-dimensional thermal diffusivity, phonon velocity, and  $P$  wave velocity distributions for each sample. Lower hemisphere stereographic projections. Solid lines mark the foliation ( $XY$  plane), and the lineation ( $X$  direction) is horizontal. In the crystal preferred orientation stereoplots,  $n$  represents the number of measured grains, contours intervals are at 0.5 multiples of a uniform distribution, and inverse log shading varies from white (minimum density) to black (maximum density indicated by the solid square). Thermal diffusivity plots are contoured at  $0.5 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  intervals. Phonon and  $P$  wave velocities are contoured at  $0.1 \text{ km s}^{-1}$  intervals. Anisotropy is defined by  $(D_{\max} - D_{\min})/D_{\text{mean}}$  in %.



**Figure 3.** Scheme of the transient method used to measure thermal diffusivity of rocks as a function of the structural direction (the  $X$  direction in this case).

Since heat transfer takes place essentially radially from the core axis, this method is well adapted for the measurement of the thermal diffusivity in an anisotropic medium (Figure 3). In order to determine the three eigenvalues of the thermal diffusivity tensor, we used at least three cores for each sample and varied the coring direction and the position of thermocouple so that in each core the direction heat wire–thermocouple is parallel to one of the main axes of structural reference frame ( $X$ ,  $Y$ , or  $Z$ ).

[17] In high-temperature measurements, a thick-walled Macor container surrounds the sample in order to prevent a drastic step in thermal properties at the sample boundary and thermal convection. It also limits the generation of cracks through the sample at high temperatures. A three-zone furnace ensures a homogeneous temperature within the sample. High-pressure experiments were conducted in an oil pressure device, which insures perfectly hydrostatic conditions. Sample and oil are placed in a high-pressure vessel with an inner diameter of 40.5 mm. A sheet of elastic polyurethane covers the sample surface in order to prevent the penetration of the silicon oil (pressure medium).

[18] Transient thermal diffusivity measurements, like the one we used in this study, are submitted to several kinds of uncertainties. The most important one results from an inaccuracy in the evaluation of the distance between heater and thermocouple,  $d$ , because thermal diffusivity is proportional to the square of this distance (equation (1)). In our device, the position of the heater is known with an accuracy of less than 0.1 mm. Thus  $d$  depends on the position, the size and the type of thermocouple (sheathed or not). In high-temperature experiments, in which sheathed thermocouples of 0.2 mm in diameter were used, the position of thermocouple is known with an uncertainty of  $\sim 0.1$  mm, which lead to an error of 1.5% on  $d$  and of 3% on the thermal diffusivity measurement. In high-pressure experiments, hand-made thermocouples were used. This results in an additional error source, because the junction between the chromel and alumel wires may not be exactly in contact with the rock, leading to a systematic underestimation of the thermal diffusivity. Analyses of the cores at the end of the experiments show that the distance between the rock and the thermocouple is generally lower than 0.2 mm, which in average leads to a systematic underestimation of the thermal diffusivity 6%. However, it is important to note that the

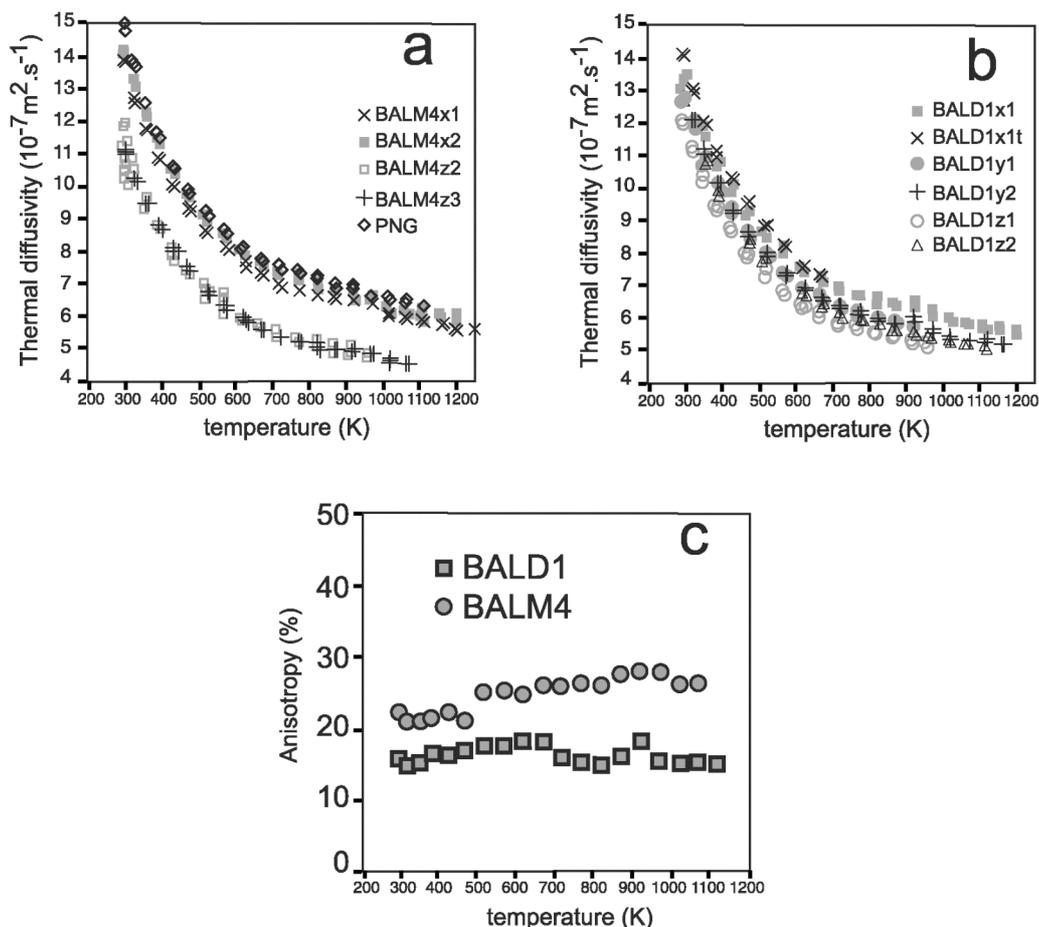
uncertainty in the determination of the heater-thermocouple distance is independent of temperature or pressure and does not affect temperature or pressure derivatives. Effects of thermal expansion [Bouhifd *et al.*, 1996] and compressibility [Abramson *et al.*, 1997] on the heater-thermocouple distance are found to be negligible.

[19] Uncertainties due to the electronic noise, data acquisition, as well as errors due to failure to reach thermal equilibrium within the sample, are more difficult to quantify. In order to evaluate this uncertainty, at each temperature or pressure step we performed at least three successive measurements, spaced by five minutes in order to return to thermal equilibrium within the sample. Scatter of these three measurements gives a good estimation of this uncertainty. Finally, when it was possible, two series of measurements with different cores were conducted in each direction, in order to test data reproducibility and the representativity of the measurement.

#### 4.2. Thermal Cracking

[20] At ambient conditions, the present method has been thoroughly tested using standard materials like Macor and Pyroceram. In addition, thermal diffusivity data on rocks have been tested by comparison with measurements performed at the Geophysical Survey of Finland [Kukkonen *et al.*, 1999]. However, at high temperature/ambient pressure conditions, thermally induced cracks caused by mismatches in thermal expansivities between neighboring crystals (e.g., anisotropic thermal expansion in olivine grains of different orientations) may artificially lower the thermal transport properties of the rock sample. Thus, in absence of experiments at both high-pressure/high-temperature conditions, the absolute accuracy of the present measurements at high temperature is an unproven assertion, and the high-temperature measurements may underestimate the upper mantle thermal diffusivity.

[21] However, the reproducibility of the measurements in successive high-temperature experiments as well as a careful examination of the observed temperature dependence of the thermal diffusivity and anisotropy provide some indirect evidence, discussed below, that thermal cracking has not substantially affected the present high-temperature measurements. In addition, we use a two-step measuring procedure that should allow a rough estimate of the effect of thermally



**Figure 4.** Thermal diffusivity as a function of temperature for (a) BALM4 (in the  $X$  and  $Z$  directions of the structural reference frame) and PNG (in the  $X$  direction) and for (b) BALD1 (in the  $X$ ,  $Y$ , and  $Z$  directions). (c) Anisotropy of thermal diffusivity as a function of temperature for samples BALM4 and BALD1.

induced cracks on the measured thermal diffusivities. The thermal diffusivity is measured in a first run-up to 850–950 K. Then the temperature is lowered to ambient conditions and a second run is performed up to the maximum temperature (1100–1250 K). In the present experiments, it was always observed that, although the measured diffusivities at ambient conditions are lower than in the first run, at the final temperature of the first run the measured thermal diffusivities vary by <3%. This systematic observation suggests that under increasing temperature conditions, thermally induced cracks probably remain closed and hence do not affect significantly the thermal transport properties of rocks [Seipold, 1998].

#### 4.3. Results

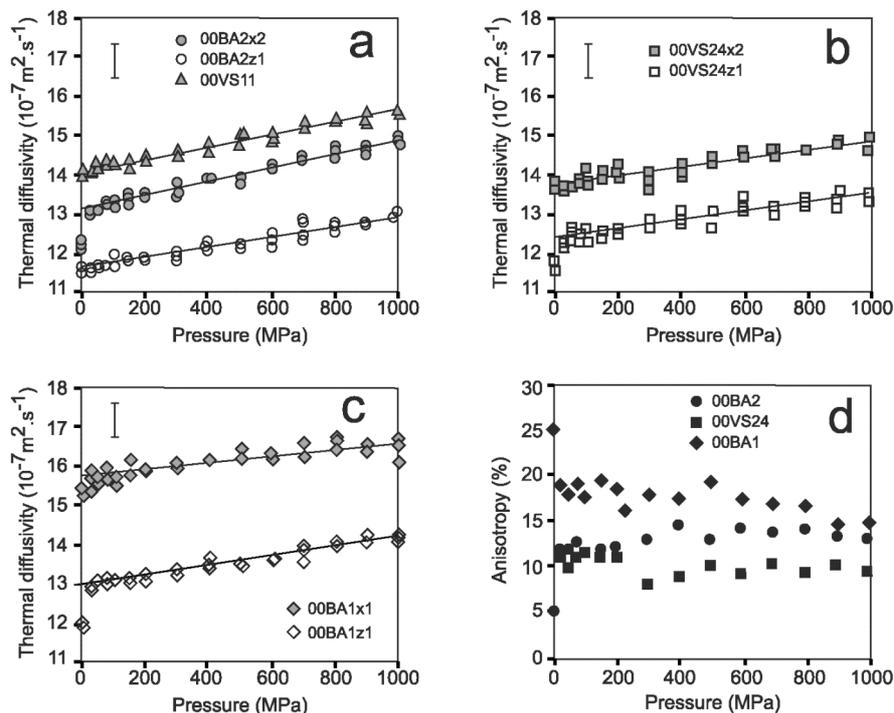
[22] Thermal diffusivity of eleven cores from three samples: two lherzolites (BALM4 and BALD1) and one harzburgite (PNG), has been measured under ambient pressure and temperatures ranging from 290 K and 1250 K (Figure 4). A full evaluation of the thermal diffusivity tensor (measurements in the  $X$ ,  $Y$ , and  $Z$  direction) has only been possible for

BALD1. Lack of material limited the investigation of BALM4 to measurements in the maximum and minimum diffusivity directions ( $X$  and  $Z$ , respectively) and of PNG to the  $X$  direction. The weak scatter of the successive measurements at each temperature step as well as of the reproducibility tests indicates that errors due to electronic noise or thermal disequilibria are low (<1%). The reproducibility of thermal diffusivity measurements in a given direction for different samples is indirect evidence that thermal cracking does not affect substantially the high-temperature measurements, since this process should vary from sample to sample.

[23] Analysis of this data set highlights that thermal diffusivity of mantle rocks is anisotropic. Heat diffusion is the fastest parallel to the lineation ( $X$  direction) and the slowest normal to the foliation ( $Z$  direction) under the entire studied temperature range. Maximum and minimum thermal diffusivities are consistent from sample to sample. Moreover, all samples, independent on the measurement direction, display a similar temperature dependence: a strong decrease of thermal diffusivity up to 500–600 K

ECV 1 - 8

GIBERT ET AL.: THERMAL DIFFUSIVITY OF UPPER MANTLE ROCKS



**Figure 5.** Thermal diffusivity measured as a function of pressure for (a) 00BA2 and 00VS11, (b) 00VS24, and (c) 00BA1. For each curve, the linear fit is shown. Error bars due to uncertainty on the thermocouple position are of 6%. (d) Anisotropy of thermal diffusivity as a function of pressure for 00BA2, 00VS24, and 00BA1.

that is followed by a slower decrease up to 1250 K. The weak decrease of thermal diffusivity in the high temperature range suggests that thermal cracking does not affect significantly the high-temperature measurements, since optical analysis of samples issued from high- and low-temperature experiments shows that this process is most active up to temperatures higher than 600 K. Thermal diffusivity anisotropy increases slightly at high temperature (Figure 4c). It is stronger for BALM4 (25%) than for BALD1 (17%).

[24] Thermal diffusivity measurements under ambient temperature and pressures varying from 0 to 1 GPa have been performed on two lherzolites (00BA1 and 00BA2) and two dunites (00VS24 and 00VS11). Except for 00VS11, only measured in the  $X$  direction, two different cores have been used for measurements of the thermal diffusivity parallel to the  $X$  and to the  $Z$  directions (Figure 5). These measurements clearly show (1) a preservation of the thermal diffusivity anisotropy up to 1000 MPa and (2) a weak linear dependence on pressure between 25 and 1000 MPa.

[25] The higher scatter of the three successive measurements performed at each pressure step highlights the higher uncertainty of the high-pressure data compared to the high-temperature results. This scatter is always higher at ambient temperature (even in the high-temperature device), when thermal diffusivity is maximum and thermal equilibrium is more difficult to achieve. However, the higher scatter of this data is also due to the inherent difficulty of the high-

pressure work (delicate electrical connections, etc.). Finally, as discussed in the previous section, an imperfect contact between the sample and the hand-made thermocouples used in the high-pressure measurement may also lead to underestimation of thermal diffusivity. Indeed, the weak (<10%) nonlinear increase of thermal diffusivity observed for some samples (00BA1Z1, 00BA2X1, and 00VS24Z1) between 0 and 25 MPa may be due to a bad contact between rock and thermocouple at low pressure. The higher uncertainty of these high-pressure data may also explain the slightly different anisotropy variation (Figure 5d) as a function of pressure from sample to sample: the anisotropy remains constant for 00VS24, increases for 00BA2, and decreases for 00BA1. Absolute values of thermal diffusivity follow the following trend:  $D_{00BA1x} > D_{00VS24x} > D_{00BA2x}$  and  $D_{00BA1z} > D_{00VS24z} > D_{00BA2z}$ .

## 5. Comparison Between Thermal Diffusivities Predicted by Petrophysical Modeling and Measured Values

[26] Analysis of the present thermal diffusivity data in the light of the petrophysical modeling predictions clearly shows that the thermal diffusivity anisotropy of upper mantle rocks is controlled by the olivine crystals preferred orientation. Thermal diffusivity anisotropy estimated from measurements in the high-temperature device is in good agreement with model predictions. Thermal diffusivity anisotropy is stronger for BALM4 than for BALD1. More-

**Table 3.** Previous Measurements of Thermal Diffusivity (or Conductivity) of Mantle Materials at Ambient Conditions

Sample	Method	Thermal Diffusivity, $10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	Ref <sup>a</sup>
Horoman dunite (oriented)	angstrom (linear)	X direction 18.5	1
	angstrom (linear)	Y direction 14.7	1
		Z direction 13.6	
Lherzolithe 12	hot wire (transient) uncertainty 6%	9.5	2
Lherzolithe 4	hot wire (transient)	12.3	2
Olivine powder Fo91	needle probe method	18.1	4
Carolina dunite 1		13.0 (273 K)	3
Muscovite dunite	hot wire (steady)	17.4 (273 K)	3
Single crystal 1	uncertainty unknown	20.2 (273 K)	3
Single crystal 2		33.4 (273 K)	3
Olivine single crystals Fo91.6	angstrom (linear) uncertainty of 5–0%	[100] axis 21.8	1
Olivine single crystals Fo91.6		[010] axis 10.7	1
Olivine single crystals Fo91.6		[001] axis 17.1	1
Olivine single crystal Fo82	angstrom (linear) uncertainty 5–10%	[001] axis 18.5	(5)

<sup>a</sup>References: 1, *Kobayashi* [1974]; 2, *Horai and Susaki* [1989]; 3, *Beck et al.* [1978]; 4, *Horai* [1971]; and 5, *Kanamori et al.* [1968].

over, PNG, whose thermal diffusivity was only measured in the  $X$  direction displays the highest diffusivity; indeed its olivine CPO is the strongest. In fact, in these experiments, maximum and minimum thermal diffusivities are consistent from sample to sample, and their relative magnitude also matches model predictions:  $D_{\text{PNG}} > D_{\text{BALM4X}} = D_{\text{BALD1X}} > D_{\text{BALDY}} > D_{\text{BALD1Z}} > D_{\text{BALM4X}}$ .

[27] In high-pressure experiments, the relationship of model-measurements is less clear. For instance, although the dunite 00VS24 was expected to have a higher diffusivity than the lherzolite 00BA1, experiments show the contrary. In addition, measured anisotropy for 00VS24 is much lower than the predicted values (Figure 5d). The higher uncertainties in the high-pressure experiments may explain this disagreement between model and observations. Another explanation may invoke the short distance heater-thermocouple (7 mm) relative to the mean grain size (0.5 mm); the measurements sample only 10–20 grains, while the models integrate between 300 and 800 grains. Thus it is possible that a measurement may not be exactly representative of the measured crystallographic fabric and modal composition, especially for samples whose CPO is not very strong, like 00VS24, or whose grain size is large, like the dunites. However, the high-temperature experiments, for which two series of measurements were conducted on two different cores of the same direction, show a good reproducibility (Figure 4).

[28] In spite of the relatively good agreement between model and measurements, measured thermal diffusivity under ambient conditions is lower than model predictions by ~20–30%. Open microfractures may hinder heat transfer (or seismic wave propagation) and thus explain such a difference between the modeled physical property and its measurement on a real rock. Closure of these air-filled cracks is known to lead to a nonlinear increase of thermal diffusivity between 0 and 50–100 MPa [*Durham et al.*, 1987; *Horai and Susaki*, 1989; *Seipold et al.*, 1998]. However, in the present high-pressure data, this nonlinear increase is absent or very weak (Figure 5); the slightly nonlinear increase in thermal diffusivity between 0 and 25 MPa observed on some measurements is probably due to a bad contact between the thermocouple and the sample. Connected porosity measured on our samples is very low (<0.3%), suggesting that open cracks are probably absent.

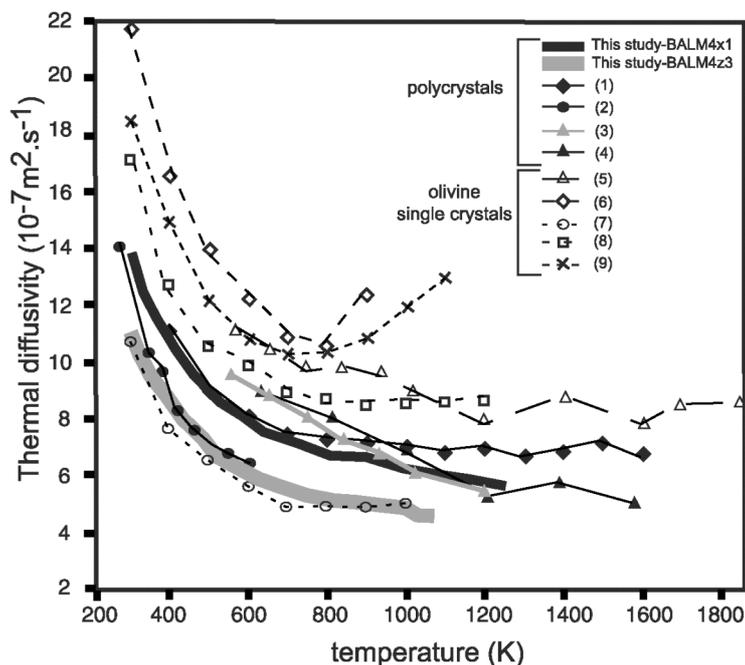
In consequence, the discrepancy between measurements and models cannot be explained by open microfractures. Two other reasons may be invoked to explain this discrepancy. First, the thermal diffusivity tensors given by *Chai et al.* [1996] may overestimate the actual olivine thermal diffusivity. Second, grain boundaries, crystal imperfections or microporosity, which are not considered in the models, may result in dispersion of thermal waves and hence decrease the thermal diffusivity of our polycrystalline samples.

[29] Analysis of previous experimental data on thermal transport properties of mantle materials shows that thermal diffusivity values obtained on rocks or polycrystalline aggregates are generally lower than single crystal values. Measurements on polycrystalline samples are in good agreement with our data over a large range of temperatures (Table 3 and Figure 6). On the other hand, most olivine single-crystal data at ambient conditions are in relatively good agreement with the thermal diffusivity tensor used in the petrophysical models (Table 2). Anisotropy estimations in the present experiments are in good agreement with previous data for a dunite by *Kobayashi* [1974], which shows an anisotropy of 31% and 23% for thermal diffusivity and thermal conductivity measurements, respectively. This dunite has a similar olivine CPO to the one displayed by PNG [*Kasahara et al.*, 1968] for which 28.7% of thermal diffusivity anisotropy was predicted. Preservation of the anisotropy at high temperature in the present experiments is also in good agreement with data obtained on single crystals at high temperatures [*Kobayashi*, 1974], suggesting that thermal cracking, which is also anisotropic (most cracks are parallel to (010), since for olivine the [010] direction displays the highest thermal expansivity [*Bouhifd et al.*, 1996]), does not affect the evaluation of the anisotropy at high temperature. Thus the thermal diffusivity anisotropy measured at the rock scale is essentially due to the intrinsic thermal diffusivity anisotropy of its constituent minerals.

[30] In conclusion, the present study as well as previous data on mantle rocks highlights a discrepancy between the absolute values of thermal transport properties measured in single crystal and whole rocks at ambient conditions. This discrepancy may result from the large variety of methods used to measure thermal diffusivity/conductivity of single

ECV 1 - 10

GIBERT ET AL.: THERMAL DIFFUSIVITY OF UPPER MANTLE ROCKS



**Figure 6.** Comparison between thermal diffusivities obtained in the present study (BALM4 was chosen as the most representative sample) and a compilation of previous thermal diffusivity (or converted conductivity) measurements at high temperature. Open symbols/dashed lines represent measurements conducted on olivine single crystals, solid symbols/solid lines concern measurements performed on natural rocks or polycrystalline sintered aggregates, heavy solid lines show the present measurements (BALM4). References (indicated in parentheses in legend) are 1, *Katsura* [1995]; 2, *Beck et al.* [1978], Carolina dunite 1; 3, *Schatz and Simmons* [1972], Twin Sisters dunite; 4, *Schatz and Simmons* [1972], sintered forsterite; 5, *Schatz and Simmons* [1972], olivine single crystal [010] axis; 6, *Kobayashi* [1974], olivine single crystal  $-[100]$  axis; 7, *Kobayashi* [1974], olivine single crystal  $-[010]$  axis; 8, *Kobayashi* [1974], olivine single crystal  $-[001]$  axis; and 9, *Kanamori et al.* [1968], olivine single crystal  $-[001]$  axis.

crystals and polycrystalline samples. However, petrophysical models are able to predict the thermal diffusivity anisotropy of mantle rocks.

## 6. Temperature and Pressure Dependencies of the Thermal Diffusivity

### 6.1. Pressure Dependence

[31] Studies in a wide range of crystalline rocks show that after closure of microcracks, variation of thermal diffusivity with pressure is linear. This linear dependence on pressure is usually interpreted as an intrinsic effect of the pressure on the crystal structure of the rock-forming minerals. In order to compare the present results to previous studies, the rate of linear increase  $r$  is calculated by fitting each series of measurements for  $P > 100$  MPa (Figure 5) by

$$D = D_0(1 + rP) \quad (2)$$

with pressure  $P$  in GPa.

[32] The parameters  $r$  obtained in the present study ( $5.5$ – $13\%$   $\text{GPa}^{-1}$ ) are in the same range than previous data for dunites and olivine single crystals at high pressure

**Table 4.** Rate of Linear Thermal Diffusivity Increase With Pressure at Room Temperature

Sample	Maximum Pressure, GPa	Calculated $r$ , % $\text{GPa}^{-1}$	Ref <sup>a</sup>
Single crystal 1	4.95	8.1	3
San Carlos olivine Fo89	4.8	4	6
Sintered forsterite	5	18 (at 700 K)	1
Fo91 sintered aggregate	2	11	2
Fo89 sintered aggregate	9	4.9 (400 K)	5
Carolina dunite	4.95	5.2	3
Muskox dunite	4.95	4.7	3
Lherzolith 4	1.2	11.9	4
BA2x1		13	
BA2z2		11.3	
VS24x2		8.1	
VS24z1	1	9.1	8
00BA1x1		5.5%	
00BA1z2		10.1%	
00VS11x1		11.2%	
Granites		$12 \pm 5\%$	7

<sup>a</sup>References: 1, *Fujisawa et al.* [1968]; 2, *Staudacher* [1973]; 3, *Beck et al.* [1978]; 4, *Horai and Susaki* [1989]; 5, *Katsura* [1995]; 6, *Zaug et al.* [1992]; 7, *Seipold* [1990]; and 8, this study.

**Table 5.** Photon Mean Free Path Length Estimates

Sample	Photon Mean Free Path Length	Ref <sup>a</sup>
Sintered forsterite, grain size = 15 $\mu\text{m}$	from 2 mm at 543 K to 1 mm at 1204 K	1
Twin sister dunite Fo94	from 0.9 mm at 554 K to 0.3 mm at 1200 K	1
Olivine single crystal Fo92	from 15 mm at 565 K to 1.7mm at 1215 K	1
Olivine single crystal Fo88	from 3.7 mm at 500 K to 1.49 mm at 1300 K	2

<sup>a</sup>References: 1, *Schatz and Simmons* [1972]; and 2, *Fukao et al.* [1968].

(Table 4). However, the present measurements on naturally deformed mantle rocks show a higher rate of increase of thermal diffusivity with pressure than theoretical calculations conducted for olivine ( $r = 4\% \text{ GPa}^{-1}$  [*Katsura, 1995; Hofmeister, 1999*]). Higher-pressure derivatives suggest that other processes than the compressibility of crystals affect the thermal diffusivity of our samples. In naturally deformed peridotites like the ones used in this study, micropores with an aspect ratio close to unity may remain open at high pressures ( $>100 \text{ MPa}$ ). Their closure at higher pressures may contribute to a higher rate  $r$  and to a scatter of  $r$  from sample to sample. Presence of micropores may also explain why the absolute values of thermal diffusivities are lower than the modeled ones, even at 1 GPa. Heterogeneity of void spaces or of the nonconnected porosity may also explain the observation that pressure derivative is dependent on the rock sample used, but independent of the measured direction ( $X$  or  $Z$ ). This behavior is common in investigations of pressure dependence of thermal diffusivity or conductivity of crystalline rocks or sintered aggregates [*Seipold, 1990, 2001*].

## 6.2. Temperature Dependence

[33] Propagation of heat in dielectric solids is usually due to two different physical processes. The first is related to the vibrations of the atomic lattice, or, in a quantum mechanics point of view, to phonon propagation processes and is active over the entire temperature range. The second process concerns thermal radiation and interaction of photons with matter and operates at temperatures higher than 500K [*Schatz and Simmons, 1972; Shankland et al., 1979*]. These two effects are responsible for the lattice diffusivity  $D_L$  and the radiative diffusivity  $D_R$ , respectively. Thus the thermal diffusivity  $D(T)$  measured at a given temperature ( $T$ ) is expected to be equal to

$$D(T) = D_L(T) + D_R(T). \quad (3)$$

In thermal diffusivity measurements under increasing temperature, the lattice contribution is usually well constrained [e.g., *Beck et al., 1978; Holt, 1975; Kobayashi, 1974*]. The radiative heat transport is more difficult to measure because it depends strongly on the experimental conditions. An accurate measure of the radiative contribution to the total thermal diffusivity requires that radiative equilibrium must be reached during the experiments. This means that effective radiative diffusion processes through the sample will only be recorded if the heat transfer path is longer than the mean free path of photons. Moreover, the thermal gradient applied to the material must be as low as possible in order to have a nearly constant temperature over distances longer than the mean free path of photons, as expected in the mantle. If these conditions are not fulfilled,

two opposite effects are predicted. First, the sample is not heated by the photonic heat transfer and its radiative diffusivity is not measured: the bulk diffusivity is underestimated [*Chui and Gardon, 1969*]. Second, the completely opaque thermocouple is directly heated by radiation and records an artificial increase of temperature, leading to an overestimation of the total thermal diffusivity. It is therefore impossible to interpret the measurement in terms of radiative transport.

[34] The distance over which heat transport is measured in our experiments (7 mm) is higher than the photon mean free path evaluated from previous data on a sintered forsterite aggregate (grain size 10  $\mu\text{m}$ ) or on a dunite [*Schatz and Simmons, 1972*] (Table 5). Photon mean free path measured in polycrystalline samples are significantly lower than the values obtained on single crystals (Table 5). Indeed, spectroscopic measurements conducted on olivine single crystals give an upper bound for the photon mean free path, since they measure the absorption of photons only within the single crystal [*Aronson et al., 1970; Fukao et al., 1968; Shankland et al., 1979*] and do not evaluate the scattering of photons at grain boundaries, which is thought to reduce the photon mean free path [*Pitt and Tozer, 1970*]. Moreover, the higher iron content of the olivine in our samples (Table 1), compared to the sintered forsterite aggregate measured by *Schatz et al.* [1972], should increase the absorption and thus decrease the photon mean free path in our samples [*Burns, 1970*]. Our samples also contain pyroxenes, more absorbing than olivine, which may also reduce the photon mean free path. Finally, the amplitude of the temperature pulse imposed at the axis of the cylinder is low: the temperature elevation registered by the thermocouple is lower than 1.5 K. Thermal gradients within the sample are therefore minimized. In conclusion, the present experiments should be close to radiative equilibrium.

[35] In addition to the radiative equilibrium, chemical conditions prevailing during the experiments are also an important parameter. When an appropriate chemical buffer does not control oxygen fugacity, oxidation of Fe-bearing olivine at high temperature leads to formation of oxide films, characterized by a red coloration of the grains surface. Optical analysis of thin sections of heated samples shows that Fe-oxides films are developed along olivine grain or subgrain boundaries in all samples heated above 900 K. Development of these oxide films may be responsible for an increase in opacity of the samples and underestimation of radiative diffusivity. However, when the grain size is large (as in our samples 0.5–1 mm), probability of photon scattering at grain boundaries is low. Thus, if oxidation is restricted to grain boundaries only, it may not affect the radiative heat transport. Indeed, in *Schatz et al.*'s [1972] measurements, oxidation of the dunite sample is not ac-

companied by a strong decrease of the phonon mean free path length.

### 6.2.1. Lattice Diffusivity

[36] Most theoretical and experimental studies on the temperature dependence of thermal diffusivity of rocks suggest that lattice diffusivity  $D_L$  is inversely proportional to the absolute temperature [Klemens, 1958; Seipold, 1998]. Indeed, the kinetic theory of gases, applied to a phonon gas, implies that

$$D_L = 1/3vl, \quad (4)$$

where  $v$  is the phonon velocity and  $l$  is the mean free path length of the phonons. As the phonon velocity, which is approximated by an average of the acoustic velocities over the three polarizations (Figure 2), is nearly constant with temperature (it decreases by <5% over 1000°C [Isaak, 1992]), the decrease of  $D_L$  with temperature is mainly due to the decrease of the phonon mean free path. Scattering of phonons by crystal imperfections limits the phonon mean free path, but it is assumed to be independent of temperature. On the other hand, phonon-phonon interactions related to the anharmonicity of lattice potential are strongly temperature dependent; they lead to a variation in  $1/T$  of the phonon mean free path [Klemens, 1958]. In consequence, lattice diffusivity can be expressed as

$$D_L(T) = \frac{1}{A + BT}, \quad (5)$$

in which the parameter  $B$  quantifies the phonon-phonon interactions and the parameter  $A$  the interaction of phonons with crystal imperfections, such as point defects, dislocation wall, grain boundaries or microcracks [Seipold, 1998].

[37] However, it has been recently suggested that, although the thermal diffusivity or conductivity of simple solids such as periclase [e.g., Katsura, 1997] follow this law, the thermal conductivity of more complex substances, like silicates, should display a lower temperature dependence, following a  $T^{-a}$  law, where  $a$  is  $\sim 0.33$  for silicates [Hofmeister, 1999]. This prediction is based on the assumption, often discussed [e.g., Harrell et al., 2002; Roufosse and Klemens, 1974], that optic modes of phonons contribute with more than 50% to the total conductivity [Hofmeister, 1999]. As a consequence,  $a$  decreases as the number of optics modes of phonons increases, i.e., as the number of atoms per unit cell increases. On the basis of a calculation of phonons lifetimes, Hofmeister [1999] has proposed that the lattice conductivity  $K_L$  depends on temperature as

$$K_L(T) = K(298) \left( \frac{298}{T} \right)^a \exp \left( - \left( 4\gamma_{th} + \frac{1}{3} \right) \int_{298}^T \alpha(T) dT \right), \quad (6)$$

where  $\gamma_{th}$  is the thermal Grüneisen parameter, taken as equal to 1.2, and  $\alpha(T)$  is the thermal expansion.

[38] The lattice diffusivity is obtained by dividing equation (6) by the term  $\rho(T)C_P(T)$ :

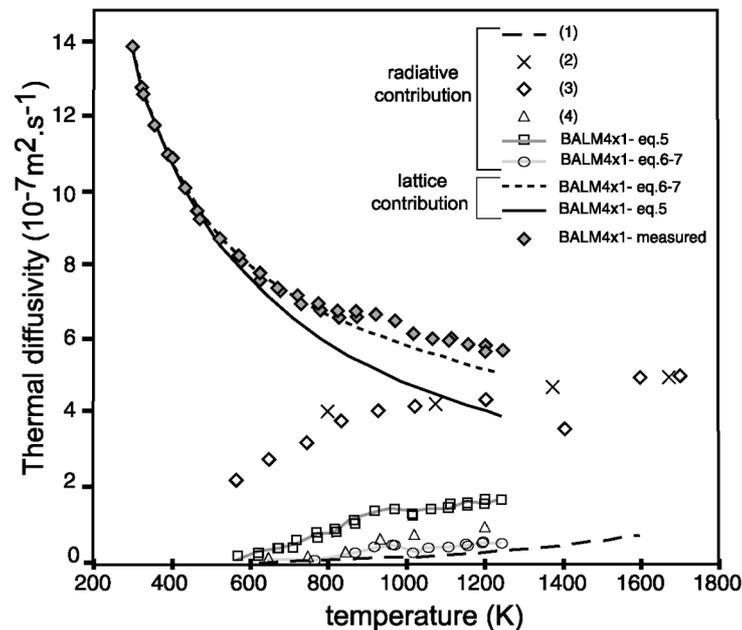
$$D_L(T) = \frac{K_L(T)}{\rho(T)C_P(T)}, \quad (7)$$

where  $\rho(T)$  is the density,  $C_P(T)$  is the heat capacity at constant pressure.

[39] These two laws (equations (5) and (6)) imply a zero value of the lattice thermal diffusivity at infinite temperature. As pointed by Slack [1979], lattice thermal diffusivity in a dielectric solid has a positive lower bound different from zero, since the phonon mean free path (equation (4)) cannot be smaller than a small multiple of the interatomic distance [Harrell et al., 2002]. Nevertheless, these laws are assumed to describe correctly the behavior of the rocks if the lower limit of the phonon mean free path is not reached in the studied temperature. This lower limit is expected to be reached at temperatures close to the melting point of the material [Slack, 1979; Roufosse and Klemens, 1973, 1974]. Thus, for the studied temperature range (<1000°C), the two proposed temperature dependencies may correctly describe the observed temperature dependence of the lattice thermal diffusivity of peridotites.

[40] In order to bound the lattice diffusivity measured in this study, data are fitted at temperatures <520 K, for which the radiative diffusivity is assumed to be negligible, by equation (5) (taken as a lower bound) and equations (6) and (7) (taken as an upper bound) (Figure 7). A Levenberg-Marquardt algorithm that minimizes the chi-square coefficient is used. Fitting parameters and associated mean squared errors are calculated separately for each measurement direction (Table 6). The two fits are equally good at low temperatures. The  $a$  parameters obtained are in good agreement with Hofmeister's [1999] predictions for silicates. The parameters  $A$  and  $B$  are in good agreement with previous studies on peridotites [Seipold, 1998]. The main difference between the two fits appears in the extrapolation of calculated lattice diffusivity to high temperatures (Figure 7).

[41] Analysis of these fitting coefficients is important in order to evaluate the processes of phononic transport, especially anisotropy. Calculated phonon velocities of the studied samples show a weak anisotropy, between 3.4 and 6.1% (Figure 2). Thus the anisotropy of lattice thermal diffusivity is mainly due to an anisotropy of the phonon mean free path length, which must be maximum parallel to the [100] axis of olivine (equation (4)). At the rock scale, this anisotropy may be due to (1) a lower density of crystalline imperfections parallel to the [100] direction or (2) phonon-phonon interactions. In the first case the coefficient  $A$  (equation (5)) should be higher parallel to the [100] direction, while in the second case the temperature dependence, which is characterized by the parameters  $B$  (equation (5)) or  $a$  (equation (6)), should be lower parallel to the [100] direction. The parameter  $A$  varies slightly from sample to sample, and does not display a systematic variation as a function of the structural direction (Table 6). On the other hand, the  $B$  and  $a$  parameters are systematically lower in measurements parallel to the  $X$  direction (Table 6); this accounts for the preservation of the thermal diffusivity anisotropy at high temperature. Therefore phonon-phonon interactions resulting from the anharmonic properties of the olivine lattice control the anisotropy of thermal diffusivity. This conclusion is in agreement with the prediction of the anisotropy of thermal diffusivity at room temperature using a space-dependent Grüneisen parameter, which quantifies the anharmonic properties of a crystallographic lattice [Chai et al., 1996]. The present result confirms that the anisotropy



**Figure 7.** Lattice thermal diffusivity calculated by fitting the measured diffusivity of sample BALM4x1 up to 520 K by equation (5) (dashed line) and equations (6) and (7) (solid line). Radiative components (open squares and circles) were obtained by extrapolating the calculated lattice diffusivity to higher temperatures and evaluating the difference between the measured total diffusivity and the calculated lattice diffusivity. Previous estimates of radiative thermal diffusivity for olivine single crystals and olivine aggregates obtained from spectroscopic determinations [Shankland *et al.*, 1979], modified Angstrom method [Schatz and Simmons, 1972] and infrared reflectivity spectroscopy [Hofmeister, 1999] are presented for comparison. References (indicated in parentheses in legend) are 1, Hofmeister [1999]; 2, Shankland *et al.* [1979]; 3, Schatz and Simmons [1972], olivine single crystal; and 4, Schatz and Simmons [1972], dunite.

of thermal diffusivity observed at the rock scale is essentially controlled by the intrinsic properties of olivine crystals and by the deformation-induced crystal preferred orientations of this mineral.

### 6.2.2. Radiative Contribution

[42] The heat transfer by photons  $D_R$  is usually approximated by the following law:

$$D_R = \frac{16\sigma n^2 T^3}{3\rho C_p} l_R(T), \quad (8)$$

where  $\sigma$  is the Stefan-Boltzmann constant,  $n$  is the refractive index, and  $l_R$  is the photon mean free path length, which is

equal to the inverse of the absorption coefficient and varies with temperature. If the difference between the measured diffusivity and the extrapolated lattice diffusivity represents the radiative diffusivity, it appears that Hofmeister's [1999] approach (equations (6) and (7)) applied to the present results implies that the contribution of the radiative transport to thermal diffusivity is negligible compared to the lattice diffusivity (<10% at 1250 K). According to equation (8), this low contribution of radiative heat transport indicates that the constitutive minerals of these samples absorb most thermal radiation and that extrapolation of thermal diffusivity values to higher temperatures conditions is weakly affected by radiative transport, in spite of the strong temperature dependence of the latter. If the radiative

**Table 6.** Estimated Fitting Parameters for the Lattice Diffusivity up to 520 K Using Equation (5) for  $A$  and  $B$  and Equations (6) and (7) for  $a$ <sup>a</sup>

Data	$A, 10^5 \text{ m}^{-2} \text{ s}$	$B, 10^3 \text{ m}^{-2} \text{ s K}^{-1}$	$a$
Average in the $X$ direction	1.52±0.3 (0.11)	1.9±0.07 (0.11)	0.31±0.004 (0.04)
Average in the $Y$ direction	1.1±0.2 (0.09)	2.23±0.05 (0.09)	0.37±0.01 (0.02)
Average in the $Z$ direction	1.33±0.1 (0.07)	2.45±0.1 (0.07)	0.36±0.02 (0.08)
BALM4x1 (representative sample)	1.16 (0.139)	1.92 (0.139)	0.317 (0.036)

<sup>a</sup>These parameters represent an average over all measurements of this study, in each direction, with standard deviation. Values in parentheses are the average mean squared error associated with each fit. Also shown are the fitting parameters of BALM4x1, chosen as the most representative sample.

diffusivity is evaluated from the lattice diffusivity calculated in equation (5), the radiative heat transport accounts for 30% of the total diffusivity at 1250 K and its contribution has to be considered when extrapolating thermal diffusivity values to higher temperatures. Additional independent measurements of lattice or radiative contributions are required to discriminate these two models.

[43] The radiative diffusivities estimated in the present experiments using the two models bound the radiative diffusivity measured in a dunite by *Schatz and Simmons* [1972] (Figure 7), where radiative equilibrium was expected due to the length of the sample ( $\sim 10$  mm). The higher thermal diffusivity values observed by *Katsura* [1995] experiments at temperatures  $>1000$  K may be due to the small samples used, which did not allow thermal equilibrium (Figure 6). The discrepancy between the present results and previous data on single crystals at high temperature is higher, but it is mainly correlated to the difference on thermal diffusivity estimations at ambient conditions (discussed previously). However, some data show a strong increase of the total diffusivity at high temperature, suggesting a strong radiative contribution [*Kanamori et al.*, 1968] (Figure 6), but the small samples used in this study may have hindered the radiative equilibrium. On the other hand, other studies display a flattening of the total thermal diffusivity curve, suggesting a lower radiative contribution, in agreement with a decrease of the photon mean free path with temperature [*Schatz and Simmons*, 1972]. Finally, calculations based on optical absorption spectra of olivine suggest a strong radiative contribution [*Fukao et al.*, 1968; *Shankland et al.*, 1979], in disagreement with the total thermal diffusivity measured in the present experiments (Figure 7). However, the low-temperature derivatives of the radiative diffusivity deduced from these spectroscopic experiments are in agreement with our measurements (Figure 7), which confirms that the absorption coefficient of olivine increases strongly at high temperature (equation (8)).

## 7. Conclusion

[44] Numerical modeling of the three dimensional distribution of the thermal diffusivity of seven peridotites rocks suggests that the crystal preferred orientation of olivine formed by solid-state flow in the upper mantle induces a strong anisotropy of thermal diffusivity. Thermal diffusivity is up to 25% higher parallel to the flow direction (i.e., parallel to the olivine [100] axes concentration) than normal to the foliation plane (i.e., parallel to the [010] axes concentration). Measurements of the thermal diffusivity of these peridotites under increasing pressure and temperature show that this anisotropy is preserved at the rock scale under high-temperature and high-pressure conditions. Analysis of the temperature and pressure dependencies of thermal diffusivity confirms that the anisotropy observed at the rock scale is essentially controlled by the intrinsic properties of the olivine crystal and by the deformation-induced crystal preferred orientation of this mineral. Minimization of radiative disequilibrium in the present experiments allows the measurement of the total thermal diffusivity. We used two different lattice diffusivity models to estimate the radiative contribution at high temperature. In both cases, the radiative

contribution is lower than suggested by spectroscopic data on olivine single crystals. However, extrapolation of the present data to higher temperature conditions depends on the model: the radiative contribution to heat transport is important if the lattice contribution is inversely dependent on temperature, but it may be negligible if optic modes of phonons contribute significantly to heat transfer at high temperature.

[45] Although the measured anisotropies are consistent with the predictions of the petrophysical models (15–25% of anisotropy), measured thermal diffusivities are 20–30% lower than model predictions. This discrepancy between measurements and model predictions cannot be explained by the presence of cracks in the samples because the closure of these void spaces, evaluated through the high-pressure experiments, is found to have a negligible effect on measured thermal diffusivities. Previous data on mantle rocks also highlight a discrepancy between single crystal and whole rock thermal transport properties at ambient conditions. This suggests that the discrepancy may result from the large variety of methods used to measure thermal diffusivity/conductivity of single crystals and polycrystalline samples.

[46] Deformation-induced olivine crystal preferred orientations in the upper mantle results in both an anisotropic heat transfer and seismic wave propagation. Measurements of seismic anisotropy, such as shear wave splitting, imply that deformation-induced olivine preferred orientations are consistent at large scales ( $>50$  km) in the upper mantle. Thus heat transport in the upper mantle should be anisotropic at these scales. A thermal anomaly should propagate faster parallel to the olivine [100] preferred orientation, i.e., parallel to the fast *S* wave polarization direction (or the fastest *P* wave velocity direction) and slower parallel to the olivine [010] preferred orientation, i.e., parallel to the slowest *P* wave velocity direction. Since the upper mantle rheology is strongly temperature-dependent, faster heat transport parallel to the flow direction, to which is associated the preferred orientations of olivine [100] axes in the upper mantle, may induce localization of deformation. Within the lithospheric mantle, it may add to a CPO-induced mechanical anisotropy [*Tommasi and Vauchez*, 2001] to favor the reactivation of preexisting structures.

[47] **Acknowledgments.** We thank J. M. Brown and W. B. Durham for their constructive reviews. We thank Cornelia Karger and Rainer Becker for their participation in the measurements and Christophe Nevado for the high-quality polished thin sections. Matteo Ferrero (Nuova Cives S.R.L.) and Françoise Boudier are thanked for providing the samples from Baldissero and Papua New Guinea, respectively. The Laboratoire de Tectonophysique's EBSD system was funded by the CNRS/INSU, Université de Montpellier II, and NSF project "Anatomy of an Archean craton". This work was supported by the CNRS/INSU program "Action Thématique Innovante".

## References

- Abramson, E. H., J. M. Brown, L. J. Slutsky, and J. Zaugg, The elastic constants of San Carlos olivine to 17 GPa, *J. Geophys. Res.*, 102(B6), 12,253–12,263, 1997.
- Aronson, J. R., L. H. Bellotti, S. W. Eckroad, A. G. Emslie, R. K. McConnell, and P. C. Von Thuna, Infrared spectra and radiative thermal conductivity of minerals at high temperatures, *J. Geophys. Res.*, 75(17), 3443–3456, 1970.
- Beck, A. E., D. M. Darbha, and H. H. Schloessin, Lattice conductivities of single-crystal and polycrystalline materials at mantle pressures and temperatures, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 17, 35–53, 1978.

- Bouhifd, M. A., D. Andraut, G. Fiquet, and P. Richet, Thermal expansion of forsterite up to the melting point, *Geophys. Res. Lett.*, 23(10), 1143–1146, 1996.
- Bunge, H. J., *Texture Analysis in Materials Sciences*, 593 pp., Butterworths, London, 1982.
- Burns, R. G., *Mineralogical Application of Crystal Field Theory*, Cambridge Univ. Press, New York, 1970.
- Carlsaw, N. S., and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford Univ. Press, New York, 1959.
- Chai, M., J. M. Brown, and L. J. Slutsky, Thermal diffusivity of mantle minerals, *Phys. Chem. Miner.*, 23, 470–475, 1996.
- Chui, G. K., and R. Gardon, Interaction of radiation and conduction in glass, *J. Am. Ceram. Soc.*, 52(10), 548–553, 1969.
- Duffy, T. S., and M. T. Vaughan, Elasticity of enstatite and its relationships to crystal structure, *J. Geophys. Res.*, 93(B1), 383–391, 1988.
- Durham, W. B., V. V. Mirkovich, and H. C. Heard, Thermal diffusivity of igneous rocks at elevated pressure and temperature, *J. Geophys. Res.*, 92(B11), 11,615–11,634, 1987.
- Fujisawa, H., N. Fujii, H. Mizutani, H. Kanamori, and S. Akimoto, Thermal diffusivity of  $Mg_2SiO_4$ ,  $Fe_2SiO_4$ , and NaCl at high pressures and temperatures, *J. Geophys. Res.*, 73(14), 4727–4733, 1968.
- Fukao, Y., H. Mizutani, and S. Uyeda, Optical absorption spectra at high temperatures and radiative thermal conductivity of olivines, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 1, 57–62, 1968.
- Harrell, M., J. M. Brown, and E. H. Abramson, Anisotropic lattice thermal conductivity of upper mantle minerals at high temperature, *Eos Trans. AGU*, 83(47), Fall Meet. Suppl., Abstract MR11A-13, 2002.
- Hofmeister, A. M., Mantle values of thermal conductivity and the geotherm from phonon lifetimes, *Science*, 283, 1699–1706, 1999.
- Holt, J. B., Thermal diffusivity of olivine, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 27, 404–408, 1975.
- Horai, K., Thermal conductivity of rock-forming minerals, *J. Geophys. Res.*, 76(5), 1278–1308, 1971.
- Horai, K., and J. Susaki, The effect of pressure on the thermal conductivity of silicate rocks up to 12 kbar, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 55, 292–305, 1989.
- Isaak, D. G., temperature elasticity of iron-bearing olivines, *J. Geophys. Res.*, 97(B2), 1871–1885, 1992.
- Kanamori, H., N. Fujii, and H. Mizutani, Thermal diffusivity measurement of rock-forming minerals from 300°K to 1100°K, *J. Geophys. Res.*, 73(2), 595–605, 1968.
- Kasahara, J., I. Suzuki, M. Kumazawa, Y. Kobayashi, and K. Iida, Anisotropy of *P* wave in dunite, *J. Seismol. Soc. Jpn.*, 21, 222–228, 1968.
- Katsura, T., Thermal diffusivity of olivine under upper mantle conditions, *Geophys. J. Int.*, 122, 63–69, 1995.
- Katsura, T., Thermal diffusivity of periclase at high temperatures and high pressures, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 101, 73–77, 1997.
- Klemens, P. G., Thermal conductivity and lattice vibrational modes, *Solid State Phys.*, 7, 1–98, 1958.
- Kobayashi, Y., Anisotropy of thermal diffusivity in olivine, pyroxene, and dunite, *J. Phys. Earth*, 22, 359–373, 1974.
- Kukkonen, I. T., J. Jokinen, and U. Seipold, Temperature and pressure dependencies of thermal transport properties of rocks: Implications for uncertainties in thermal lithosphere models and new laboratory measurements of high-grade rocks in the central fennoscandian shield, *Surv. Geophys.*, 20, 33–59, 1999.
- Mainprice, D., and M. Humbert, Methods of calculating petrophysical properties from lattice preferred orientation data, *Surv. Geophys.*, 15, 575–592, 1994.
- Pitt, G. D., and D. C. Tozer, Radiative heat transfer in dense media and its magnitude in olivines and some other ferromagnesian minerals under typical upper mantle conditions, *Phys. Earth Planet. Inter.*, 2, 189–199, 1970.
- Pribnow, D., and T. Umsonst, Estimation of thermal conductivity from mineral composition: Influence of fabric and anisotropy, *Geophys. Res. Lett.*, 20(20), 2199–2202, 1993.
- Roufosse, M., and P. G. Klemens, Thermal conductivity of complex dielectric crystals, *Phys. Rev. B*, 7, 5379–5386, 1973.
- Roufosse, M., and P. G. Klemens, Lattice thermal conductivity of minerals at high temperatures, *J. Geophys. Res.*, 79(5), 703–705, 1974.
- Schatz, J. F., and G. Simmons, Thermal conductivity of earth materials at high temperatures, *J. Geophys. Res.*, 77(35), 6966–6983, 1972.
- Seipold, U., Simultaneous measurements of thermal diffusivity and thermal conductivity under high pressure using thermal pulse of finite length, *High Temp. High Pressures*, 20, 609–613, 1988.
- Seipold, U., Pressure and temperature dependence of thermal transport properties for granites, *High Temp. High Pressures*, 22, 541–548, 1990.
- Seipold, U., Temperature dependence of thermal transport properties of crystalline rocks—A general law, *Tectonophysics*, 291, 161–171, 1998.
- Seipold, U., Der warmetransport in kristallinen gesteinen unter den Bedingungen der kontinentalen Kruste, *Sci., Tech. Rep. STR01/13*, GeoForschungsZentrum Potsdam, Potsdam, Germany, 2001.
- Seipold, U., H.-J. Mueller, and P. Tuisku, Principle differences in the pressure dependence of thermal and elastic properties of crystalline rocks, *Phys. Chem. Earth*, 23(3), 357–360, 1998.
- Shankland, T. J., U. Nitsan, and A. G. Duba, Optical absorption and radiative heat transport in olivine at high temperature, *J. Geophys. Res.*, 84(B4), 1603–1610, 1979.
- Siegesmund, S., Modelling the thermal conductivity observed in paragneisses of the KTB pilot hole, *Sci. Drill.*, 4, 207–213, 1994.
- Slack, G. A., The thermal conductivity of nonmetallic crystals, *Solid State Phys.*, 34, 1–71, 1979.
- Staudacher, W., Die Temperatur-Leitfähigkeit von natürlichem Olivin bei hohen drucken und temperatur, *Z. Geophys.*, 39, 979–988, 1973.
- Taylor, R., Thermal diffusivity of composites, *High Temp. High Pressures*, 15, 299–309, 1983.
- Tommasi, A., and A. Vauchez, Continental rifting parallel to ancient collisional belts: An effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 185, 199–210, 2001.
- Tommasi, A., B. Tikoff, and A. Vauchez, Upper mantle tectonics: Three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 168, 173–186, 1999.
- Tommasi, A., B. Gibert, U. Seipold, and D. Mainprice, Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle, *Nature*, 411, 783–786, 2001.
- Zaug, J., J. M. Abramson, J. M. Brown, and L. J. Slutsky, Elastic constants, equation of state and thermal diffusivity at high pressure, in *High-Pressure Research: Applications to Earth and Planetary Sciences*, edited by Y. Syono and M. H. Manghani, pp. 157–166, Terra Sci., Tokyo, 1992.

B. Gibert, D. Mainprice, and A. Tommasi, Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II and CNRS, Place Eugène Bataillon, F-34095 Montpellier cedex 5, France. (gibert@dstu.univ-montp2.fr)

U. Seipold, GeoForschungsZentrum Potsdam, Division 5, Telegrafenberg, D-14473 Potsdam, Germany.

## 4.4 Conclusion

Le résultat majeur de cette étude est la mise en évidence d'une forte anisotropie de la diffusivité thermique à l'échelle de la roche (environ 20-25%), qui est préservée dans des conditions de haute pression et température. Le lien entre les observations macroscopiques de l'anisotropie des propriétés acoustiques/sismiques et l'anisotropie de la diffusivité thermique a été établi. Pour une configuration géodynamique donnée (lithosphère océanique, cratonique, rifting, ...) pour laquelle l'anisotropie des vitesses acoustiques est avérée, les directions de diffusion thermique minimale et maximale peuvent être définies.

Cependant, cette étude met en lumière deux problèmes majeurs qui sont par ailleurs récurrents dans les études des propriétés de transport de chaleur des minéraux et roches du manteau :

- d'une part les valeurs absolues des diffusivités obtenues sur les roches sont systématiquement inférieures aux valeurs obtenues par les modèles. Quels sont les paramètres qui peuvent influencer le transfert d'échelle entre roche et cristal dont ne tiennent pas compte ces modèles, et qui pourraient diminuer les valeurs absolues ? Ces différences généralement obtenues sont-elles dues à des problèmes expérimentaux ? Aucune étude n'a effectivement étudié ce transfert d'échelle en utilisant la même méthode de mesure. La méthode 1 utilisée ici souffre d'une sérieuse limitation car elle ne permet pas de mesurer les propriétés des cristaux.
- Le rayonnement n'a pu être quantifié précisément, mais seulement discuté par rapport aux modèles déjà existants. L'oxydation des cristaux d'olivine dans les échantillons due à l'absence de tampon gazeux permettant de conserver une atmosphère réductrice reste un problème pour l'évaluation approfondie du transfert par rayonnement dans les péridotites. De plus, le fait de ne pas pouvoir faire varier la distance séparant le fil chauffant du thermocouple ne permet pas de savoir si l'équilibre thermodynamique local est atteint ou non. L'hypothèse d'équilibre radiatif, autorisant l'utilisation de la relation de Rosseland, n'est fondée que sur des études antérieures. La méthode 1 est de ce point de vue insuffisante et ne permet pas à elle seule une étude du transfert radiatif.

L'utilisation des méthodes (2) et (3) et l'étude des propriétés des monocristaux d'olivine vont permettre d'étudier ces deux points (Chapitre 5 et chapitre 6).



5 Diffusivité thermique à  
température ambiante :  
propriétés du monocristal  
et des agrégats d'olivine



## 5.1 Introduction

Ce chapitre présente une étude du transfert d'échelle entre les propriétés de transport de chaleur des monocristaux d'olivine et celles des agrégats polycristallins d'olivine (naturels et synthétiques). Pour cela, la diffusivité thermique des monocristaux et des agrégats est mesurée en utilisant une même méthode. L'intérêt est de vérifier si les processus contrôlant la diffusion thermique sont similaires aux deux échelles et de définir la valeur absolue de la diffusivité thermique des matériaux du manteau supérieur sous conditions ambiantes. En effet, la connaissance de la diffusivité thermique à pression et température ambiante permet d'ajuster les modèles théoriques pour lesquels l'estimation de la valeur absolue de la diffusivité thermique est très incertaine pour les minéraux complexes (Slack, 1979), mais pour lesquels les dérivées en pression et températures sont plus fiables (e.g., Roufosse and Klemens, 1974). De la même façon, les mesures à très hautes pressions et très hautes températures souffrant de larges et systématiques incertitudes (comme la position des thermocouples ou les conditions aux limites), elles ne sont capables de fournir que des informations sur des dérivées en pression-température (e.g., Katsura, 1995).

Dans la note 'Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions - a comparison', publiée dans le *Geophysical Research Letters*, il va être montré comment les propriétés de transport de chaleur à l'échelle du monocristal sont transposables à l'échelle de la roche en utilisant la méthode 2. Des résultats similaires obtenus avec la méthode Angström (méthode 3) sont présentés ensuite. Ces mesures permettent de discuter la validité des modèles numériques utilisés pour prédire les propriétés thermiques tri-dimensionnelles des roches, mais également de vérifier l'effet de la microstructure sur le transport de chaleur par les phonons. Des données obtenues sur les monocristaux de quartz et sur une quartzite grâce à la méthode Angstrom viendront enrichir la discussion.

Enfin, l'anisotropie de la diffusivité thermique de l'olivine est discutée en comparant les phénomènes de diffusion thermique à d'autres propriétés physiques impliquant les vibrations du réseau cristallin. Les résultats obtenus avec les différentes méthodes (les trois méthodes utilisées dans cette thèse ainsi que celles utilisées dans les études antérieures) sont comparés. La validité des diverses méthodes utilisées est également analysée afin de déterminer une valeur absolue réaliste de la diffusivité thermique des matériaux du manteau sous conditions ambiantes.

## 5.2 Le transfert d'échelle monocristaux - agrégats polycristallins: l'olivine et le quartz.

### 5.2.1 Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions - a comparison

## Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions—a comparison

Benoit Gibert

Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II-CNRS, Montpellier, France

Frank R. Schilling

GeoForschungsZentrum Potsdam-Division 4, Potsdam, Germany

Andréa Tommasi

Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II-CNRS, Montpellier, France

David Mainprice

Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II-CNRS, Montpellier, France

Received 19 August 2003; revised 12 October 2003; accepted 14 October 2003; published 28 November 2003.

[1] Heat transfer is a key process for the mantle dynamics. However, analysis of experimental data on thermal transport properties of upper mantle materials highlights a large scatter of absolute values of thermal diffusivity. In particular, conduction of heat in single crystals is systematically higher than in polycrystalline samples. Here we present new thermal diffusivity measurements on San Carlos olivine single crystals and mantle rocks at 300K. Measured components of the olivine thermal diffusivity tensor along the [100], [010], and [001] directions are 2.73, 1.70, and 2.49 mm<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>, respectively. Measurements of thermal diffusivity of peridotites as a function of structural orientation show absolute values and anisotropy in good agreement with those predicted by petrophysical models based on the crystal preferred orientation of olivine and the above thermal diffusivity tensor. This suggests that the upper mantle thermal diffusivity is up to 50% higher than indicated by previous measurements on mantle rocks. **INDEX TERMS:** 5112 Physical Properties of Rocks: Microstructure; 5134 Physical Properties of Rocks: Thermal properties; 8120 Tectonophysics: Dynamics of lithosphere and mantle—general; 8130 Tectonophysics: Heat generation and transport. **Citation:** Gibert, B., F. R. Schilling, A. Tommasi, and D. Mainprice, Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions—a comparison, *Geophys. Res. Lett.*, 30(22), 2172, doi:10.1029/2003GL018459, 2003.

### 1. Introduction

[2] Thermal diffusivity is the key parameter that controls the temperature distribution as a function of time and, indirectly, through the temperature dependence of density and rheology, the deformation patterns in the mantle. In particular, recent studies have shown the effect of a variable thermal conductivity on convection [Dubuffet *et al.*, 1999] and subduction dynamics [Hauk *et al.*, 1999]. Although thermal transport properties of upper mantle materials have been extensively studied at high pressure and high temperature [e.g., Hofmeister, 1999; Katsura, 1995; Shankland *et*

*al.*, 1979], some important aspects of these properties, like the scale transfer from single crystal properties to rock properties, are still poorly constrained. Indeed, measured thermal diffusivities of upper mantle rocks are 30% lower than the thermal diffusivities predicted by petrophysical models that average the single crystal tensor as function of the crystals orientation distribution [Gibert *et al.*, 2003; Tommasi *et al.*, 2001]. Two assumptions may explain this discrepancy. On one hand, physical parameters controlling heat diffusion in single crystal and polycrystalline scales may differ. Grain boundaries, as well as intracrystalline defaults or microcracks may hinder thermal transfer at the polycrystal scale, due to interactions of phonons with these imperfections [Klemens, 1958]. However, these interactions are expected to be dominant at very low temperature ( $\ll 300\text{K}$ ), but negligible at higher temperatures where phonon-phonon interactions predominate. On the other hand, different methods and experimental setups were used to determine thermal transport properties of single crystals and polycrystalline aggregates: The discrepancy between single-crystal and rock thermal diffusivities may be due to an experimental bias.

[3] In order to test these hypotheses, we measured, using the same transient technique, the thermal diffusivity tensor of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions. Seven olivine single crystals, three natural dunites, one lherzolite, and one synthetic dunite were studied. For the natural rocks, the crystal preferred orientation (CPO) of olivine was measured and thermal diffusivities predicted on the basis of the measured olivine single-crystal tensor and lattice preferred orientations are compared to the measured thermal diffusivities.

### 2. Experimental Set-Up

[4] We use a transient technique that allows thermal diffusivity measurements of both single-crystals and relatively large rock samples ( $>1\text{ cm}^3$ ) in different directions [Höfer and Schilling, 2002; Schilling, 1999]. The method does not require any specific sample shape, only two parallel well-polished plane faces. A filament close to the front surface produces a heat signal, which is recorded by a first thermocouple located between the filament and the

**Table 1.** Olivine Thermal Diffusivity Tensor at 300K (in mm<sup>2</sup>/s) Obtained in the Present Study (Values Under Brackets Indicate 2 $\sigma$  Uncertainties in the Last Digit) and Previous Measurements at Ambient Conditions (1) [Chai *et al.*, 1996]; (2) [Kobayashi, 1974]; (3) [Kanamori *et al.*, 1968]; (4) [Beck *et al.*, 1978]-Non Oriented Crystals

ref.	This study	(1)	(2)	(3)	(4)
method	transient	PTGS	Angstrom	Angstrom	Hot wire (273K)
Fo content	91%	89%	91.6%	82%	90%
[100]	2.73(04)	2.16	2.18	–	–
[010]	1.70(12)	1.25	1.07	–	Sc1: 2.12
[001]	2.49(14)	1.87	1.71	1.85	Sc 2: 3.56

front surface of the sample, without contact to either the filament or the sample. A second thermocouple situated on the rear part of the sample registers the resulting temperature equilibration in the sample. The thermal diffusivity of the sample is evaluated from the temperature-time evolution recorded at the two thermocouples using a one-dimensional finite difference scheme, which allows consideration of heat losses by radiation from the sample surfaces [Schilling, 1999]. The ballistic (direct and absorbed) heat transfer is also modeled as an additional signal on the rear thermocouple. Since temperature derivatives of thermal diffusivity of olivine are high at ambient conditions, low energy signals were used in order to have a weak elevation of the sample temperature (<5K). The resulting internal precision of the apparatus depends on the sample length and on the thermal diffusivity of the measured crystals; an error of 3–5% is expected at ambient conditions [Schilling, 1999] and it increases when the sample length decreases. The external precision is about 5% [Schilling, 1999]. Extensive calibration of the apparatus was performed using standard glass and quartz samples [Höfer and Schilling, 2002].

### 3. Results

#### 3.1. Single Crystals

[5] Seven San Carlos olivine single crystals (Fo90) were oriented by the Laue backscattering technique at the IKZ Institute, Berlin. They are green-colored and free of cracks and inclusions. Six crystals were cut in order to obtain a platelet geometry with two faces polished plan-parallel; these faces are either normal to the [100], to the [010], or to the [001] crystallographic axes. The length of the measured heat diffusion path varies from 4.5 to 9.1 mm, and the cross section has a rectangular shape of about 1 cm<sup>2</sup> or more. These geometries are chosen to minimize heat losses at the lateral sides of the sample. In addition, a cubic sample of 8 mm was cut in order to measure the complete thermal diffusivity tensor on one single crystal. Results

obtained on the different samples display a good reproducibility of the measurements in a given direction (Table 1). Reproducibility is particularly good for the [100] direction (standard deviation <3%) where large crystals were used (7.4 to 9.1mm), suggesting that experimental uncertainties due to heat losses on lateral sides are not significant. The lower reproducibility in the [010] and [001] direction (standard deviation >3%) may be explained by the smaller samples used in these measurements (from 4.5 to 8 mm).

#### 3.2. Rocks

[6] Four naturally-deformed mantle rocks have been selected for petrophysical modeling and laboratory measurements of thermal diffusivity (Table 2). Thermal diffusivity was also measured in a synthetic dunite sintered from crushed San Carlos olivine in a Paterson press at 300 MPa and 1200°C for 12 hours. Crystal preferred orientation (CPO) of olivine was measured by the Electron-Back Scattered Diffraction (EBSD) technique in a JEOL 5600 Scanning Electron Microscope. Measured CPO in the alpine samples (Figure 1) are typical of peridotites deformed under high-temperature, low-stress conditions (>1000°C). 00BA1 displays a strong concentration of olivine [100] axes sub-parallel to the lineation (X-direction, density > 8 multiple of uniform distribution) and a girdle distribution of [010] and [001] axis in the plane perpendicular to the lineation, with a maximum of [010] normal to the foliation. [001] maxima, usually weaker than the [100] and [010] ones, are normal to the lineation in the foliation plane (Y-direction). This CPO pattern suggests a dominant activation of the high-temperature (010)[100] and (001)[100] slip systems. The dunites 00VS24 and 00VS11 show an olivine CPO with an orthorhombic symmetry, characterized by equivalent concentrations (maximum density  $\cong$  5 m. u. d.) of the [100], [010] and [001] axes in the X, Z and Y direction, respectively. This CPO pattern is characteristic of single activation of the olivine high-temperature easy-glide system: (010)[100]. The Oman dunite has a weak and inhomogeneous olivine CPO. The synthetic dunite has a random fabric.

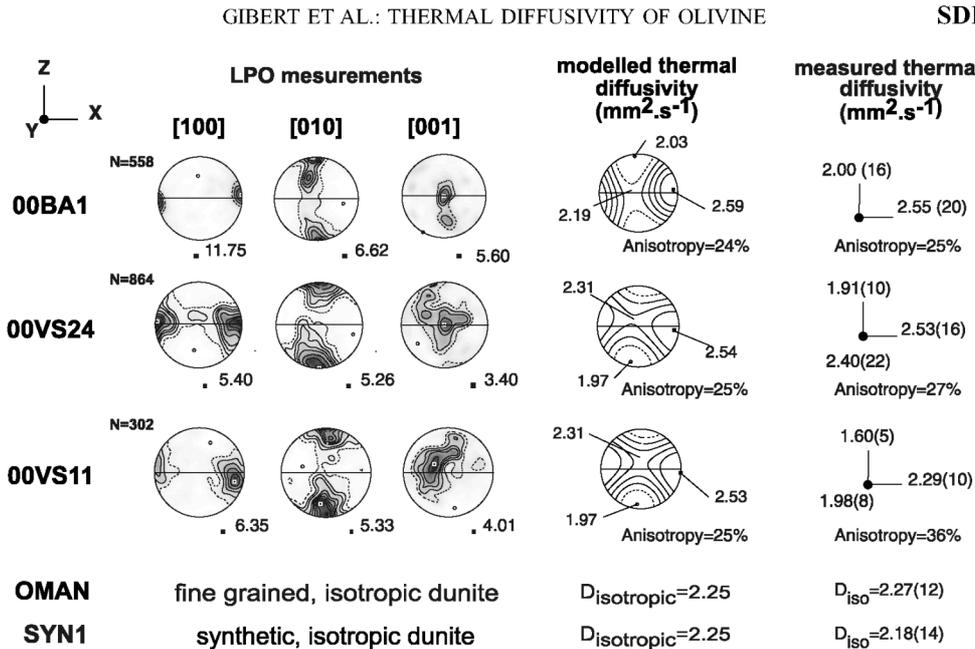
[7] The thermal diffusivity at the sample scale is calculated using the olivine thermal diffusivity tensor determined above and the measured olivine CPO [Mainprice and Humbert, 1994]. For each grain of a mineral phase, the thermal diffusivity matrix  $D_{kl}$  in the crystal co-ordinates is rotated into the sample co-ordinates using the rotation matrix  $g_{ij}$ .

$$D_{ij}(g) = g_{ik} \cdot g_{jl} \cdot D_{kl} \quad (1)$$

The thermal diffusivity of the polycrystal is then calculated by averaging the individual orientation measurements,

**Table 2.** Peridotite Samples: Origin, Modal Composition, Microstructure, Density, and Mean Forsterite Content of Olivine

Sample	Location	Modal composition	Microstructure	Density (g. cm <sup>-3</sup> )	Fo content (%)
00BA1	Baldissero, Alps	75% olivine, 18% enstatite, 5% diopside	HT porphyroclastic: Porphyroclasts >1 mm	3.38	90.2
00VS24	Val Sesia, Alps	>98% olivine, spinels	Recrystallised grains <0.5 mm	3.39	90.5
00VS11	Val Sesia, Alps	>98% olivine, spinels	Equigranular: Static recrystallisation, uniform grain size of 2–3 mm	3.43	84.2
OMAN	Oman ophiolite	>95% olivine, enstatite, spinels	LT porphyroclastic: Porphyroclasts (<0.3 mm) in a fine grained matrix (0.02 mm)	3.36	91.0
SYN1	Hot pressed sample	100% olivine	Fine grained, undeformed (0.015 to 0.025 mm)	3.34	91.0



**Figure 1.** Olivine CPO, modelled and measured thermal diffusivity in naturally deformed peridotites. Lower hemisphere, stereographic projections. Full lines mark the foliation ( $XY$  plane) and the lineation ( $X$  direction) is horizontal. In the CPO stereoplots,  $N$  represents the number of measured grains, contours intervals are at 0.5 multiples of a uniform distribution, and inverse-log shading varies from white (minimum density) to black (maximum density indicated by the solid square). Thermal diffusivity plots are contoured at 0.1 mm<sup>2</sup>. s<sup>-1</sup> intervals. Anisotropy is defined by  $(D_{\text{max}} - D_{\text{min}}) / D_{\text{mean}}$  in %. Values under brackets indicate  $2\sigma$  uncertainties for the measured diffusivities.

where  $v(g)$  is the volume fraction of the grain in the direction  $g$ :

$$\begin{aligned} \langle D_{ij} \rangle_{\text{Voigt}} &= \sum D_{ij}(g) \cdot v(g) \text{ or} \\ \langle D_{ij} \rangle_{\text{Reuss}} &= \left( \sum (D_{ij}(g))^{-1} \cdot v(g) \right)^{-1} \end{aligned} \quad (2)$$

In the present models, we assume that the olivine volume fraction in the rock is 1, neglecting the pyroxenes and spinels. Thermal diffusivities are calculated as the arithmetic mean of the Reuss and Voigt bounds (VRH average).

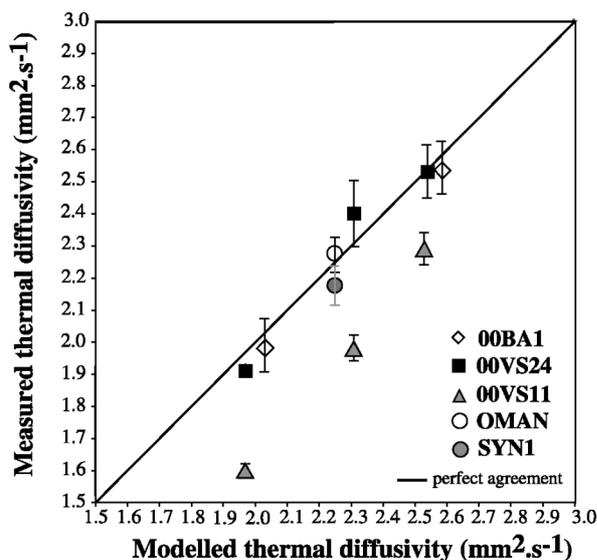
[8] These petrophysical models (Figure 1) show that development of an olivine CPO leads to a strong anisotropy of thermal diffusivity. Thermal diffusivity is maximum parallel to the olivine [100] axes concentration, i.e., parallel to the lineation direction, and minimum parallel to the olivine [010] axes concentration, i.e., perpendicular to the foliation plane. However, this model does not consider the effects of grain boundaries, microcracks, or crystalline imperfections on heat transfer. To investigate these effects, we measured the thermal diffusivity of these samples at ambient conditions.

[9] Cylinders of 12 mm in diameter and 10–15 mm length were drilled for measurements in the  $X$ ,  $Y$ , and  $Z$  structural directions of each sample. Due to their weak or random olivine CPO, cores of the Oman and synthetic dunites were not oriented. For each direction, 2 to 5 cylinders were cut in order to test the reproducibility and the representativity of the measurements (Figure 1). The low standard deviations suggest a good reproducibility of the measurements and a good representativity of the core sample. In particular, deviations obtained for the Oman dunite are within the range of the internal error of the

apparatus. In spite of its very large grain size, 00VS11 also shows a consistent behavior from core to core. A large anisotropy (about 25%) of thermal diffusivity is observed for 00BA1 and 00VS24. For 00VS11, a still larger anisotropy (36%) is observed and its absolute values are lower by 10% to 15% relatively to the other samples.

#### 4. Discussion

[10] The present thermal diffusivity measurements in olivine single-crystals (Table 1) show that heat transport in olivine is more effective in the [100] direction and less effective in the [010] direction, in good agreement with previous determinations [Chai *et al.*, 1996; Kobayashi, 1974]. Anisotropy of thermal diffusivity is lower than Kobayashi [1974] data, but it is in good agreement with more recent measurements by Chai *et al.* [1996]. However, the present absolute values of thermal diffusivity are about 30% higher than these data. This discrepancy may be explained by a more effective contact between the rear thermocouple and the crystal and by a better control of the ambient temperature in our experiments. Indeed, in the modified Angstrom method [Kanamori *et al.*, 1969], large temperature excitations are used and a silver coating material insures the contact between the samples and the thermocouple, leading to a thermal resistance. Calibration of the modified Angstrom method on quartz and silica glass shows that the resulting errors are expected to be about 10 to 20% [Kanamori *et al.*, 1968; Kobayashi, 1974]. The present thermal diffusivities are also higher than those obtained by the Picosecond Transient Grating Spectroscopy method [Chai *et al.*, 1996; Zaugg *et al.*, 1992]. This non-



**Figure 2.** Comparison between measured and modelled thermal properties in naturally deformed peridotites.

conventional method for thermal diffusivity measurements does not suffer from the same problems as the modified Angstrom method, because of the use of a laser-induced thermal grating as a thermal excitation and the absence of thermocouple as sensors. Part of this discrepancy as well as the lower diffusivity measured along the [001] axis by Kanamori *et al.* [1968] may be due to the higher iron content of their single crystals. Accuracy of the PTGS method was tested through measurements of the thermal diffusivity of water at high temperature and pressure [Abramson *et al.*, 2001], but calibration on standard materials like silica glasses or quartz is not available. An inter-laboratory comparison using the same materials is necessary to further investigate the discrepancy between the two methods. Finally, extrapolation of thermal diffusivity measurements on two non-oriented single crystals at 273K by Beck *et al.* [1978] to 300K gives values in the same range than the present data.

[11] Comparison between petrophysical models and direct measurements on rock samples shows that heat transport properties at the aggregate scale and at the single-crystal scale are well correlated (Figures 1 and 2) in both absolute values and anisotropy. For the Oman and synthetic isotropic dunites, the difference is within the error bar of the measurement method (<3–5%). This agreement shows that microcracks and intracrystalline defaults do not hinder thermal diffusion or modify its anisotropy. Moreover, concordance in average thermal diffusivities in samples displaying a wide range of grain sizes (0.01 to 2 mm) also implies that grain size and grain boundaries have no effect on thermal diffusivity at ambient conditions. Presence of pyroxenes (about 25%), whose thermal diffusivity absolute values are expected to be lower than the olivine ones [Chai *et al.*, 1996], neither hinders heat transport at ambient conditions in the Iherzolite 00BA1 (difference <5%) nor modifies its anisotropy. Finally, modeled thermal diffusivities in 00VS11 are systematically higher than the mea-

sured ones (difference >15%). This discrepancy may be due to the higher iron content of olivine in this sample (Fo84) relatively to the San Carlos olivine crystals (Fo90) [Horai, 1971].

[12] The similarity between thermal diffusivities measured at the crystal and rock scales suggests that, even at ambient conditions, interaction of phonons with the lattice imperfections or grain boundaries is negligible compared to phonon-phonon interactions. Thus thermal diffusivity of these low-porosity rocks is dominated by the crystals intrinsic properties and by their orientation. In consequence, petrophysical models based on the olivine crystal thermal diffusivity tensor and CPO provide a good approximation of the 3-dimensional phononic thermal transport of mantle rocks at ambient conditions. Since phonon-phonon interactions increase with increasing temperature, agreement between single crystal and rock phononic heat transport is expected to be preserved at high temperature.

[13] Finally, the present thermal diffusivity data are higher by more than 50% than the values obtained in previous studies on olivine polycrystals at ambient conditions [e.g., Gibert *et al.*, 2003]. Most of these studies use transient methods in radial geometries, which are submitted to experimental uncertainties, like the exact position of the thermocouple, or to problems in boundary conditions, that may lead to systematic experimental errors. Based on our evaluation of the accuracy of the present method as well as on its extensive calibration with standards, we suggest that the present measurements provide more realistic values of thermal diffusivity of mantle materials at ambient conditions. Extrapolation to upper mantle conditions, using previously defined temperature and pressure dependencies [e.g., Gibert *et al.*, 2003; Katsura, 1995], suggests that upper mantle thermal diffusivity may be up to 50% higher than traditionally used values.

[14] **Acknowledgments.** We thank Dr Alex from the IKZ Institute, Berlin, for providing the single crystal orientation, M. Kreplin and G. Berger for sample preparation and C. Nevado for the high quality polished thin sections. Misha Bystryki is thanked for providing the synthetic dunite. This work was supported by the French-German PROCOPE program.

## References

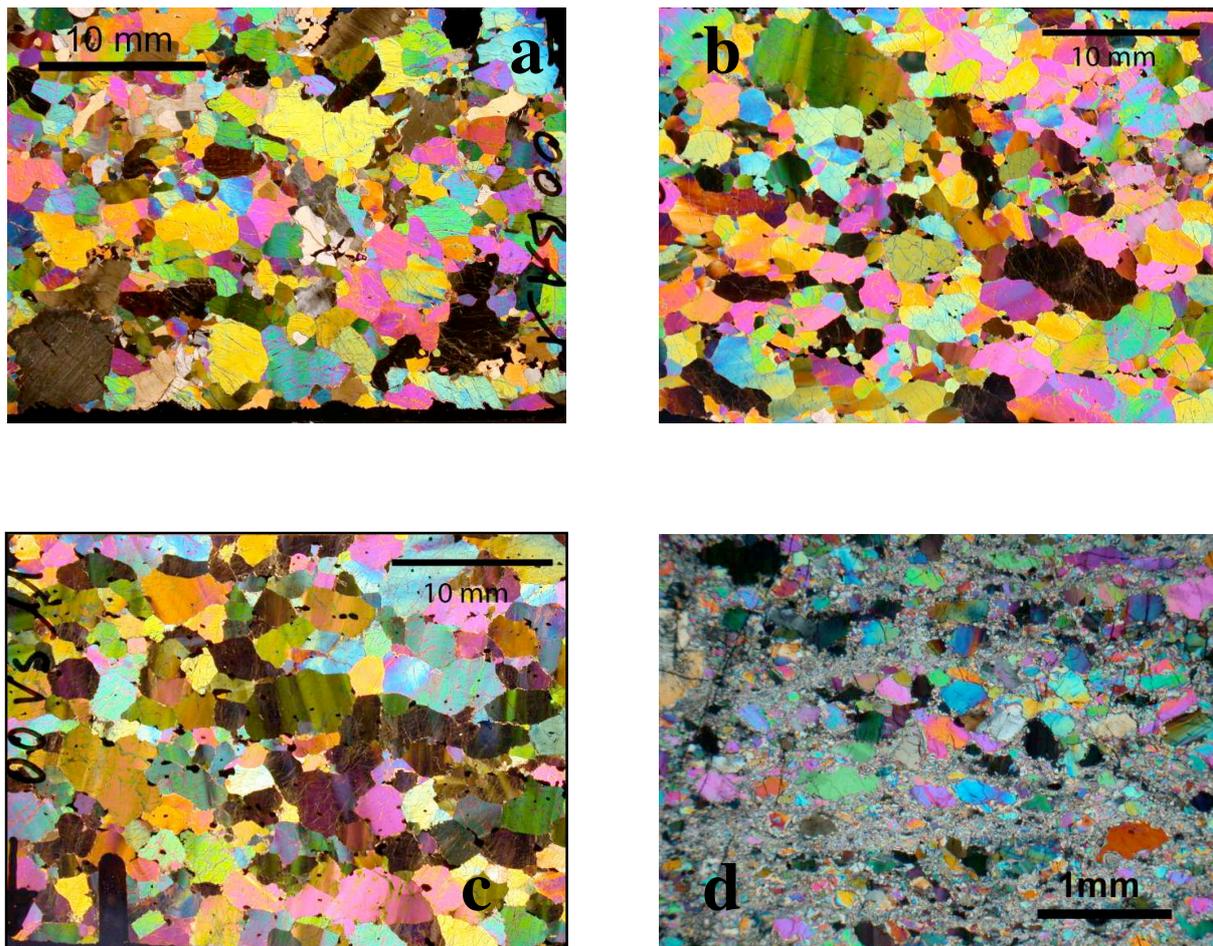
- Abramson, E. H., J. M. Brown, and L. J. Slutsky, The thermal diffusivity of water at high pressures and high temperatures, *J. Chem. Phys.*, *115*, 10,461–10,463, 2001.
- Beck, A. E., D. M. Darbha, and H. H. Schloessin, Lattice conductivities of single-crystal and polycrystalline materials at mantle pressures and temperatures, *Phys. Earth Planet. Inter.*, *17*, 35–53, 1978.
- Chai, M., J. M. Brown, and L. J. Slutsky, Thermal diffusivity of mantle minerals, *Phys. Chem. Minerals*, *23*, 470–475, 1996.
- Dubuffet, F., D. A. Yuen, and M. Rabinovicz, Effects of a realistic mantle thermal conductivity on the patterns of 3D convection, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *171*, 401–409, 1999.
- Gibert, B., U. Seipold, A. Tommasi, and D. Mainprice, Thermal diffusivity of upper mantle rocks: Influence of temperature, pressure and the deformation fabric, *J. Geophys. Res.*, *108*(B8), 2359, doi:10.1029/2002JB002108, 2003.
- Hauk, S. A., R. J. Phillips, and A. M. Hofmeister, Variable conductivity: Effects on the thermal structure of subducting slabs, *Geophys. Res. Lett.*, *26*, 3257–3260, 1999.
- Höfer, M., and F. R. Schilling, Heat-transfer in quartz, orthoclase and sanidine at elevated temperature, *Phys. Chem. Minerals*, *29*, 571–584, 2002.
- Hofmeister, A. M., Mantle values of thermal conductivity and the geotherm from phonon lifetimes, *Science*, *283*, 1699–1706, 1999.
- Horai, K., Thermal conductivity of rock forming-minerals, *J. Geophys. Res.*, *76*, 1278–1308, 1971.

- Kanamori, H., N. Fujii, and H. Mizutani, Thermal diffusivity measurement of rock-forming minerals from 300°K to 1100°K, *J. Geophys. Res.*, *73*, 595–605, 1968.
- Kanamori, H., H. Mizutani, and N. Fujii, Method of thermal diffusivity measurement, *J. Phys. Earth*, *17*, 43–53, 1969.
- Katsura, T., Thermal diffusivity of olivine under upper mantle conditions, *Geophys. J. Int.*, *122*, 63–69, 1995.
- Klemens, P. G., Thermal conductivity and lattice vibrational modes, *Solid State Phys.*, *7*, 1–98, 1958.
- Kobayashi, Y., Anisotropy of thermal diffusivity in olivine, pyroxene, and dunite, *J. Phys. Earth*, *22*, 359–373, 1974.
- Mainprice, D., and M. Humbert, Methods of calculating petrophysical properties from lattice preferred orientation data, *Surv. Geophys.*, *15*, 575–592, 1994.
- Schilling, F. R., A transient technique to measure thermal diffusivity at elevated temperature, *Eur. J. Mineral.*, *11*, 1115–1124, 1999.
- Shankland, T. J., U. Nitsan, and A. G. Duba, Optical absorption and radiative heat transport in olivine at high temperature, *J. Geophys. Res.*, *84*, 1603–1610, 1979.
- Tommasi, A., B. Gibert, U. Seipold, and D. Mainprice, Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle, *Nature*, *411*, 783–786, 2001.
- Zaug, J., E. H. Abramson, J. M. Brown, and L. J. Slutsky, Elastic constants, equation of state and thermal diffusivity at high pressure, in *High-pressure research: Applications to Earth and planetary sciences*, edited by Y. Syono and M. H. Manghani, pp. 157–166, Terra Sci., Tokyo, 1992.
- B. Gibert, A. Tommasi, and D. Mainprice, Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II, Place Eugène Bataillon, F-34095, Montpellier cedex 5, France. (gibert@dstu.univ-montp2.fr)
- F. R. Schilling, GeoForschungsZentrum Potsdam-Division 4, Potsdam, Germany.

### 5.2.2 Données additionnelles et validité des mesures

Les diffusivités thermiques mesurées sur monocristaux et roches en utilisant la méthode transitoire (méthode 2) sont supérieures aux données antérieures d'environ 30% et 70%, respectivement. Cela pose un sérieux problème expérimental : comment prouver la validité de telles mesures ? La méthode étant calibrée par des mesures attentives sur du quartz, verres et céramiques (Macor), les mesures propres à l'olivine peuvent-elle être incriminées ? Au-delà de la comparaison avec d'autres méthodes (problème abordé brièvement dans l'article), un examen attentif des résultats obtenus est nécessaire.

Pour les roches, la méthode s'est montrée efficace : la taille des échantillons (10 mm) et leur diamètre (12mm) a été choisie pour optimiser ses possibilités. Les courbes obtenues ne présentent qu'un très faible transport balistique qui ne peut interagir avec la conduction intrinsèque de la roche (fig. 5.4a). La reproductibilité des mesures testée sur 3 à 5 carottes est très bonne, et ce malgré les tailles de grains élevées de certains échantillons, notamment de la dunite 00VS11 (fig.5.3 a,b,c). Une taille de grains élevée contribue en effet à rendre un échantillon très inhomogène du point de vue de sa fabrique cristallographique et donc de ses propriétés de transport thermique. Une taille de grains très fine ne diminue pas le transport de chaleur (figure 5.3d).



**Figure 5.3** : Photos des échantillons en lame mince (lumière polarisée) montrant la microstructure des péridotites étudiées (voir texte – GRL). (a) 00BAI, (b) 00VS24, (c) 00VS11 et (d) OMAN. On remarque la nette différence de microstructure entre les roches déformées et équilibrées à haute température (a,b,c) et la dunite déformée à basse température (et mylonitisée) présentant des tailles de grains très fines (d).

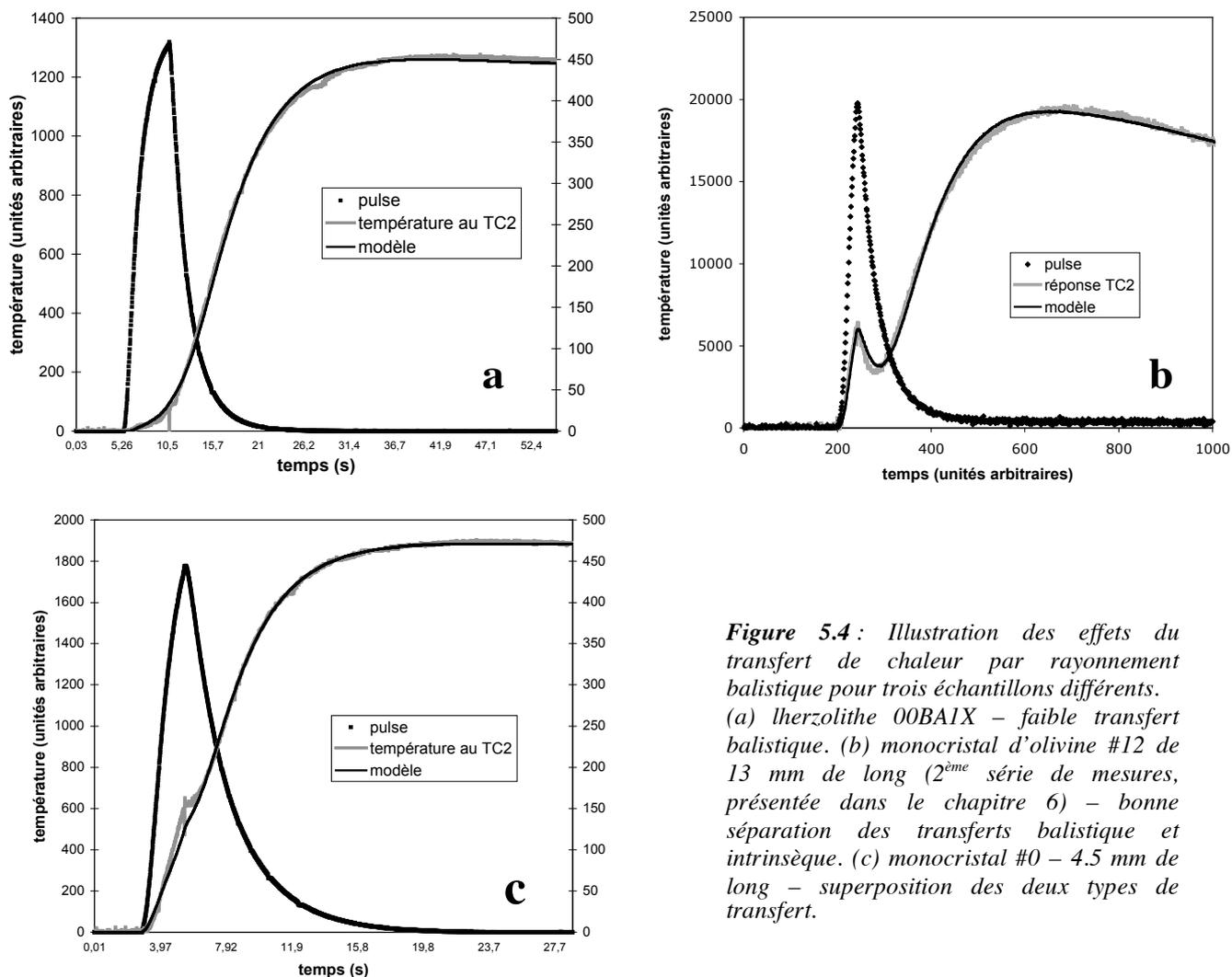
En revanche, la petite taille des monocristaux a imposé de travailler dans les limites de résolution de la méthode et l'interaction entre le transfert balistique et la conduction s'est traduite par une variation apparente de la diffusivité obtenue avec la longueur de l'échantillon. Une grande partie de l'énergie fournie par le filament est transmise directement sur le thermocouple TC2 et les transferts balistiques et intrinsèques se superposent. Cela se traduit par des courbes de réponse en température typiques (fig.5.4c). Le modèle intègre donc partiellement le transfert balistique dans l'estimation de la diffusivité thermique, ce qui augmente artificiellement les valeurs. Ceci est le cas pour les cristaux taillés pour les mesures dans la direction [010] et [001]. Les résultats complets obtenus pour les sept monocristaux sont montrés dans le tableau 5.3.

échantillon	axe	longueur (mm)	section (mm <sup>2</sup> )	Diffusivité thermique (écart-type)
#5	[100]	9.1	144	2.687(-)
#6	[100]	7.4	81	2.742(-)
#0	[010]	4.5	64	1.754 (0.012)
#2	[010]	5.0	90	1.8 (-)
#3	[010]	6.1	170	1.736(0.06)
#4	[001]	6.6	110	2.557(0.1)
#7	[001]	6.0	117	2.512 (0.09)
Cube a	[100]	8.0	64	2.735 (0.026)
Cube b	[010]	8.0	64	1.652 (0.012)
Cube c	[001]	8.0	64	2.433(0.06)

**Tableau 5.3 :** Mesures de diffusivité thermiques réalisées sur les monocristaux d'olivine au GFZ Potsdam en juin 2002. L'écart-type n'a été évalué que lorsqu'au moins deux séries de mesures ont été effectuées sur le même cristal.

Ces résultats montrent toutefois que les diffusivités obtenues pour l'axe [100] sont reproductibles (aux incertitudes près) indépendamment de la longueur et du diamètre des échantillons, elles sont donc intrinsèques au cristal. Une deuxième série de mesures, dont le but est l'étude du transfert radiatif (voir chapitre 6), utilise des cristaux plus longs (10-13mm), pour lesquels le transfert balistique est très clairement séparé du transfert intrinsèque (fig. 5.4b). Les mesures de cette deuxième série sont en bon accord avec les mesures présentées ici. Une longueur de 8 mm paraît donc être suffisante pour évaluer la diffusivité thermique à température ambiante. On peut espérer, par conséquent, que les mesures réalisées sur le cube selon les axes [010] et [001], dont la diffusivité est inférieure à celle de l'axe [100] (ce qui implique une meilleure séparation des transferts balistique et diffusif) soient également représentatives. Elles sont environ 3 à 5% plus faibles que les mesures réalisées sur les petits cristaux disponibles pour la mesure dans ces directions (entre 4.5 et 6.1 mm). Un trop fort transfert balistique peut donc diminuer la précision de la méthode pour les monocristaux semi-transparents de petites tailles et ainsi mener à une surestimation de la diffusivité thermique.

Les données présentées dans la section précédente constituent donc une borne supérieure de la diffusivité thermique des monocristaux d'olivine. Cependant, le bon accord entre les propriétés du monocristal et celles des roches, pour lesquelles les interactions entre transfert balistique et intrinsèque sont limitées, suggère néanmoins que les mesures sur les monocristaux sont fiables.



**Figure 5.4 :** Illustration des effets du transfert de chaleur par rayonnement balistique pour trois échantillons différents. (a) lherzolithe 00BAIX – faible transfert balistique. (b) monocristal d’olivine #12 de 13 mm de long (2<sup>ème</sup> série de mesures, présentée dans le chapitre 6) – bonne séparation des transferts balistique et intrinsèque. (c) monocristal #0 – 4.5 mm de long – superposition des deux types de transfert.

### 5.2.3 Données obtenues par la méthode Angström (3).

Les données obtenues par la méthode Angström, sur trois des monocristaux utilisés dans l'étude précédente, sont résumées dans le tableau (5.4). Les monocristaux ont été le plus souvent taillés en parallélépipèdes de 3.5 mm de côté et coupés en deux dans le sens de la longueur. Les mesures ont été faites par conséquent suivant la condition  $l'=2.l$ , pour laquelle le modèle numérique prévoit une erreur inférieure à 1% pour une atténuation de 4.1 environ. Afin d'obtenir des contraintes supplémentaires sur le transfert d'échelle cristal-roche, des échantillons de la dunite OMAN et de l'agrégat synthétique d'olivine SYN1 ont été également mesurés.

	Longueur	Diffusivité thermique mesurée ( $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ )	Diffusivité thermique modélisée	Ecart avec mesures par la méthode 2
[100]	7.1	2.55 ( $\pm 0.05$ )	-	-7%
[010]	6.5	1.50 ( $\pm 0.05$ )	-	-11.7%
[001]	5.8	2.21 ( $\pm 0.06$ )	-	-11.2%
SYN1	5.8	2.02 ( $\pm 0.03$ )	2.035	-6.7%
OMAN	longueur variable	2.05 ( $\pm 0.05$ )	2.035	-8,9%

**Tableau 5.4 :** Mesures de la diffusivité thermique des monocristaux et agrégats polycristallins d'olivine par la méthode 3 (Angström) et comparaison entre valeurs mesurées avec la méthode transitoire (2) et les diffusivités calculées pour les agrégats « isotropes » en utilisant le tenseur de diffusivité thermique de l'olivine obtenu avec la méthode 3.

L'écart avec la méthode 2 mesuré pour les monocristaux à température ambiante semble dépendre de la direction mesurée. En particulier, les mesures suivant les axes [010] et [001] sont surestimées par la méthode 2, et ce conformément au problème de taille d'échantillon discuté plus haut. La méthode 3 ne souffre pas de ce problème si le signal est adapté aux conditions aux limites (condition sur l'atténuation), ce qui a toujours été le cas des mesures présentées ci-dessus. Par contre, les incertitudes sur la position des thermocouples peuvent induire une erreur systématique de 3 à 5% dans ces mesures.

Comme pour les mesures effectuées par la méthode 2, l'accord entre les propriétés calculées et mesurées sur agrégats avec la méthode 3 suggère que les joints de grains ou les défauts cristallins n'ont pas d'influence sur le transport thermique sous conditions ambiantes. Cependant, l'écart entre les mesures sur les agrégats obtenues avec les deux méthodes met en évidence une différence réelle et reproductible, qui n'est pas imputable à un problème interne de la méthode 2, puisque les mesures sur les dunites ont été effectuées sur des échantillons de grande taille (10mm), ce qui est suffisant pour séparer les transferts balistiques et intrinsèques. Cette différence sera discutée dans le paragraphe 5.3.

### 5.2.4 Données obtenues sur les monocristaux de quartz et sur une quartzite.

Mettant à profit les mesures de calibration de la méthode Angström (3) réalisées sur du quartz, une étude similaire à celle menée sur l'olivine a été conduite sur une quartzite du massif de Saint Barthélemy (SB114 - Pyrénées). Cette quartzite présente plusieurs avantages. Elle est monphasée, présente une fabrique cristallographique bien marquée (fabrique mesurée par Antoine Gauffriau (Gauffriau, 2000) - fig.5.6), tout en ayant une microstructure mylonitique caractérisée par des tailles de grains extrêmement petites (photo de lame mince - fig.5.5). La masse volumique de la quartzite est très proche de celle du monocristal, suggérant une faible porosité. De plus, le quartz étant transparent du point de vue du transport radiatif (au moins jusqu'à 700°C - voir données sur monocristaux), le transfert d'échelle entre agrégat et monocristal peut être étudié à haute température. Le transport radiatif n'interférera pas avec le transport thermique par le réseau cristallin que l'on veut exclusivement étudier ici.

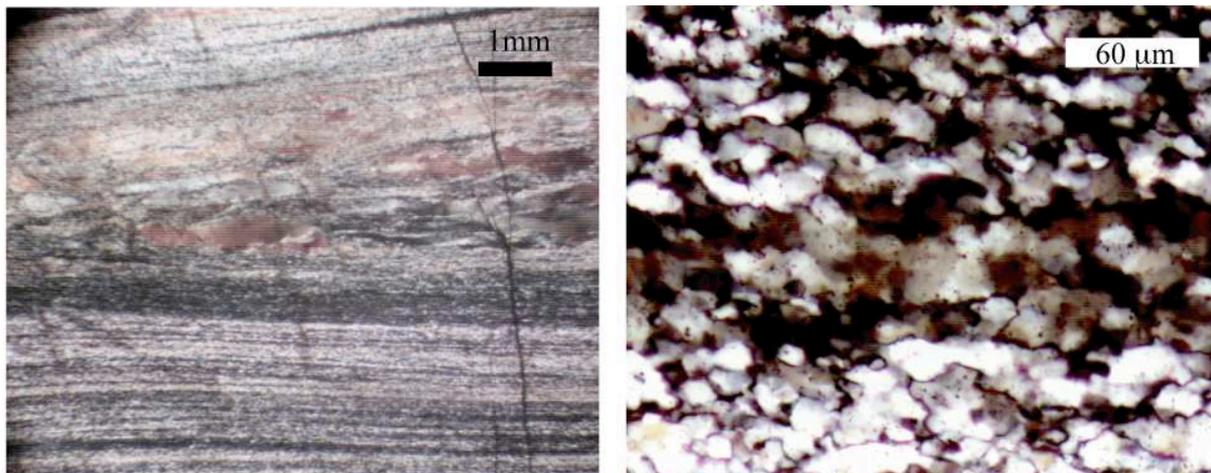


Figure 5.5 : Photo prise en lumière polarisée de la quartzite SB 114 en lame mince (prise dans le plan (XZ) avec la linéation X horizontale) et mise en évidence de la microstructure (A gauche, rubannements de quartz et à droite, grains recristallisés très fins). Extrait de Gauffriau (2000).

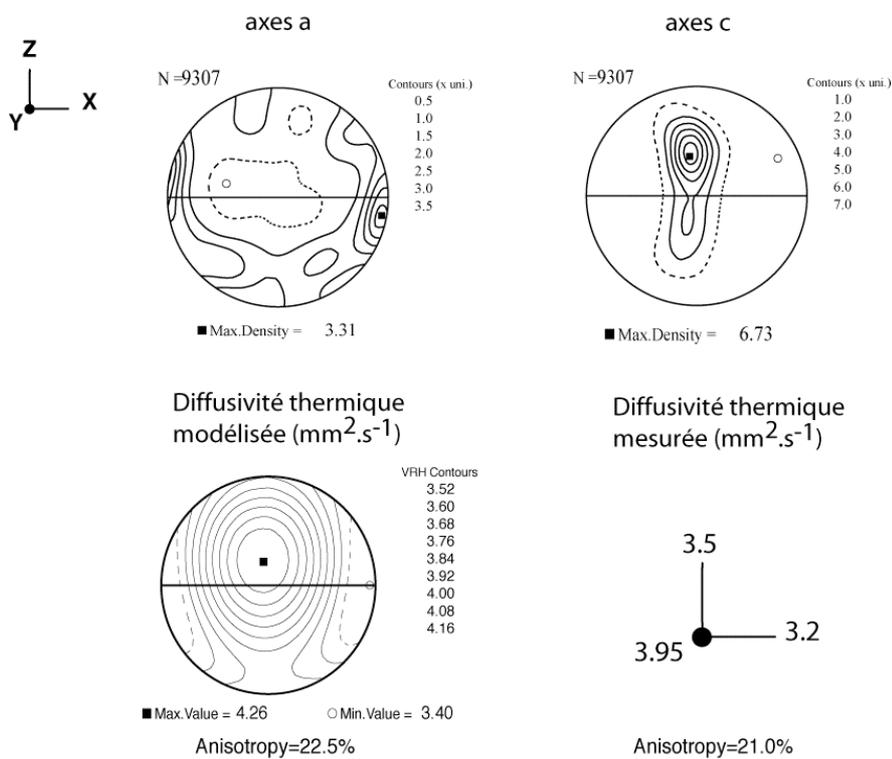
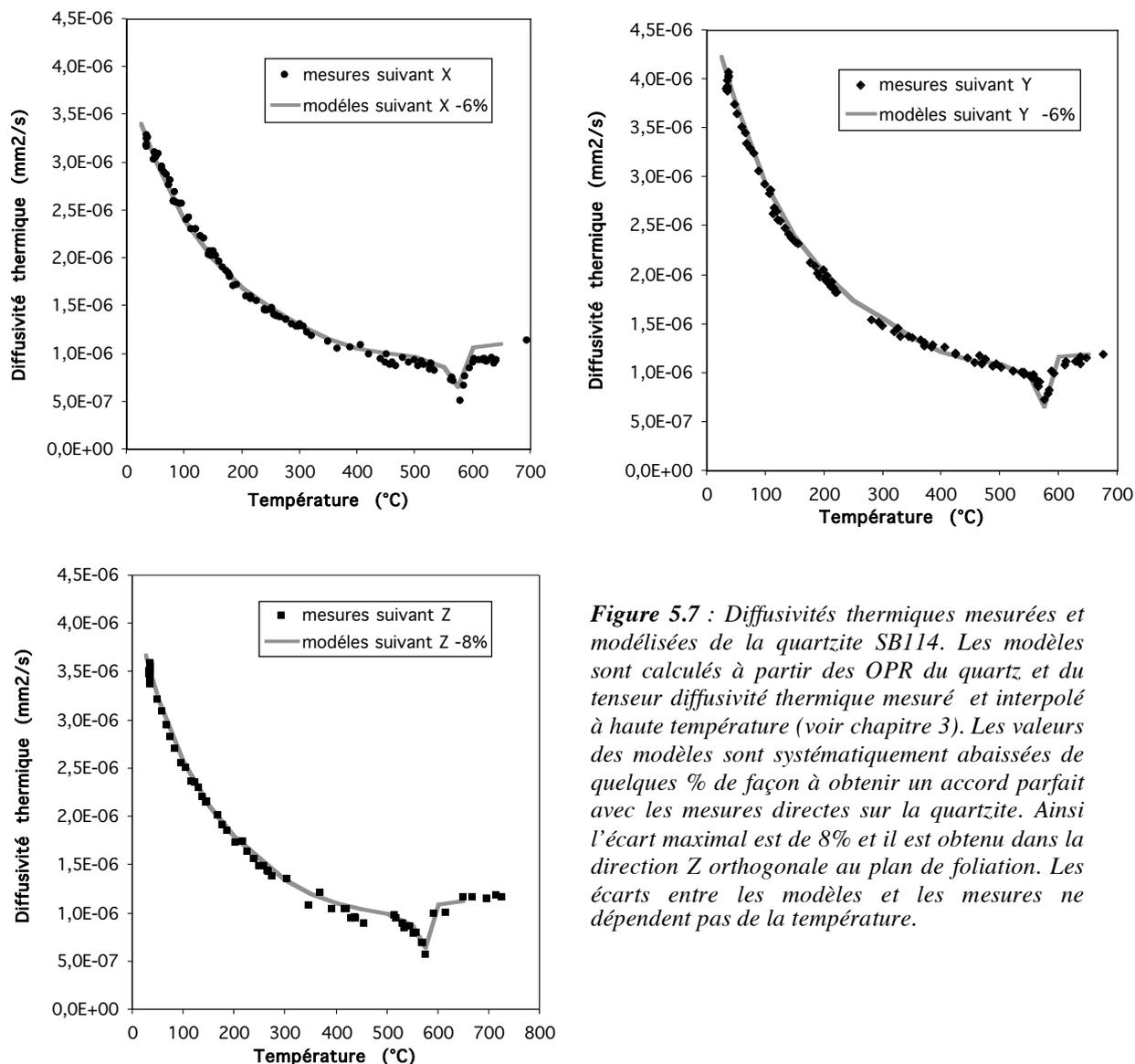


Figure 5.6 : Orientations préférentielles de réseau du quartz dans la quartzite SB114 (Gauffriau, 2000), modélisation et mesure de la diffusivité thermique à 35°C. Une différence d'environ 6-7% est observée entre les modèles et les mesures. Les erreurs de mesures sont d'environ 3%.

La fabrique cristallographique de cette quartzite est toutefois inhomogène avec, en particulier, des variations locales de l'angle entre le maximum de concentration des axes  $c$  et la foliation (Gauffriau, 2000). La diffusivité thermique a donc été calculée en intégrant un grand nombre de mesures d'orientations cristallographiques (environ 10000 grains localisés dans différentes zones de la lame mince étudiée). Les calculs de la diffusivité thermique (moyenne VRH) ont été menés par incréments de 50°C jusqu'à 650°C, en interpolant l'ensemble des données du tenseur mesuré sur le monocristal de quartz. Le maximum de diffusivité thermique se situe suivant la direction  $Y$  (normale à la linéation dans le plan de foliation) et le minimum suivant la linéation  $X$  (fig. 5.6). L'anisotropie maximale calculée (entre les directions  $X$  et  $Y$ ) est de 22%. Les mesures de diffusivité thermique ont été réalisées sur la quartzite par la méthode 3 sous pression ambiante et à des températures comprises entre 35°C et 900°C. Des carottes de 6 mm de diamètre et  $l=8.5$  mm de longueur (conditions  $l'=2.l$ ) ont été utilisées.

À température ambiante (35°C), les mesures dans les directions  $X$  et  $Y$  montrent une diffusivité thermique mesurée plus faible d'environ 6-7% que celle modélisée et une anisotropie identique (fig. 5.6). Cette différence peut s'expliquer par le fait que la roche comporte une grande quantité d'impuretés, qu'elle soient d'origine chimique ou liées à la microstructure. Ceci est accentué par une taille de grain très fine et par le fait que les propriétés d'un agrégat naturel (donc chimiquement impur) et celle d'un monocristal synthétique sont ici comparées. Cependant, compte tenu des erreurs systématiques de mesure, commises sur le monocristal de quartz dont dépendent les modèles (mesures du chapitre 3) et sur la quartzite (environ 3% si on considère l'erreur sur la position des thermocouples), cette différence apparaît comme faible : pour quantifier l'erreur commise, il faudrait réaliser un grand nombre de mesures sur un nombre élevé de carottes, ce qui n'a pu être réalisé dans la thèse. Une différence de 6-7% montre néanmoins que les effets de la microstructure et des impuretés à l'échelle de la roche demeurent limités, conformément à ce qui est prédit par les théories de diffusion des phonons par les impuretés. Dans la direction  $Z$ , les diffusivités mesurées sont toutefois inférieures d'environ 8% à celles calculées. Cette différence accentuée est attribuée à une microfracturation parallèle au plan de foliation. La pression axiale de 7 MPa appliquée ici n'est pas assez élevée pour fermer ces microfractures.

Les différences entre mesures et modèles observées à température ambiante sont conservées à haute température : les dépendances en températures sont donc identiques à l'échelle du cristal et de la roche (fig. 5.7). La transition de phase dans la quartzite est observée de la même manière que dans le monocristal de quartz, et l'anisotropie ne s'inverse pas au cours de la transition, ce qui confirme les résultats obtenus sur le monocristal par la méthode 3 (s'opposant une nouvelle fois aux résultats de la méthode 2). Par ailleurs, l'accord entre les dépendances en température observées pour les cristaux et pour la quartzite suggère que les mesures ne sont pas affectées par une microfracturation thermique lors de la montée en température. De plus, les mesures sur la quartzite après refroidissement sont en bon accord avec celles réalisées sur l'échantillon non chauffé. L'absence d'inversion à la transition de phase (augmentation de la diffusivité selon l'axe  $a$ , celui-ci devenant plus conducteur que l'axe  $c$  d'après Höfer, (2003)) n'est donc pas due à une éventuelle microfracturation du cristal utilisé dans les mesures avec la méthode 3, comme il l'avait été suggéré dans le chapitre 3 pour expliquer la différence avec la méthode 2. Les mesures présentées dans cette étude semblent donc caractériser un comportement intrinsèque du quartz. La différence de comportement par rapport à l'étude précédemment réalisée avec la méthode 2 (Höfer, 2003) demeure toutefois non-expliquée. Des nouvelles mesures en utilisant les deux méthodes sont nécessaires pour mieux contraindre la diffusivité thermique selon l'axe  $a$  à haute température.



**Figure 5.7 :** Diffusivités thermiques mesurées et modélisées de la quartzite SB114. Les modèles sont calculés à partir des OPR du quartz et du tenseur diffusivité thermique mesuré et interpolé à haute température (voir chapitre 3). Les valeurs des modèles sont systématiquement abaissées de quelques % de façon à obtenir un accord parfait avec les mesures directes sur la quartzite. Ainsi l'écart maximal est de 8% et il est obtenu dans la direction Z orthogonale au plan de foliation. Les écarts entre les modèles et les mesures ne dépendent pas de la température.

### 5.2.5 Conclusion : transferts de chaleur dans les matériaux polycristallins.

À la lumière des résultats obtenus pour les monocristaux et agrégats polycristallins d'olivine et de quartz, deux conclusions importantes apparaissent :

- (i) le transport de chaleur par les phonons n'est pas modifié par la microstructure de la roche: la taille des grains, les imperfections et éventuellement les microfractures fermées (les échantillons étudiés ont tous des porosités très faibles) n'ont que peu d'effet. Ceci est valable sur une large gamme de température, ce qui montre la prédominance des interactions phonons-phonons sur les interactions phonons-défauts. L'étude sur la quartzite est d'autant plus concluante qu'elle correspond à un cas extrême : taille de grains fine, comparaison avec un cristal synthétique. Les différences importantes obtenues classiquement dans les études antérieures (30%

environ) sont donc éventuellement dues à des problèmes de qualité des échantillons de roche (souvent altérés pour les péridotites), mais la principale raison est probablement l'utilisation de différentes méthodes de mesures pour les cristaux et roches.

- (ii) Les modèles numériques permettent de modéliser non seulement l'anisotropie, mais aussi les valeurs absolues des diffusivités thermiques. Cependant, ces modèles n'ont pas été testés sur des agrégats comportant plusieurs phases dont les propriétés sont très différentes et dont les proportions sont équivalentes. Les péridotites étudiées montrent un effet prépondérant de l'olivine sur l'anisotropie et sur les valeurs absolues. Les phases secondaires ne semblent avoir que peu d'effets (faibles proportions, valeurs absolues similaires, fabriques cristallographiques faibles). Les granites constitueraient des systèmes polyphasés intéressants puisqu'ils sont composés de phases dont les propriétés de transport thermique sont très différentes : le quartz est très conducteur tandis que les feldspaths ou les micas le sont faiblement.

Enfin, pour l'olivine, la mesure sur la dunité VS11 montre que la composition chimique de l'olivine et tout particulièrement sa teneur en fer ont un effet significatif sur la diffusivité thermique. Un enrichissement de 7 % en fayalite conduit à une diminution de 15 % de la diffusivité thermique. Cet effet de la proportion du fer dans l'olivine sur la diffusivité thermique peut s'avérer non négligeable dans certains contextes géodynamiques qui font intervenir des compositions mantelliques plus ou moins fertiles (voir discussion sur les cratons, chapitre 7). Une étude systématique de la diffusion thermique sur des matériaux synthétiques de compositions variables serait de ce point de vue intéressante.

### **5.3 Propriétés physiques anisotropes de l'olivine**

Les modèles théoriques de diffusion thermique demeurent toujours approximatifs pour les cristaux complexes. En particulier, le rôle relatif des phonons optiques et acoustiques, l'effet de la structure cristallographique, ou encore la quantification de l'anisotropie sont encore mal contraints. Au sein d'une même structure cristallographique et d'une même espèce chimique, la variation de la diffusivité thermique suivant la direction cristallographique considérée (anisotropie) peut permettre de discuter ces problèmes. La discussion suivante propose de comparer les diverses propriétés physiques de l'olivine impliquant les phonons et de montrer les limitations des modèles théoriques.

#### **5.3.1 Anisotropie à l'échelle du cristal**

L'anisotropie de la diffusivité thermique des cristaux d'olivine ne dépend pas des méthodes utilisées. Les mesures rendent donc compte d'une propriété intrinsèque du cristal. Cette anisotropie demeure difficile à expliquer de manière quantitative. Le calcul de l'anisotropie de la diffusivité ou de la conductivité thermique est en effet complexe et très peu documenté (Slack, 1979). La relation (2.23) proposée dans le chapitre 2 pour le calcul du libre parcours moyen des phonons ne convient que pour les solides monoatomiques tels que les gaz rares et ne peut s'appliquer aux minéraux complexes anisotropes. Les calculs utilisant cette relation ne sont que très approximatifs et ne rendent pas compte de l'intensité de l'anisotropie

(e.g., Chai et al., 1996; Kobayashi, 1974). Cependant, cette relation fait intervenir des termes anisotropes : ce sont ces termes qui vont être discutés.

À la lumière de l'étude du chapitre 4, une anisotropie du libre parcours moyen ou du temps de vie des phonons est attendue. L'ensemble des paramètres déduits des mesures sur les monocristaux d'olivine est présenté dans les tableaux 5.5 et 5.6 ci-dessous.

axes	Diffusivité thermique (mm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	Vitesses des phonons acoustiques* m.s <sup>-1</sup>	Libre parcours moyen des phonons (Å)	Temps de vie des phonons (ps)
[100]	2.73	6880	11.9	0.173
[010]	1.70	5810	8.78	0.15
[001]	2.49	6100	12.2	0.20

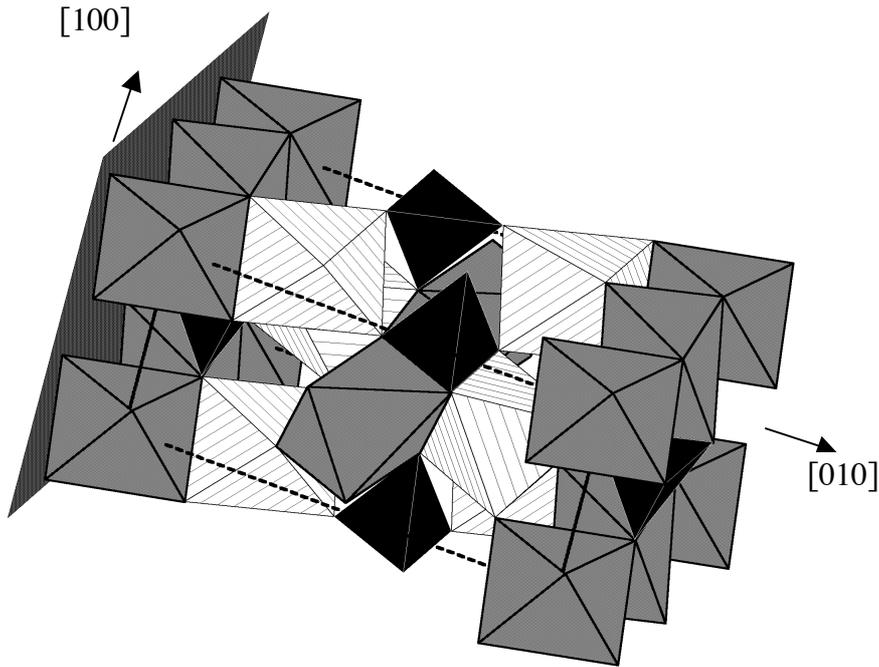
**Tableau 5.5** : paramètres concernant la diffusivité thermique par des vibrations du réseau cristallin (phonons) obtenus à partir des mesures de diffusivité thermique sur cristaux d'olivine en utilisant la méthode 2.

\* vitesses des phonons acoustiques calculées à partir des tenseurs élastiques de Abramson et al. (1997).

	Anisotropie [100]/[010] en %	Anisotropie [100]/[001] en %	Anisotropie [001]/[010] en %
Diffusivité thermique	46.2	9.2	37.7
Vitesse des phonons	16.8	12.0	4.9
Libre parcours moyen	30.2	-2.5	32.6
Temps de vie	14.2	-14.4	28.6

**Tableau 5.6** : anisotropies de ces paramètres.

L'anisotropie de diffusion thermique entre l'axe [010] et les 2 autres axes est bien expliquée par une anisotropie de vitesses de phonons et de leur libre parcours moyen (ou temps de vie) (fig. 5.9). En particulier, elle confirme qu'une vitesse de phonon élevée s'accompagne d'un libre parcours moyen plus grand. En effet, des forces inter-atomiques plus importantes entraînent une vitesse des phonons plus grande et limitent l'amplitude de vibration des atomes et donc, les effets d'anharmonicité (e.g., Brüesch, 1982). Pour une fréquence identique (température identique d'après la distribution de Bose-Einstein), un phonon dont la vitesse est plus élevée aura donc un libre parcours moyen plus important. Cette propriété est vérifiée sur les tectosilicates tels que le quartz et les feldspaths (Höfer and Schilling, 2002), pour lesquels une relation linéaire est obtenue entre diffusivités thermiques, vitesses acoustiques et libres parcours moyens. Pour l'olivine, des arguments d'ordre cristallographique expliquent aussi ce comportement (fig. 5.8). La propagation des phonons dans la direction [010] nécessite le franchissement de divers plans qui correspondent à la disposition des deux types de sites octaédriques. Les sites octaédriques *M2*, de grande taille, comportent de plus des liaisons plus faibles (voir données de diffraction de rayon X à haute pression et température (Hazen, 1976)). La propagation de la chaleur dans la direction [010] nécessite le franchissement d'une alternance de plans de caractéristiques différentes (taille des sites, constante de forces impliquées) et implique donc une diffusion accrue des phonons.



**Figure 5.8 :** Structure cristallographique de l'olivine. En noir, tétraèdres  $[\text{SiO}_4]^{4-}$ , en blanc rayé, octaèdres des sites M2 et en gris, octaèdres des sites M1. Le plan représente le plan (010). Les tirets délimitent la maille élémentaire.

Cependant, la différence observée entre les axes  $[100]$  et  $[001]$  ne vérifie pas ces raisonnements qualitatifs. Pour l'axe  $[100]$ , la plus importante vitesse des phonons est clairement le facteur qui permet une diffusion plus rapide de la chaleur (fig. 5.9). En effet, le libre parcours moyen et le temps de vie des phonons dans la direction  $[001]$  sont plus importants que dans la direction  $[100]$  (fig. 5.9). Une plus grande vitesse de phonons ne s'accompagne pas dans ce cas d'un plus grand libre parcours moyen.

L'examen de cette anomalie apparente montre qu'elle peut être mise en rapport avec d'autres propriétés contrôlées par l'anharmonicité du réseau cristallin (Brüesch, 1982). Dans le tableau 5.7, l'expansion thermique linéaire  $\alpha_i$  (Bouhifd et al., 1996) et les paramètres de Grüneisen acoustique et thermodynamique sont reportés. Le paramètre de Grüneisen acoustique a été calculé suivant chaque direction  $i$  à l'aide de la relation générale liant ce paramètre aux fréquences de vibrations des modes de phonons acoustiques (Kieffer, 1982) (eq. 5.3) en utilisant les variations des vitesses acoustiques ( $v_i$  est la vitesse des phonons dans la direction  $i$ ) avec la pression  $P$  (Abramson et al., 1997):

$$\gamma_i = -\frac{\partial \ln(v_i)}{\partial \ln(V)} = \frac{1}{3} + \frac{K_T}{v_i} \left( \frac{\partial v_i}{\partial P} \right)_T \quad (5.3)$$

où  $K_T$  est le module de compressibilité.

Le paramètre de Grüneisen thermodynamique est obtenu à l'aide de paramètres macroscopiques selon la relation 5.4 :

$$\gamma_{th,i} = \frac{\alpha_i}{\beta_i \cdot \rho \cdot C_v} \quad (5.4)$$

où  $\beta_i$  est la compressibilité linéaire (Abramson et al., 1997),  $\rho$  la densité et  $C_V$  la capacité thermique à volume constant. Ce dernier paramètre représente la somme pondérée des paramètres de Grüneisen microscopiques relatifs à tous les modes de phonons (acoustiques et optiques). La contribution de chaque mode est pondérée par sa contribution à la capacité thermique à une température donnée (Kieffer, 1982). Ce paramètre caractérise donc l'anharmonicité globale du réseau cristallin.

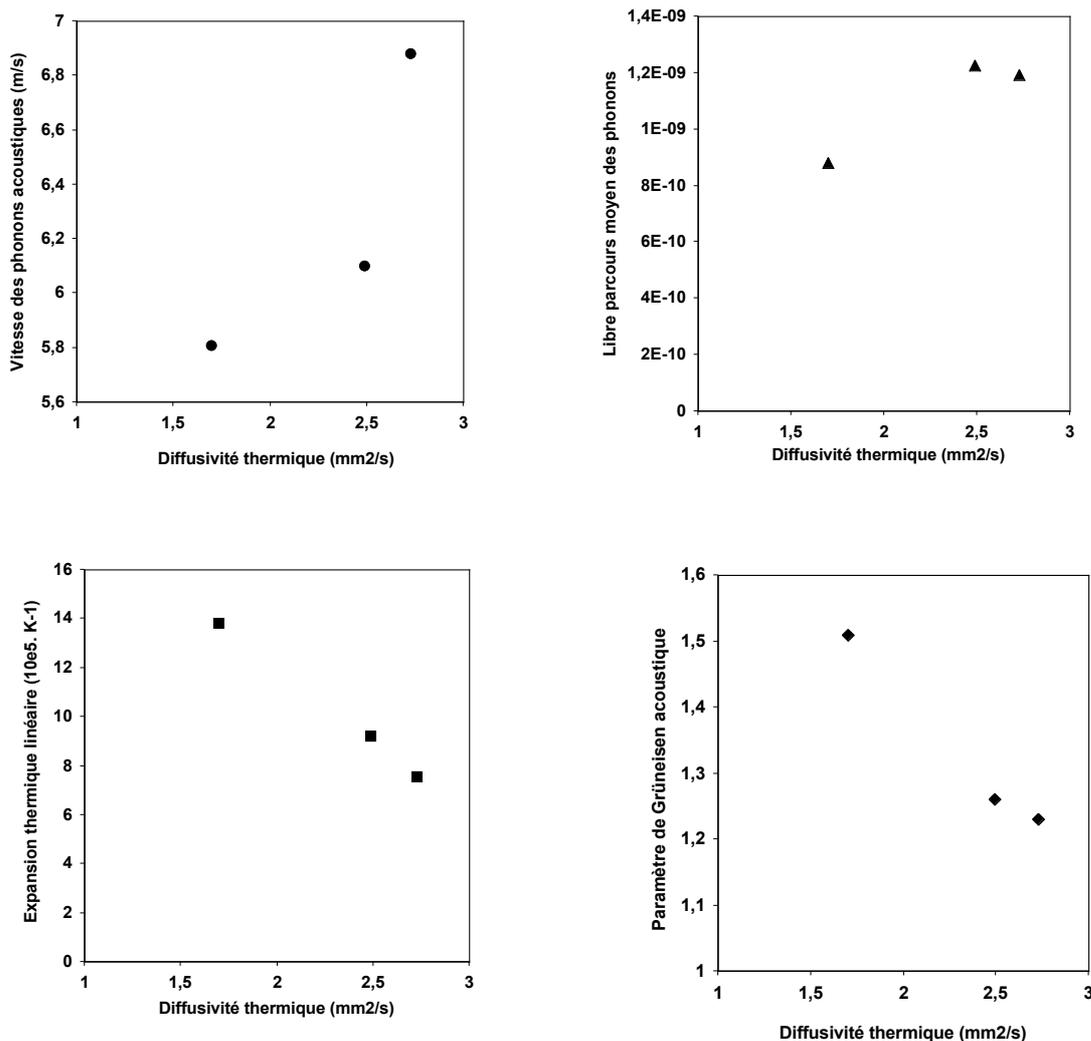
axes	Libre parcours moyen des phonons (Å)	Libre parcours moyen des phonons transversaux (Å)	Compressibilité linéaire ( $\text{GPa}^{-1}$ )	Expansion thermique ( $\text{K}^{-1}$ ) linéaire	Paramètre de Grüneisen thermodynamique	Paramètre de Grüneisen acoustique
[100]	11.7	16.8	0.00145	$7.55 \cdot 10^{-6}$	1.88	1.23
[010]	8.78	11.1	0.00277	$1.38 \cdot 10^{-5}$	1.79	1.51
[001]	12.2	16.2	0.00215	$9.17 \cdot 10^{-6}$	1.53	1.26

*Tableau 5.7 : paramètres physiques liés aux propriétés anharmoniques du réseau cristallin.*

L'expansion thermique et la diffusivité thermique sont des propriétés macroscopiques qui intègrent l'ensemble des phénomènes microscopiques liés à l'anharmonicité des potentiels inter-atomiques. En particulier, elles prennent en compte l'activation des modes de phonons optiques et acoustiques. Ces deux propriétés macroscopiques sont bien corrélées (fig. 5.9) pour le cristal d'olivine.

La description de la diffusivité thermique, lorsqu'elle ne tient compte que des modes de phonons acoustiques, induit manifestement des prédictions contradictoires, telles que l'apparente anomalie entre les propriétés des phonons se propageant selon les axes [100] et [001]. En effet :

- Le libre parcours moyen des phonons, qui caractérise l'anharmonicité, montre des effets anharmoniques moins forts dans la direction [001] que dans la direction [100].
- Les vitesses acoustiques suggèrent en contraste une anharmonicité plus forte dans la direction [001].
- Les paramètres de Grüneisen acoustiques calculés pour ces deux directions diffèrent peu, et la diffusivité thermique semble bien corrélée à ce paramètre (fig.5.9).
- Enfin, le paramètre de Grüneisen thermodynamique, qui prend en compte tous les modes phonons, montre que l'anharmonicité est la plus faible dans la direction [001].



**Figure 5.9** : Relation entre divers paramètres impliquant les phonons et la diffusivité thermique. Tous les paramètres sont calculés en utilisant les phonons acoustiques (voir texte).

Ces données contradictoires prouvent que la description des propriétés de diffusion thermique à l'aide des propriétés des ondes acoustiques est insuffisante. La vitesse de groupe des phonons n'est pas a priori une moyenne des vitesses acoustiques, telle qu'elle a été calculée dans le tableau 5.5. Même dans le cas où seulement les modes acoustiques sont pris en compte, diverses modifications peuvent être apportées au modèle présenté ci-dessus. Le libre parcours moyen est classiquement calculé en considérant que le poids des phonons longitudinaux et transverses est le même dans le calcul de la moyenne de la vitesse acoustique (tableau 5.7). Si seulement les phonons transverses sont utilisés, alors le libre parcours moyen dans la direction [001] est plus faible que dans la direction [100], ce qui s'accorde avec le paramètre de Grüneisen acoustique. La différence obtenue est accentuée ou diminuée selon la moyenne utilisée pour le calcul de la vitesse des phonons et peut avoir une influence pour des libres parcours moyens assez proches. Par ailleurs, ces vitesses sont calculées en considérant uniquement les phonons du centre de zone de Brillouin et en négligeant les relations de dispersion en bord de zone de Brillouin. En effet, ces relations de dispersion montrent que la vitesse de groupe des phonons diminue fortement en bord de zone. Pour les modes

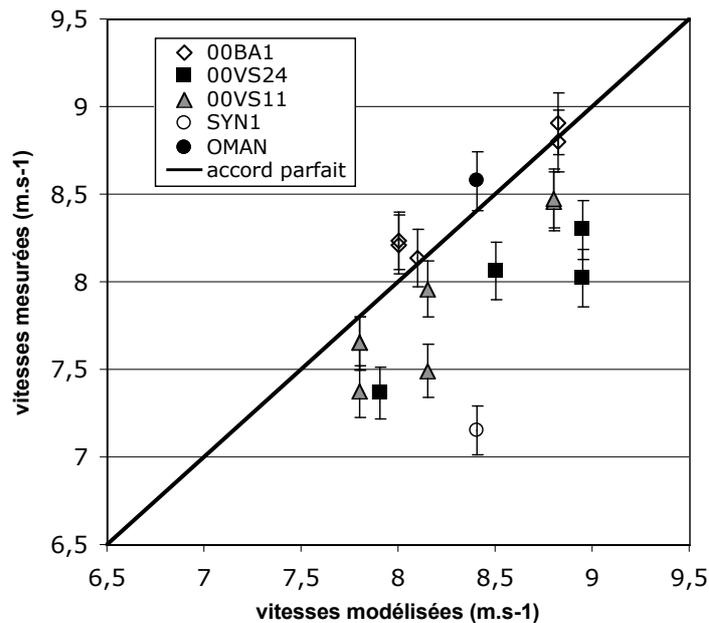
acoustiques, la combinaison du facteur de Bose-Einstein et des relations de dispersion permettrait de calculer une moyenne réaliste de la vitesse de groupe des phonons acoustiques.

Dans le cas où les modes de phonons optiques interviennent, le paramètre de Grüneisen thermodynamique indique que la direction [001] est celle selon laquelle les effets anharmoniques sont les plus faibles, donc qu'elle devrait être la plus conductrice. Ce n'est pas le cas. De plus, pour les minéraux complexes, les phonons optiques ne semblent pas contribuer fortement à la conduction thermique (e.g., Roufosse and Klemens, 1973), et à plus forte raison à température ambiante. Malgré cela, les phonons optiques peuvent entrer en interaction avec les modes acoustiques, si les lois de conservation sont vérifiées. Des interactions accrues dans la direction [100] expliqueraient pourquoi dans cette direction, malgré une vitesse de phonons élevée, le libre parcours moyen est relativement faible.

Tous ces éléments montrent à quel point le rôle des phonons optiques ainsi que les contributions relatives des phonons acoustiques longitudinaux et transversaux sont mal connues. Une vitesse de phonons acoustiques élevée parallèlement à l'axe [100] n'entraîne pas une diffusion thermique élevée et n'est pas associée à un libre parcours moyen plus important selon cet axe. Cela prouve que la diffusion thermique n'est pas seulement associée aux modes de phonons acoustiques et que la vitesse de groupe des phonons ne peut pas être calculée comme une simple moyenne des vitesses des ondes de compression et de cisaillement. Les modèles doivent faire intervenir les contributions relatives des modes longitudinaux et transverses, les relations de dispersion et également le rôle des modes de phonons optiques. Pour ces derniers, même si les paramètres anharmoniques sont calculables directement à partir des spectres de réflexion I.R. ou par diffusion Raman, les effets anharmoniques sur les modes de vibrations en fonction de l'orientation des cristaux ne sont pas étudiés. Ils seraient pourtant d'une grande aide pour l'interprétation de l'anisotropie du transport de chaleur dans le cristal d'olivine.

### 5.3.2 Anisotropie à l'échelle de la roche

À l'échelle de la roche, l'anisotropie est à relier à celle du monocristal d'olivine et aux OPRs de ce minéral (cf. chapitre 4). Outre la diffusivité thermique, les vitesses des ondes de compression ont été modélisées et mesurées sous conditions ambiantes pour les dunités 00VS24, 00VS11, OMAN, SYN1 et la lherzolite 00BA1 (méthode des temps de vols). Pour 00VS11, les modèles de vitesse prennent en compte l'effet de la composition (Fo84). Les mêmes carottes ont été utilisées pour les mesures thermiques et acoustiques. Si les propriétés thermiques mesurées ajustent bien les modèles, les vitesses acoustiques montrent des désaccords plus ou moins importants, surtout concernant les valeurs absolues (fig. 5.10). Des différences comprises entre 3 et 10% sont mesurées. Elles sont d'autant plus significatives que contrairement aux mesures de diffusivités thermiques, les erreurs de mesures des vitesses acoustiques sont inférieures à 2%.



**Figure 5.10** : comparaison des vitesses des ondes de compression mesurées à celles modélisées, pour les mêmes échantillons pour lesquels la diffusivité thermique a été mesurée. Les barres d'erreurs correspondent à une erreur de mesure de 2%. Cette valeur est une borne supérieure de l'erreur commise pour la méthode utilisée (méthode des temps de vols).

Pour tous les échantillons, l'anisotropie sismique prédite à partir des données sur le monocristal d'olivine est bien observée lors des mesures. Pour la lherzolite 00BA1 et la dunite OMAN, les valeurs absolues mesurées sont de plus en bon accord avec les modèles. La dunite synthétique SYN1 présente par contre des vitesses d'ondes acoustiques beaucoup plus faibles que celle prédite par la modélisation. Cet échantillon montre en effet quelques fractures développées dans le plan perpendiculaire à la propagation des ondes acoustiques (et de la chaleur). Ces fractures, probablement associées à la décompression de l'échantillon, affectent beaucoup plus les vitesses acoustiques que la diffusivité thermique. Pour 00VS11 et 00VS24, les vitesses sismiques mesurées sont inférieures aux modèles et la reproductibilité des mesures réalisées sur deux carottes différentes dans la même direction est faible. Un désaccord entre modèles et mesures est aussi observé dans des mesures récentes des vitesses des ondes de compression en fonction de la pression (0-400 MPa) conduites sur des échantillons très similaires provenant de la zone d'Ivrée, et notamment de Balmuccia (Pros et al., 2003). Ces mesures montrent que pour certaines dunites, la pression n'a aucun effet sur les vitesses acoustiques, montrant que les microfractures ont des effets très faibles. Par contre, pour d'autres dunites, une pression de 100 à 200 MPa est nécessaire pour refermer les fractures, ce qui conduit à une augmentation des vitesses jusqu'à 200 MPa.

Ce comportement concernant les vitesses des ondes acoustiques est bien connu pour les roches, puisqu'une micro-fracturation est toujours présente en raison de la décompression et du refroidissement lors de la remontée en surface. Cette microfracturation a des effets différents sur les propriétés acoustiques et thermiques. Pour la propagation des ondes acoustiques, la qualité du contact mécanique entre les grains et au sein des microfractures est primordiale. Une pression supérieure à 200 MPa est nécessaire pour assurer une propagation optimale des ondes acoustiques (Barruol, 1993). Pour la diffusion thermique, les fractures ouvertes remplies d'air (peu conducteur de la chaleur) diminuent effectivement les propriétés de transport thermique. Ce problème est assimilé au problème de contact thermique abordé dans le chapitre 3. Une pression très faible (quelques dizaines de MPa) est suffisante pour rendre la diffusion thermique efficace et éviter l'effet de la microfracturation. En effet, il a été montré que pour des roches traitées thermiquement (granites artificiellement fracturés par chauffage/refroidissement), les fractures diminuent fortement la diffusion thermique, mais leur effet disparaît totalement en comprimant l'échantillon à 50 MPa environ (Seipold, 2001;

Seipold et al., 1998). La qualité du contact mécanique au sein des microfractures ne joue donc pas un rôle primordial. C'est plutôt la diminution de la proportion de l'espace poreux (rempli d'air) qui est importante. Cette diminution de l'espace poreux est maximale à faible pression, d'après des mesures de compressibilités en fonction de la pression (Walsh, 1965). Deux arguments montrent que l'espace vide lié aux microfractures est faible dans les péridotites étudiées :

- les masses volumiques mesurées sont proches de celles des monocristaux constitutifs et les porosités connectées mesurées sont très faibles.
- les mesures de diffusivité thermique à pression variable (chapitre 4) ne montrent pas une croissance non-linéaire de la diffusivité entre 0 et 100 MPa.

La comparaison des mesures de diffusivité thermique et vitesses acoustiques indique cependant que les roches étudiées sont microfracturées, mais que ces microfractures sont fermées. Ceci est confirmé par l'observation sur lames minces (fig. 5.3). Du point de vue des phonons, une microfracture fermée peut affecter localement la vitesse de propagation des phonons (à pression ambiante) et constituer un centre de diffusion des phonons (défaut planaire). Cependant, le libre parcours moyen des phonons à température ambiante (quelques Å, Tableau 5.5) est beaucoup plus faible que la distance séparant deux fractures successives. Tout comme les défauts et imperfections du réseau, les fractures fermées n'ont donc qu'un effet très faible sur le libre parcours moyen des phonons, celui-ci étant largement contrôlé par interactions phonons-phonons.

En conclusion, à pression ambiante, les microfractures 'fermées' n'affectent pas la diffusion thermique. Dans le cas où elles ont une orientation préférentielle, elle ne peuvent donc pas contribuer à une anisotropie de diffusivité thermique. Par contre la propagation des ondes acoustiques, qui est très influencée par le contact mécanique entre les grains et au niveau des fractures, est très affectée. Ces observations pour les péridotites sont en très bon accord avec les études systématiques réalisées sur des granites artificiellement fracturés (Seipold et al., 1998).

## **5.4 Valeurs absolues de la diffusivité thermique de l'olivine et des roches mantelliques sous conditions ambiantes.**

### **5.4.1 Comparaison des trois méthodes.**

Les valeurs de diffusivité thermique sous conditions ambiantes obtenues par les trois méthodes sont très différentes. Pour des roches riches en olivine et isotrope, on peut retenir approximativement :

- $D_{\text{moy}}=1.30 \text{ mm}^2.\text{s}^{-1}$  pour la méthode 1 (moyenne dunité 00VS24)
- $D_{\text{moy}}=2.25 \text{ mm}^2.\text{s}^{-1}$  pour la méthode 2 (dunité OMAN, moyenne dunité 00VS24)
- $D_{\text{moy}}=2.05 \text{ mm}^2.\text{s}^{-1}$  pour la méthode 3 (dunité OMAN)

La méthode 2 donne des valeurs supérieures d'environ 70% à celles de la méthode 1 et d'environ 10% à celles de la méthode 3. La différence de 10 % entre les méthodes 2 et 3 est difficilement explicable car ces deux méthodes ont été calibrées sur les mêmes matériaux (quartz et verres). Pour ces matériaux, les valeurs absolues de la diffusivité thermique obtenues avec les deux méthodes à température ambiante et à haute température (inférieures à 300-400°C, où le rayonnement n'est pas encore trop important) sont très semblables et très proches des valeurs standard. D'autre part, les mesures sur la dunité OMAN sont très reproductibles pour chacune des deux méthodes. La méthode 3 souffre d'incertitudes sur la position des thermocouples, qui peuvent entraîner une erreur d'environ 5%. La méthode 2 ne présente pas cet inconvénient et l'erreur attendue pour une roche (pour laquelle le transfert balistique est très faible) est inférieure à 3%. Une différence de 10% est toutefois acceptable pour deux méthodes dont le principe, la géométrie et le traitement des données sont très différents. Une telle différence est commune dans la comparaison entre plusieurs méthodes (e.g., Benigni et Rogez, 1997).

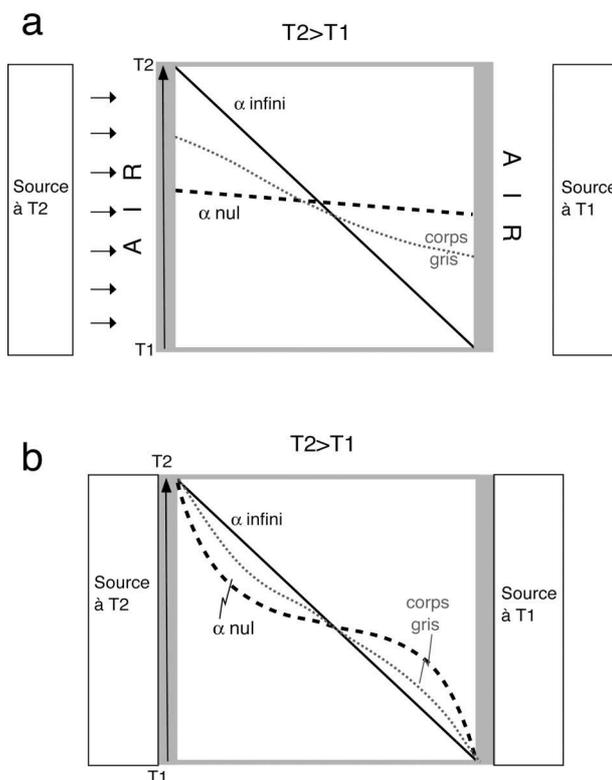
Par contre, la méthode 1 donne des valeurs très faibles comparées à celles obtenues par les méthodes 2 et 3. Les données à haute pression montrent qu'un mauvais contact entre la roche et le thermocouple ou le fil chauffant ne peut pas être à l'origine de cette différence. Un problème lié au principe même de la méthode pourrait par contre expliquer la sous-estimation de la diffusivité thermique par cette méthode. Le principal inconvénient de la méthode 1, comme beaucoup de méthodes utilisées pour des roches, est qu'elle ne peut pas être calibrée sur des monocristaux, mais seulement sur des céramiques [e.g., Benigni et Rogez, 1997] ou sur des roches à cause de la quantité de matériau requise. Ces céramiques sont généralement très opaques au rayonnement (grains très fins) et ne permettent pas de vérifier l'efficacité et la validité de la méthode pour des matériaux transparents ou semi-transparentes tels que les roches à gros grains (comme les péridotites de cette étude). Pour des méthodes non-stationnaires (pulses ou harmoniques), les effets de transferts balistiques ou directs ne sont généralement pas décelables expérimentalement et ne sont donc pas pris en compte lors du traitement des données. La séparation des transferts balistiques et intrinsèques est uniquement possible avec la méthode 2. Les effets des transferts balistiques sont doubles : d'une part l'énergie fournie (fil chauffant) est transmise sans diffusion thermique et n'élève donc pas la température du matériau comme elle le devrait théoriquement : dans ce cas, la diffusion thermique est sous-estimée (voir modèles numériques de Chui et Gardon, (1969)). D'autre part, cette énergie fournie peut directement chauffer le thermocouple sans diffusion thermique dans le matériau, et mener à une surestimation de la diffusivité thermique. Ceci est illustré par la figure 5.11, issue des modèles de Chui et Gardon, (1969). Dans ces modèles, deux cas sont envisagés : les sources sont en contact thermique (a) ou non (b) avec l'échantillon. Dans les deux cas, une opacité  $\alpha$  élevée permet d'équilibrer la température du matériau avec le gradient imposé par les deux sources. Les surfaces en contact avec l'échantillon sont aux températures  $T1$  et  $T2$  et l'équilibre s'établit grâce aux phonons. Dans le cas (a), si l'opacité est faible, les surfaces de l'échantillon ne sont pas équilibrées avec les sources et l'échantillon n'est pas chauffé (dans le cas extrême où  $\alpha$  est nul). Si l'échantillon absorbe partiellement le rayonnement émis, il élève progressivement la température de l'échantillon, qui est alors équilibrée par la conduction thermique. Cela donne un champ de température caractéristique en forme de S. Dans le cas (b), les effets sont moins importants puisque les surfaces de l'échantillon sont nécessairement aux températures des sources. Pour limiter les effets de ce type de transfert thermique, l'équilibre thermique entre la source et la surface de l'échantillon doit être le meilleur possible. La qualité du contact thermique doit être maximale et le déséquilibre généré par la source minimal. On peut ainsi éviter la configuration (a).

Dans la méthode harmonique (3), seulement 1 à 2 watts sont fournis au maximum de l'oscillation, et la température varie faiblement au cours du temps (période du signal d'au moins 30s). L'équilibre entre l'élément chauffant et l'échantillon est toujours atteint : la

température, mesurée par le TC1 est représentative de la température à la surface supérieure de l'échantillon et donc de la condition aux limites imposée. Cette configuration peut être représentée par le cas de la figure 5.11b.

La méthode 2 correspond au cas de la figure 5.11a, avec une surface absorbante (laque d'argent). La fraction d'énergie non absorbée à la surface est transmise directement au thermocouple (partie 1 de la réponse). Celle qui est absorbée élève la température de l'échantillon par conduction thermique. Cette méthode, bien qu'induisant un déséquilibre thermique, a donc l'avantage de le caractériser clairement. Cet effet peut donc être pris en compte lors du traitement de données.

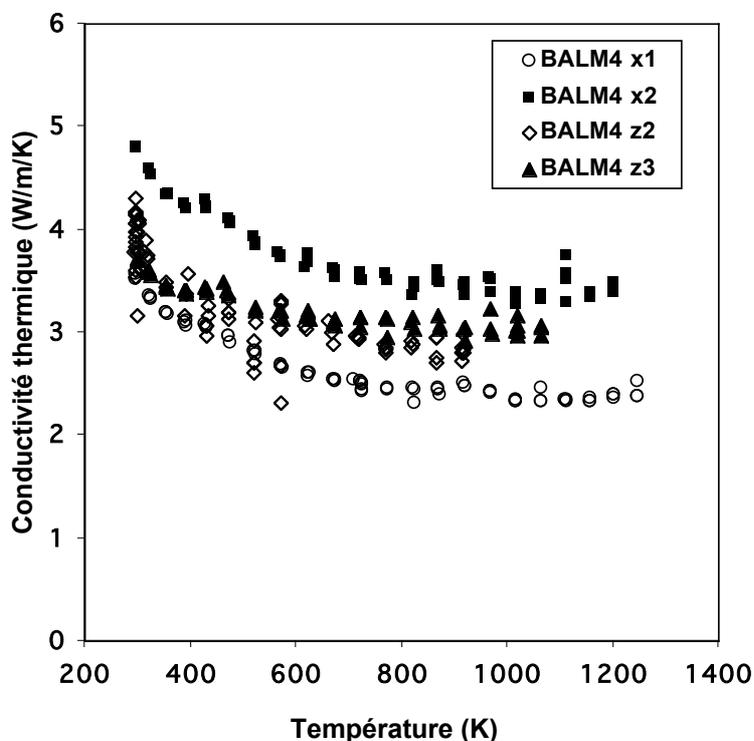
Par contre, dans la méthode 1, un pulse d'énergie de plus de 80J est délivré sur 3s, soit environ 30W. Si le matériau est transparent (un grain d'olivine par exemple), une part de l'énergie délivrée par le fil sera directement transmise par rayonnement et n'amènera pas une élévation de la température au point de contact entre le fil et le premier grain. Par conséquent, la condition aux limites appliquée à l'axe du cylindre est biaisée et la diffusivité thermique est sous-estimée. Par ailleurs, ce rayonnement direct peut atteindre le thermocouple. Dans le cas de la méthode 2, un thermocouple fin (temps de réponse très court, faible inertie) est utilisé, ce qui permet d'évaluer ce transfert direct. Pour la méthode 1, le transfert direct peut difficilement être enregistré par le thermocouple car son inertie est plus grande : il est en effet enrobé par le ciment et la roche et il intègre la température du matériau environnant. La présence d'un transfert balistique dans l'olivine (mis clairement en évidence par la méthode 2, fig. 5.4) conduit probablement à une sous estimation de la diffusivité mesurée par la méthode 1.



**Figure 5.11** : Illustration de l'effet du coefficient d'absorption sur le champ de température établi dans un matériau soumis à un gradient de température. (a) les transferts aux limites de l'échantillon se font seulement par rayonnement depuis les sources de chaleur aux températures  $T_2$  et  $T_1$ . (b) les transferts se font par contact thermique. L'axe vertical représente la température ( $T_2 > T_1$ ). D'après les modélisations numériques de Chui et Gardon, (1969) et Schilling et al. (2002).

Par ailleurs, bien que seulement les données de diffusivité thermique obtenues par la méthode 1 aient été exploitées (chapitre 4), les conductivités thermiques ont aussi été calculées. L'obtention de la diffusivité et de la conductivité thermique se fait au cours de la même expérience (la courbe de réponse en température permet l'évaluation des 2 paramètres – voir chapitre 3 pour la description de la méthode). Malheureusement, les mesures de conductivité ont montré d'importantes incohérences. Contrairement aux mesures de diffusivité thermique, de nombreux problèmes sont apparus. D'une part, la reproductibilité des mesures est très faible pour deux carottes différentes appartenant à une même roche et taillées dans la même direction (fig.5.12), contrairement à ce qui était observé pour la diffusivité thermique (chapitre 4). D'autre part, l'anisotropie est dans certains cas contraire à celle attendue. Enfin, les données obtenues à haute température sont très dispersées (plus de 3%). Pour les mesures de conductivité, le bilan d'énergie suppose la connaissance de l'énergie du pulse  $Q$  et de la température maximale  $T_{max}$  observée au thermocouple. Conformément à la discussion précédente, un déséquilibre thermique important associé à l'émission du pulse fait que la température de l'échantillon (mesurée par le thermocouple) n'est pas nécessairement liée à la quantité de chaleur émise. C'est ce que semblent indiquer les incohérences présentes dans les mesures de conductivité. Pour ces mesures, la nature du matériau (opaque ou non – pyroxène ou olivine, par exemple) en contact avec le fil chauffant, ainsi que la quantité d'énergie libérée (déséquilibre généré) sont deux facteurs importants. A cela s'ajoutent les problèmes d'évaluation de l'énergie  $Q$  dû à d'éventuels problèmes de résistance de contact électriques (l'énergie est calculée par simple mesure de l'intensité et de la tension).

Dans le chapitre 6, traitant du rayonnement thermique, le problème du transfert balistique dans la méthode 1 sera également mis en évidence à haute température.



**Figure 5.12 :** Mesures de conductivités thermiques réalisées simultanément avec les mesures de diffusivité thermique par la méthode 1 (pour la roche BALM4). La reproductibilité des mesures, ainsi que la cohérence vis à vis de l'anisotropie obtenue en mesurant la diffusivité thermique (voir chapitre 4 –JGR) n'est pas reproduite par les mesures de conductivités thermique.

### 5.4.2 Comparaison avec les méthodes antérieures.

Les différences entre les mesures de diffusivité thermique sur monocristaux d'olivine obtenues ici et les données antérieures peuvent être imputées à des problèmes expérimentaux lors des études précédentes. Les données de Kobayashi (1974) sont obtenues avec une méthode Angström modifiée, dont le principal défaut (les problèmes de contact entre le thermocouple et le matériau) a déjà été discuté dans le chapitre 3, §3.4. Les données de Chai et al., (1996) sont obtenues avec une méthode dont la calibration n'est pas bien établie. La seule donnée de calibration publiée concerne un verre de silice et la diffusivité mesurée est 40% plus faible que la valeur standard (Zaug et al., 1992). De plus, le cristal d'olivine analysé dans leur étude est plus riche en fer (Fo89) que ceux mesurés ici; cette différence de composition pourrait expliquer au moins partiellement le plus faibles diffusivités observées par Chai et al. (1996). Parmi l'ensemble des données publiées, les données de Beck et al. (1978) obtenues à l'aide d'une méthode « hot wire » stationnaire sont celles qui s'accordent le mieux aux valeurs obtenues ici sur l'olivine et sur les dunites (tableau 5.8). Il en est de même pour leurs mesures sur le quartz qui montrent un très bon accord avec celles obtenues par les méthodes 2 (Höfer and Schilling, 2002) et 3. Pour cette méthode « hot wire » stationnaire, utilisée à haute pression, les transferts de chaleur peuvent être décrits par la configuration de la figure 5.11b. Dans la mesure où de faibles gradients de température sont imposés, le déséquilibre thermique y est probablement minimisé. Cependant, les données obtenues sur les dunites dépendent fortement des échantillons, et leur microstructure n'est malheureusement pas documentée. Des variations de diffusivité en fonction de la direction échantillonnée lors de la mesure (les dunites de Twin Sisters montrent généralement de fortes OPR d'olivine), ainsi qu'une possible altération des "Carolina dunites" pourrait expliquer cette variabilité.

température	Single crystal 1	Single crystal 2	Twin sister dunite 1	Twin sister dunite 2	Carolina dunite 1	Carolina dunite 2
273K	2,12	3,56	3,24	2,35	1,45	1,38
350-360 K	1,48	2,58	2,17	1,67	10,3	10,2

Tableau 5.8 : Données obtenues par une méthode hot wire à 273K et 350-355K (Beck et al., 1978).

Concernant les méthodes de mesures à haute pression et haute température utilisées pour les roches, les calibrations sont généralement conduites sur des céramiques et montrent généralement un accord entre les différentes méthodes (Benigni and Rogez, 1997) : 10% à 20% de différence semble constituer un maximum. Cependant, aucune méthode ne prend en compte le transfert balistique et l'hypothèse d'un milieu optiquement épais est toujours utilisée. La discussion rejoint donc celle du paragraphe précédent, d'autant plus qu'il a été montré que les valeurs de diffusivité thermique obtenues avec la méthode 1 s'accordaient bien avec la majorité des études sur les péridotites (chapitre 4).

## 5.5 Conclusion

Le transport de chaleur par les vibrations du réseau cristallin (phonons) ne dépend pas de l'échelle considérée (cristal ou roche) ni à température ambiante, ni à haute température. L'anisotropie à l'échelle de la roche, documentée dans le chapitre 4, est confirmée. Une anisotropie de 20 à 25% semble commune pour des roches mantelliques déformées naturellement. Les mesures présentées dans ce chapitre montrent un très bon accord entre les diffusivités thermiques mesurées sur des cristaux d'olivine et des roches mantelliques. Les différences de valeurs absolues entre roches et monocristaux traditionnellement observées dans les travaux précédents sont donc dues à l'utilisation de méthodes de mesures différentes dans les deux cas. En particulier, la plupart des mesures de diffusivité thermique conduites sur des agrégats polycristallins d'olivine utilise des échantillons trop petits et/ou des perturbations thermiques trop importantes. Dans ces conditions, la mesure de la diffusivité thermique est perturbée par le transfert balistique, ce qui peut induire une sous-estimation de la diffusivité thermique.

Les nouvelles estimations proposées pour les matériaux du manteau par les méthodes 2 et 3, dont les résultats sont proches, donnent des valeurs de diffusivité thermique plus élevées d'environ 50 à 70% que les estimations précédentes. La minimisation ou la prise en compte du déséquilibre radiatif dans ces deux méthodes peut expliquer ces fortes différences. Par ailleurs, des calibrations attentives sur agrégats et monocristaux montrent que ces deux méthodes sont valides dans tout type de milieu (transparent ou opaque). Les valeurs proposées peuvent donc être extrapolées aux températures du manteau, en utilisant des modèles théoriques ou semi-empiriques (Hofmeister, 1999; Roufosse and Klemens, 1973; Slack, 1979) ou des dépendances en température issues d'autres mesures. Cependant, si les dépendances en température sont relativement bien étudiées pour la contribution des phonons, il en est autrement du transfert radiatif. En effet, le rôle apparent du déséquilibre radiatif à température ambiante suggère que les différences par rapport aux autres méthodes devraient s'accroître à haute température, lorsque le transfert radiatif contribuera à la conductivité thermique. Le prochain chapitre propose d'étudier ce transfert radiatif dans les monocristaux et agrégats d'olivine à l'aide des méthodes 2 et 3.

6 Contribution du  
rayonnement au transfert  
de chaleur dans les  
monocristaux et agrégats  
d'olivine.



## 6.1 Introduction

Les études précédemment conduites et décrites dans les chapitres 4 et 5 montrent à quel point l'interprétation des mesures de transferts de chaleur est complexe et comment ces types de transferts varient suivant les dispositifs expérimentaux. En particulier, les processus de transferts radiatif pourraient être à l'origine de larges incertitudes sur les valeurs absolues de la diffusivité thermique à température ambiante (chapitre 5) et conduire à des différences fondamentales à hautes températures (observées dans le chapitre 4). La prise en compte des effets du rayonnement dans les mesures directes de conductivité ou de diffusivité thermique est très délicate et explique que pour les matériaux du manteau, aucune mesure de diffusivité thermique ne documente le transfert radiatif. A la lumière du chapitre 4, beaucoup de mesures sont contradictoires et montrent ou non un transfert radiatif, sans pour autant l'étudier précisément. Les conditions d'oxydation ne sont d'ailleurs pas forcément contrôlées. Les données prises en compte pour évaluer le transfert radiatif dans le manteau sont les données de spectroscopie InfraRouge, parmi lesquelles celles de Shankland et al.,(1979) font figures de référence. Elles montrent un fort transport radiatif, comparable aux transferts par les phonons à partir de 1000-1200K. Cependant, ces données sont remises en cause par de nouvelles approches spectroscopiques fondées sur l'analyse des interactions entre les phonons et les photons (Hofmeister, 1999; Hofmeister, 2000; Hofmeister, 2001 ) ou encore par les mesures de la méthode 1. Par ailleurs, ces données obtenues sur monocristaux ne peuvent être extrapolées directement au manteau, puisqu'à l'échelle de la roche, les joints de grains sont supposés limiter le transport radiatif.

L'utilisation des méthodes 2 et 3, dont l'efficacité a été montrée pour les études à température ambiante (chapitre 5) et dont les calibrations sont bien documentées (chapitre 3), va permettre d'étudier les transferts radiatifs dans les monocristaux et les agrégats polycristallins d'olivine. Ceci sera possible car l'une minimise les déséquilibres thermiques (méthode 3) et l'autre prend en compte ces déséquilibres dans l'évaluation de la diffusivité thermique (méthode 2). Cette étude vise à montrer dans quelle mesure l'approximation de diffusion (introduite dans le chapitre 2) est satisfaite, c'est-à-dire, dans le cas où on observe un transfert radiatif, pour quelle taille d'échantillon observe-t-on un transfert radiatif total et non apparent. Pour cela, un modèle numérique en différences finies reprenant les principes physiques du modèle élaboré par Chui et Gardon (1969) a été utilisé (Schilling, 2002). Le champ de température présent dans un matériau soumis à un gradient de température imposé est modélisé. Ce modèle se fonde sur les lois de Planck relatives au corps noir et sur les lois de Kirchoff (voir chapitre 2). Chaque élément absorbe et émet un rayonnement vers l'élément voisin et le flux de chaleur résultant est évalué. La diffusivité apparente est alors calculée, connaissant le gradient de température.

Ce modèle permet de prévoir, pour un échantillon donné caractérisé par sa longueur et son coefficient d'extinction, quelle fraction du transfert de chaleur par rayonnement est effectivement mesurable. L'étude proposée ici, qui fait l'objet d'une publication soumise dans *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, "Quantifying heat transport by radiation in San Carlos olivine single-crystals", consiste à comparer ces modèles numériques à des mesures directes de diffusivités thermiques sur des monocristaux d'olivine en fonction de la longueur des échantillons (méthode 2). La combinaison des deux approches a pour but de mieux quantifier les transports de chaleur par rayonnement. En parallèle, la méthode 3 a été utilisée pour confirmer les résultats obtenus par la méthode 2. Des mesures ont été conduites sur la dunite à grains fins OMAN.

## 6.2 Quantifying heat transfer by radiation in San Carlos olivine single-crystals

*Article soumis à Physics of the Earth and Planetary Interiors*

Benoit Gibert

*Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II-CNRS, Montpellier, France*

Frank R. Schilling

*GeoForschungsZentrum Potsdam – Division 4, Potsdam, Germany*

K.Gratz

*GeoForschungsZentrum Potsdam – Division 4, Potsdam, Germany*

Andréa Tommasi

*Laboratoire de Tectonophysique, Université Montpellier II-CNRS, Montpellier, France*

### Abstract

The thermal diffusivity of San Carlos olivine single crystals is presented at elevated temperatures to investigate and quantify the radiative contribution to the thermal diffusivity. The thermal diffusivity tensor of San Carlos olivine crystals was measured up to 850°C, using samples of different lengths. Thermal diffusivity was determined with a transient apparatus, which allows direct observation of radiative processes in the samples. The method allows to separate non-conductive radiative processes and pure conductive mechanisms, i.e., heat transport by phonons and radiation. The contribution of heat transfer by photons and phonons was separated by their different temperature dependence. Thermal diffusivity  $D$  by phonons and photons were approximated by  $D_{\text{phonon}} = 1/(A + B T)$  and  $D_{\text{photon}} = C T^3$ , respectively. A strong increase in thermal diffusivity by photons is observed with increasing sample length, which were varied from 4.5 to 13.1 mm. In small samples, only an apparent thermal diffusivity is measured. For larger samples, the radiative contribution of diffusivity tends to the intrinsic bulk value of an infinite sample. For these samples, the heat transfer by radiation contributes up to 50% to the total thermal diffusivity at 850°C. Based on numerical models heat transfer by radiation in semi transparent media, the present measurements were extrapolated in order to evaluate the bulk thermal diffusivity coefficient. The bulk value of heat transfer by radiation is required to model large volumes like the mantle. Furthermore, the behaviour of single crystals and a fine-grained dunite were compared to quantify the influence of grain-boundaries on the thermal transport properties of polycrystalline aggregates. All experiments point to a significant radiative transfer in olivine single crystals and polycrystalline aggregates at high temperature. Thus, heat transfer by radiation should strongly enhance the conductive heat transport in the mantle.

### 6.2.1 Introduction

The knowledge of thermal transport properties of mantle materials is a prerequisite to understand the thermal structure and the dynamics of the mantle. Indeed, recent studies have emphasised the possible effects of a temperature and pressure dependent thermal conductivity on mantle convection and subduction processes. Variations of thermal conductivity are shown to have a strong effect on convection patterns and temperature distribution in the whole mantle (Dubuffet et al., 1999; Van Den Berg et al., 2002). In subduction zones, variable thermal conductivity may modify the temperature distribution in the dipping slabs, the stability of the olivine in the transition zone and the occurrence of deep earthquakes (Branlund et al., 2000; Hauk et al., 1999). However, in spite of their strong effects on geodynamics processes, some important aspects of the thermal transport properties of mantle minerals and rocks remain poorly constrained. Under mantle conditions, heat should be transferred by phonons and photon. Heat transfer by phonons (which is also called lattice conductivity or diffusivity) in mantle minerals was extensively studied at ambient and moderated temperature (e.g., Harrell et al., 2002; Katsura, 1997; Osako and Ito, 1991). However, some uncertainties remain, especially concerning absolute values (Gibert et al., 2003b) and temperature dependence (Hofmeister, 1999) of lattice thermal diffusivity. The effect of pressure on phonon thermal conductivity is relatively small (Katsura, 1995; Katsura, 1997). In contrast, the role of the heat transfer by photons in mantle conditions remains controversial and poorly documented, even if this heat transfer mechanism may enhance significantly the thermal conductivity of the mantle materials, due to its large temperature dependence. On one hand, spectroscopic determinations (e.g., Shankland et al., 1979), as well as some direct thermal conductivity measurements (e.g., Kanamori et al., 1968) conducted on olivine crystals exhibit a strong radiative contribution, which is expected to equal the phonon contribution at high temperature. On the other hand, other thermal diffusivity measurements as well as analysis of phonons and photons lifetimes from infrared spectroscopic experiments propose that the radiative transport is much lower than the lattice contribution under mantle conditions (e.g., Gibert et al., 2003a; Hofmeister, 1999; Hofmeister, 2001). This crucial controversy arises from the difficulty to measure the radiative transfer at the laboratory scale and to extrapolate it to mantle scales. In particular, most thermal conductivity or absorption spectroscopic experiments suffer from a systematic violation of the radiative thermal equilibrium, due to small samples sizes, high photon flux or high thermal gradients in the sample. The deviation from the equilibrium may lead to both, an underestimation and overestimation of heat transfer by radiation. Thus, extrapolation of these data to the mantle may be speculative, since radiative equilibrium should be always achieved under mantle conditions. In addition, most of these experiments are performed on single crystals and the role of grain boundaries scattering at the rock scale is not considered.

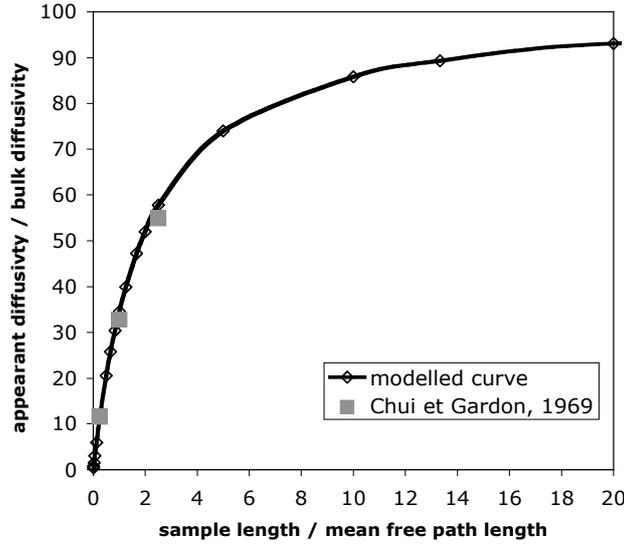
Using an especially designed transient apparatus, which allows direct observation of radiative transport, we quantify the thermal diffusivity of San Carlos olivine single crystals and polycrystalline aggregates from room to 850°C. The contribution of the radiative and lattice contribution to heat transfer is studied in detail. Eleven San Carlos olivine single crystals and a fine grained natural dunite are investigated. The thermal diffusivity tensor is measured to high temperature conditions and the influence of single crystals properties and grain boundaries effects on the rock properties is examined.

## 6.2.2 Heat transfer in semi-transparent materials

Heat transfer properties in samples are mainly determined by steady state or transient experiments, which measure heat flow over a known temperature gradient or the thermal equilibration of a sample, respectively. Measuring radiative heat transfer in materials with such conventional methods requires that radiative equilibrium must be reached during the experiment. In this case only a relationship between the heat flux and thermal gradient exists (Fourier's law) and heat transfer by radiation is combined in the experiment with phononic heat transport to provide a bulk heat transport coefficient (thermal conductivity or diffusivity). In principle, radiative equilibrium means that every infinitesimal part of the sample displays equilibrium between absorption and emission processes (Kirchoff's laws) and as a consequence, that the temperature of the medium is only defined by the material properties (e.g., Brewster, 1992). These properties are defined by the mean free path length of heat carrying particles, i.e., in the case of radiative heat transfer, photons. Thus, radiative equilibrium in a sample is expected if the absorption and emission are equal for each volume within the sample. Furthermore, in the mantle, assuming a thermal gradient of  $10^{-5}$  °C/mm (10°C/km) and a photon mean free path of 1-5 mm (e.g., Shankland et al., 1979) temperature is constant within the mean free path length of a photon. In laboratory experiments, thermal gradient are commonly 0.5-1.0°C/mm and the temperature gradient results in a strong temperature variation within the mean free path length of a photon. In addition to that, the mean free path length may be in the same order than the sample dimension. This may lead to two effects: first, the sample is not heated by the photonic heat flux because the probability of absorption and emission processes is too low. Second, the sensor (for instance, a thermocouple), may absorb directly the heat and may record an artificial elevation of the temperature (Höfer et Schilling, 2002). Depending on the experimental set-up, these two effects may lead to an underestimation or overestimation of thermal diffusivity, respectively.

If radiative disequilibrium is minimised in laboratory experiments, quantification of radiative conductivity is related to the diffusion approximation (e.g., Brewster, 1992). This approximation means that the intrinsic heat transport properties, e.g. heat transfer contribution by photons, are completely measured if the heat path length, i.e., the size of the samples, is significantly larger than the photon mean free path length. However, for a given photon mean free path length the required size of the heat path length – sample length – may further vary due to the boundary conditions such as black or reflecting surfaces. Using a numerical model, a relationship between the contribution of photons to the thermal diffusivity or apparent radiative thermal diffusivity and the ratio of the sample length to the photon mean free path length can be calculated (Schilling et al., in preparation). The calculations are based on finite-difference models of heat transfer in semi-transparent media (e.g., Chui et Gardon, 1969).

The simulation (fig. 1) shows that for a ratio sample length/mean free path length of about 10-20, the apparent heat transfer by radiation is approximately equal to the intrinsic property of the sample, depending on the boundary conditions (reflective or refractive surfaces: refractive in the mantle, but reflective or refractive in laboratory experiments). The simulations are in good agreement with the numerical models performed on glasses by (Chui et Gardon, 1969). Therefore, measuring thermal diffusivity of a material by an adequate method as a function of sample length can provide the basis for a quantification of heat transport by radiation.



**Figure 1:** Dependence of the apparent thermal diffusivity versus sample length deduced by numerical simulations in the case of refractive surfaces (see text for detail). The two parameters are scaled using the intrinsic properties of the material, i.e., the photon mean free path  $l_0$  and the total radiative diffusivity  $D_0$ , expected for an infinite sample.

In a sample of infinite size, where the approximation of thermal equilibrium is verified, the relationship between the heat flux and the thermal gradient leads to the equilibrium thermal diffusivity by photons  $D_{\text{photon}}$ :

$$D_{\text{photon}}(T) = \frac{16\sigma n^2 T^3}{3\rho C_p} l_{\text{photon}}(T) \quad (1)$$

where  $n \approx 1,67$  is the refractive index in San Carlos olivine,  $\sigma$  is the Stephan-Boltzman constant,  $\rho$  is the density,  $C_p$  is the heat capacity and  $l_{\text{photon}}$  is the photon mean free path length. The radiative portion to thermal diffusivity is added to the lattice diffusivity  $D_{\text{phonons}}$  through phonons to result in the bulk thermal diffusivity  $D$ , where:

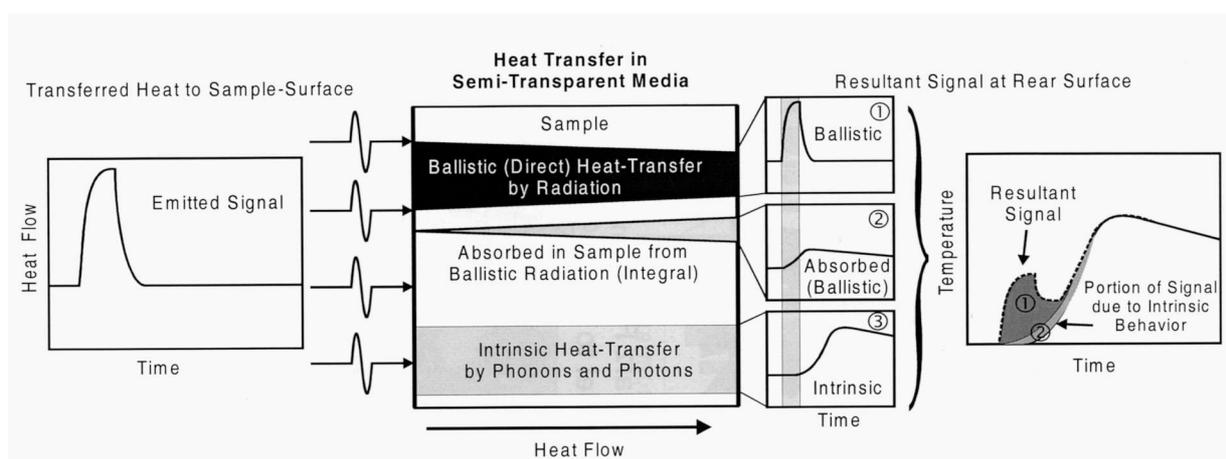
$$D(T) = D_{\text{phonon}}(T) + D_{\text{photon}}(T) \quad (2)$$

If the sample is too small to fulfil the diffusion approximation, only an apparent thermal diffusivity is measured, and the thermal diffusivity is only a fraction of the intrinsic one defined above. As in our experiments the sample length of the olivine crystals is several orders larger than the mean free path length of phonons but in the same order of magnitude than the mean free path length of photons, the measured apparent diffusivity includes the total thermal diffusivity by phonons and a portion of that by photons.

### 6.2.3 Method of measurement

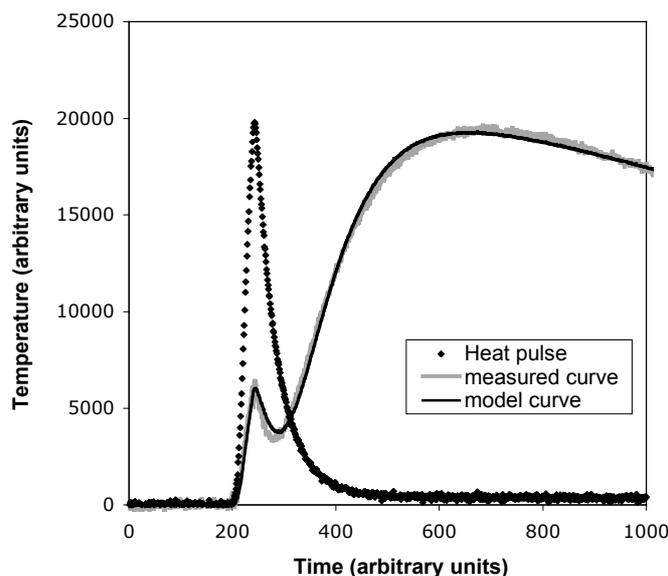
The proposed method of thermal diffusivity measurement is a transient method, which especially allows thermal diffusivity measurements of both single-crystals and relatively large rock samples ( $>1 \text{ cm}^3$ ) in different directions (Schilling, 1999; Höfer et Schilling, 2002). The

method does not require any specific sample shape, only two parallel well-polished plane faces. A heat signal is generated by a filament close to the front surface of the sample and is recorded by a thermocouple (1) located between the sample and the filament, without contact to the filament or the sample. This heat signal starts a temperature equilibration process in the sample, which is observed with a thermocouple (2) at the rear surface of the sample. Since heat is transferred from the filament to the upper surface of the sample by radiation, the elevation of the temperature at the rear thermocouple is not only achieved by conductive but also by radiative processes. In particular, three different heat transfer mechanisms contribute to this equilibration and are recorded by the fast thermocouple (2). In semi-transparent materials, a portion of heat is not absorbed by the sample surface and is directly transferred through the sample to the opaque thermocouple (ballistic heat transfer); this leads to a simultaneous temperature elevation recorded by the thermocouple 2 (part 1 in the figure 2). A part of this radiation is absorbed in the sample and contributes to an additive small temperature elevation of the thermocouple (part 2 in the figure 2). Then the temperature of the sample is equilibrated by intrinsic conductive processes, i.e. phononic and radiative transport (part 3 of the figure 2). Thus, the method allows simultaneously the observation of the radiative disequilibrium in the sample (part 1 and 2) and of the conductive processes (part 3).



**Figure 2:** Different heat transport mechanisms associated with the emission of a heat pulse through a semi-transparent material.

The temperature-time curve measured by the thermocouple (1) is used to calculate a synthetic curve at the rear surface with a one-dimensional finite difference scheme. Values of thermal diffusivity are varied systematically in order to obtain the best approximation for measured and calculate curves. The calculations allow consideration of heat losses by radiation from the sample surfaces (Schilling, 1999). The ballistic radiative heat transfer is modelled as an additional temperature signal on thermocouple 2, which is proportionnal to the emitted heat measured by thermocouple 1. The proportion is varied systematically in order to obtain the best agreement between the modelled and the observed curve in the part 1. The absorbed ballistic radiation is approximated by adding a portion of the ballistic signal temperature signal on the finite element next to the thermocouple (2). An example of measured and modelled curves is given in the figure 3.



**Figure 3:** Temperature-time curves measured and modelled for an olivine single crystal (sample #12) at ambient temperature.

In order to better estimate the conductive processes, the ballistic heat transport is lowered by increasing the opacity of the upper surface of the sample with a layer of silver paint. In addition, the heat power is minimized so that the temperature increase at the rear surface is less than 0.5K, which corresponds to a maximum temperature difference across the sample of less than 5K. The experimental set-up is enclosed in a low-noise, low-thermal gradient furnace (Schilling, 1999).

The internal precision of the apparatus depends mainly on the sample size. Indeed, in too small samples, the ballistic heat transfer may overlap the intrinsic one and the evaluation procedure is not able to separate the two processes. Measurements where the two processes are not well separated were not used in this study. In cases where the two processes can be separated, an internal precision of 1 to 5% is achieved depending on sample length and thermal diffusivity (Schilling, 1999). Extensive calibration on quartz indicates that the external precision of the apparatus is better than 5% (Höfer et Schilling, 2002).

### 6.2.4 Samples

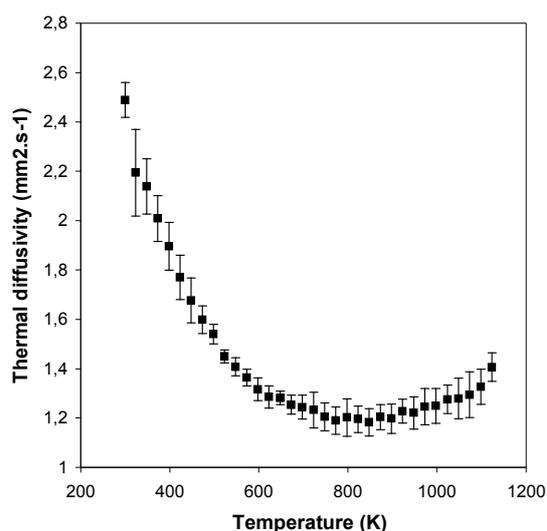
Six San Carlos olivine single crystals (Fo91) were oriented by the Laue backscattering technique at the Institut für Kristallzüchtung, Berlin. Five other single crystals were shaped in order to obtain the maximum measuring length. They are green-coloured and free of cracks. The crystals were cut in order to obtain a platelet geometry with two faces polished plan-parallel. In the oriented crystals, these faces are either normal to the [100], to the [010], or to the [001] crystallographic axes. The length of the samples varies from 4.5 to 13.1 mm, and the cross section has a rectangular shape of more than 1 cm<sup>2</sup>. This geometry is chosen to minimize heat losses at the lateral sides of the sample and, as a consequence, to optimise the signal at the rear thermocouple.

The dunite, sampled in the Oman ophiolite, has a low-temperature bimodal porphyroclastic texture characterized by olivine and more rare pyroxenes porphyroclasts (<0.5mm) enclosed

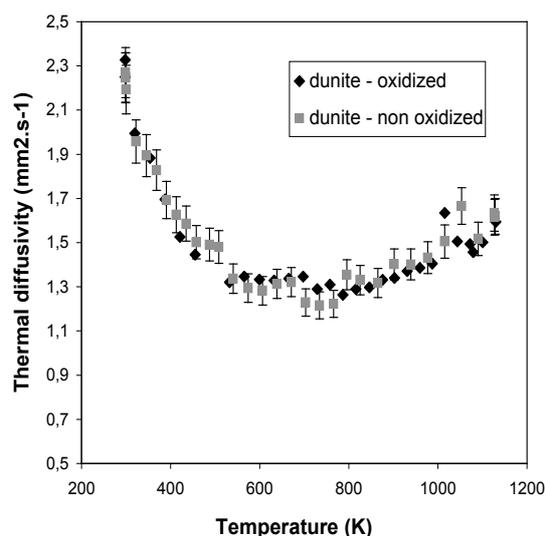
in a fine-grained olivine matrix (0.02 mm). Its density of  $3.36 \text{ gcm}^{-3}$  suggests a very low porosity. The forsterite content of olivine is 91%. The crystal preferred orientation of olivine measured by the EBSD technique display a weak cristallographic fabric. Thus, this sample should be isotropic regarding to its heat transport properties (Gibert et al., 2003b).

## 6.2.5 Results

The thermal diffusivity of the olivine single crystals and of the dunite has been measured from 25 to  $850^\circ\text{C}$  at  $25^\circ\text{C}$  temperature steps. For each single crystal, two or three runs were performed over the whole temperature range. For the larger sample, only one run was performed. For the samples #4 and #7 and the dunite, the experiments were performed under both oxidizing conditions (in air) and reducing conditions (1%  $\text{H}_2$  in argon). Figure 4 displays the average of the measured thermal diffusivity on five successive runs (performed on the samples #4 and #7), and the standard deviations ( $2\sigma$ ). Standard deviations are lower than 5% over the whole temperature range, which is in agreement with the predicted accuracy of the method. At high temperature, the thermal diffusivity of the smallest crystals (<6mm) suffers from larger uncertainties due to the interaction of ballistic and intrinsic heat transfer.

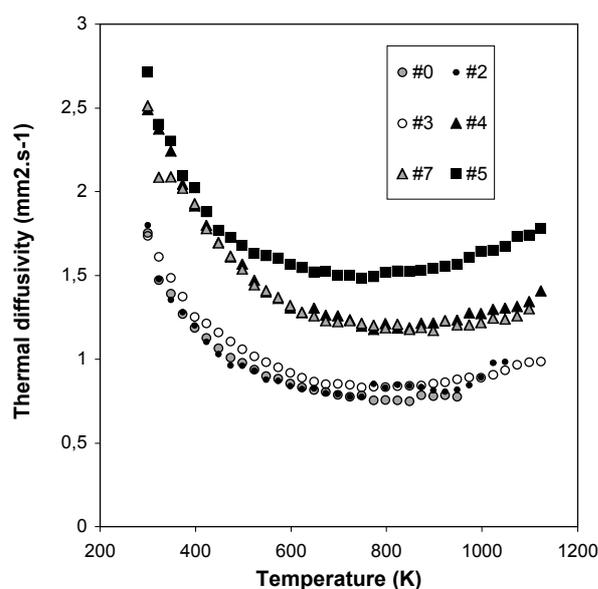


**Figure 4:** Average of 5 thermal diffusivity measurements in  $[001]$  direction, using samples #4 (3 measurements) and #7 (2 measurements), with comparable length. The error bars represent  $2\sigma$  standard deviations.

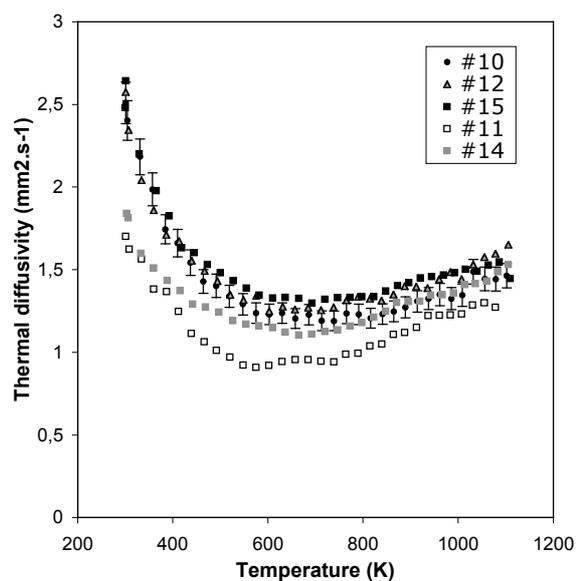


**Figure 5:** Thermal diffusivity of dunite measured under oxidizing and non-oxidizing conditions.

Measurements in the three crystallographic axes of the olivine crystal display a high anisotropy: [100] is the most conductive axis and [010] is the least one. The anisotropy is preserved at high temperature (figure 6). The temperature dependence of the thermal diffusivity is characterized by a fast decrease up to 300°C, and the minimum thermal diffusivity is observed between 400-500°C. This observed temperature dependence at low temperature does not depend on the sample, in a given direction, showing that the geometry (diameters, length of the sample) has no effect on the measurements. The thermal diffusivity increases with increasing temperature (>500°C). This increase varies from sample to sample, and larger samples (figure 7) display a higher increase of thermal diffusivity than small ones (figure 6). The thermal diffusivity of the dunite is in the same range than the thermal diffusivity of the single crystals. In addition, increase of the thermal diffusivity is observed at high temperature, similarly to one observed in single crystals. The measured thermal diffusivity in dunites also seems to be independent of the oxidation state of the samples (figure 5). In the air, a layer of few microns of oxidation was observed on the surface of the single crystals, and the dunite became brown colored. In reducing conditions, the samples remained green-colored.



**Figure 6:** Thermal diffusivity of oriented San-Carlos single crystals.



**Figure 7:** Thermal diffusivity of large and non-oriented single crystals.

## 6.2.6 Discussion

### 6.2.6.1 Radiative heat transport in olivine.

The observation of an increasing thermal diffusivity at high temperature is directly linked to radiative processes contributing to the heat transport (equation (1)). Moreover, the systematic variation of the radiative contribution with sample length implies that only an apparent thermal diffusivity is measured. As explained above, the evaluation of the radiative transport as a function of sample length provides an estimation of the intrinsic heat transfer by photons in olivine. Quantifying the contribution of radiative transport through thermal diffusivity measurements requires the knowledge of the phononic contribution (equation (2)). Separation of the two heat transfer mechanisms is possible due the different temperature dependence of phononic and photonic processes: phononic transport is dominant at low temperature (<600K for olivine (Shankland et al., 1979)), and radiative heat transport becomes efficient only at higher temperature. Thus equation (2) can be used to evaluate the photonic and phononic contributions from the data. However, both terms of this equation are still discussed. In particular, theoretical models for the lattice diffusivity suffer from large uncertainties. Most theoretical and experimental studies on the temperature dependence of thermal diffusivity of rocks at moderated temperature suggest that lattice diffusivity  $D_{phonon}$  is well-described as inversely proportional to the absolute temperature (Klemens, 1958; Fujisawa et al., 1968; Seipold, 1998; Staudacher, 1973). In consequence, lattice diffusivity can be expressed as:

$$D_{phonon}(T) = \frac{1}{A+BT} \quad (3)$$

in which the parameter  $B$  quantifies phonon-phonon interactions and the parameter  $A$  approximates the interactions of phonons with crystal imperfections, such as point defects, grain boundaries or microcracks [Seipold, 1998]. At high temperature, activation of optic phonons (Hofmeister, 1999), as well as the presence of a lower limit of thermal diffusivity (e.g., Slack, 1979) are thought to lower the  $1/T$  temperature dependence at high temperature. However, the equation (3) seems to be a decent approximation in the moderated temperature range ( $T < 850^\circ\text{C}$ ).

Concerning the radiative contribution given by the equation (1), the photon mean free path length is expected to be temperature dependent, since it is shown that the absorption coefficient varies as a function of the temperature and as a function of the wavelength (e.g., Fukao et al., 1968; Shankland et al., 1979). Since its temperature dependence is not well-constrained, the photon mean free path will be considered as constant. In addition,  $C$  will be considered as independent on the crystal orientation. Thus, the radiative diffusivity is given by:

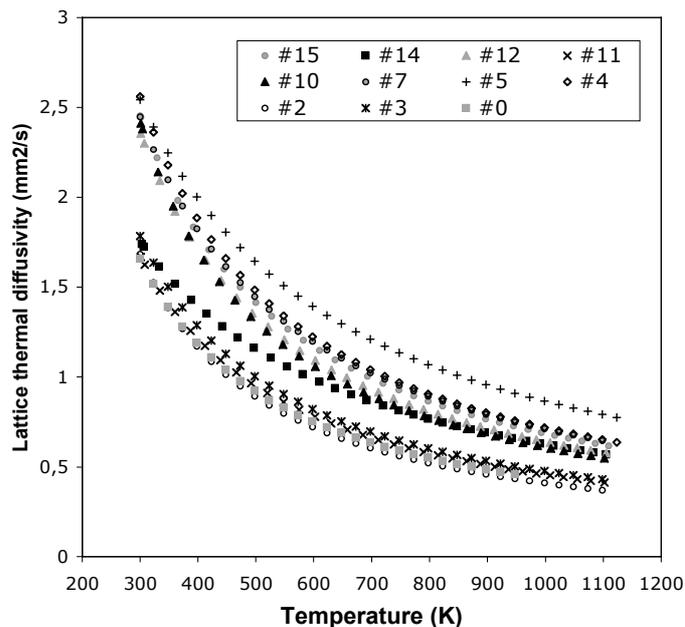
$$D_{photon}(T) = \frac{16 \sigma n^2 T^3}{3 \cdot \rho \cdot C_p} \cdot l_{photon} = C(T) \cdot T^3 = C \cdot T^3 \quad (4)$$

Determination of the constant  $C$  will provide an average of the photon mean free path length over the studied temperature range (up to  $850^\circ\text{C}$ ) while higher temperature values of absorption dominate the  $C$  value. In addition, it is assumed that the heat capacity is constant over the temperature range where radiative transport is efficient.

Sample	Sample length (mm)	A (mm <sup>2</sup> .s)	B (mm <sup>2</sup> .s.K <sup>-1</sup> )	C (*10 <sup>-10</sup> mm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> .K <sup>-3</sup> )
#0 [010]	4,5	-0,1263	0,00243	4,1
#2 [010]	5,0	-0,2000	0,00265	5,2
#3 [010]	6,0	-0,0982	0,00225	4,2
#4 [001]	6,6	-0,0394	0,0143	5,9
#5 [100]	9,1	0,0664	0,001049	7,7
#7 [001]	6,1	0,0196	0,00143	4,7
#10	10,2	-0,1143	0,00176	7,8
#11	10,0	-0,0852	0,00228	7,9
#12	13,1	-0,064833	0,00163	8,5
#14	11,8	0,1301	0,00147	7,7
#15	10,8	-0,0419	0,00150	8,1
Oman2 (non-oxidized)	10,0	0,05574	0,00135	7,3
Oman3 (oxidized)	10,0	0,0698	0,00131	7,1

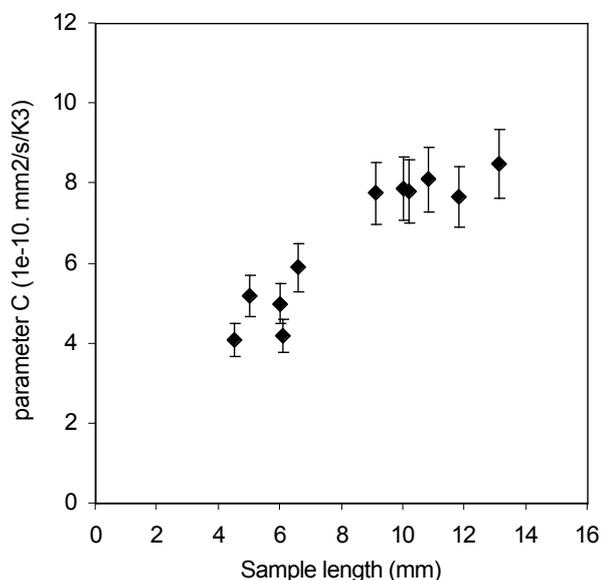
**Table 1:** Fitting parameters of thermal diffusivity determined on the 11 single crystals and two dunites using Eq. 3 and 4.

For each sample, the thermal diffusivity is fitted by equation (2) using equation (4) for the radiative contribution and the equations (3) for the lattice contribution. Table 1 displays the *A*, *B* and *C* parameters for each sample. The resulting lattice thermal diffusivity is plotted on the figure 8. The uncertainties related to equation 3 for the lattice diffusivity, the heat capacity and to the averaging of the photon mean free path are systematic and are expected to be the same for all samples. Thus, comparison between the values obtained for the different samples does not suffer from these errors. For each sample, the parameters *A*, *B* and *C* are expected to be determined within an accuracy of about 10%. Although the measurements are thought to be accurate within 5% over the whole temperature range (Schilling, 1999), additional uncertainty comes from the fitting procedure. In particular, the thermal diffusivity by lattice vibrations (coefficient *A* and *B*), which has a strong temperature dependence, is mainly constrained at lower temperature (<300°C). Comparison between the lattice thermal diffusivities obtained on different samples oriented in the same crystallographic directions show a scatter of about 5% (figure 8). This is in accordance to the repetitive measurements shown in Figure 8 and the internal precision of the apparatus (Schilling, 1999). Sample #14 shows lower temperature dependence at low temperature compared to all other samples (figure 7 & 8). However, the sample reveals a comparable radiative contribution as shown in the *C* value presented in Table 1, compared to samples of similar length. This is an additional hint that the apparatus and fitting procedure are capable to quantitatively determine the radiative contribution of thermal diffusivity.



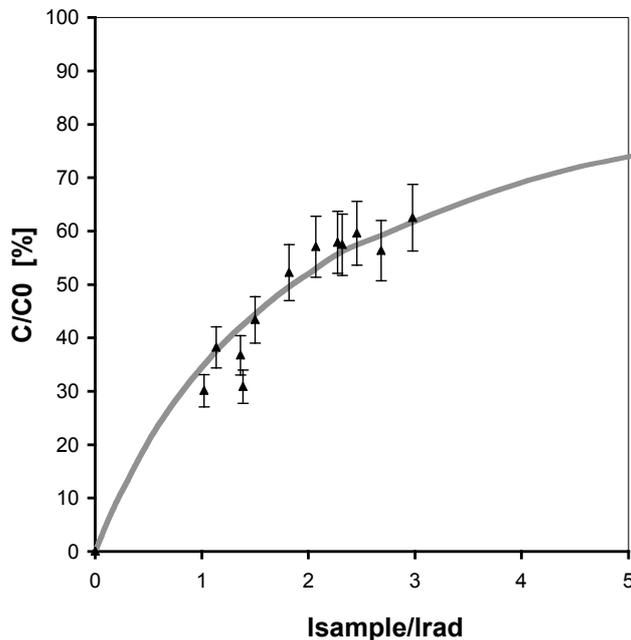
**Figure 8:** Thermal diffusivity by phonons of 11 San Carlos single crystal samples deduced from measured thermal diffusivity and fitting procedure.

In figure 9 a systematic increase of the measured radiative contribution with increasing sample length is shown. This increase indicates that only an apparent thermal diffusivity is measured. The smallest radiative contribution is measured in the shortest samples and is in agreement with the diffusion approximation discussed above. This shows that the applied method of measurement is capable to separate the non-equilibrium ballistic and intrinsic conductive effect, whereas the intrinsic effect is the sum of lattice and radiative contribution. This further strengthens the conclusion that the increase of thermal diffusivity with increasing sample length is mainly due to the intrinsic radiative heat transfer in olivine. This is in good agreement with the absence of radiative transfer measured on highly transparent quartz (where photon mean free path  $\gg$  sample length) (Höfer et Schilling, 2002). This clearly proof that there is a significant radiative heat transport in olivine single crystals.



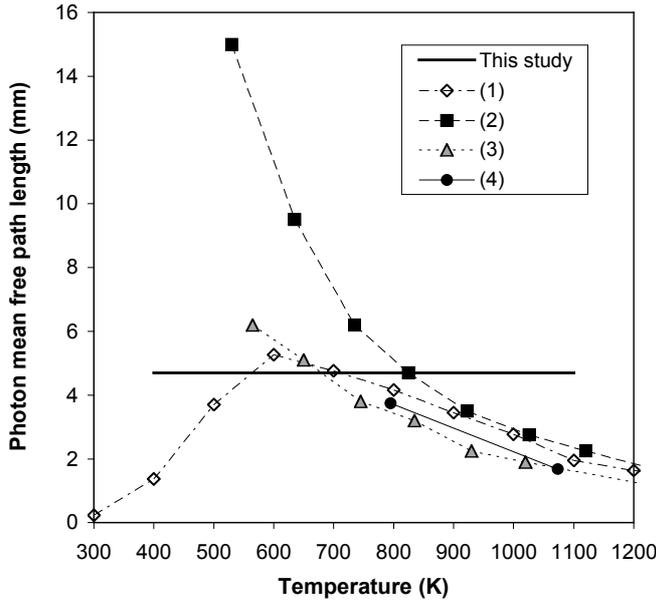
**Figure 9 :** Parameter C (Eq. 4) as a function of sample length.

In order to deduce the total radiative contribution of heat transfer  $D_0$  which is associated with the fit parameter  $C_0$  and the photon mean free path  $l_0$  representing the behaviour of an infinite sample, the experimental determined  $C$  values are compared to the modelled curves of apparent thermal diffusivity as a function of sample length (Fig. 10) assuming refractive surfaces. Two parameters  $C_0$  and  $l_0$ , taken as independent, are systematically varied in order to obtain the best agreement between the data points ( $l_{sample}/l_0, C/C_0$ ) and the modelled curves using a least square algorithm. The best fit shows an average deviation from the modelled curve of about 2% (Fig. 10). The approximation results in a photon mean free path  $l_0$  of 4.7 mm and  $C_0=14.6 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-3}$ . For the larger sample, 60% of the intrinsic diffusivity by radiation is measured.



**Figure 10** : Best fit of the measured data (parameter  $C$  from Eq. 4 as a function of sample length) by the modelled curve. Sample length and  $C$  parameters are normalized by the best fitted parameters  $l_0=4,7\text{mm}$  and  $C_0=14.6 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^4$ , where  $l_0$  is the photon mean free path length and  $C_0$  is the parameter  $C$  obtained for a hypothetical infinite sample. Error bars are of 10%

This data suggest that the averaged mean free path between 300 and 1100K would be around 4.7 mm. The estimated photon mean free path is of the same order of magnitude than the photon mean free path determined by different methods (Figure 11). In particular, it is in relatively good agreement with the I.R spectroscopic determinations by Aronson et al. (1970), Fukao et al. (1968), and Shankland et al. (1979) and in very good agreement with the measurements performed by Schatz et Simmons (1972) using a modified Ångström method (Figure 11).



**Figure 11:** Comparison between the photon mean free path estimated from the present measurements and previous determinations. (1) (Fukao et al., 1968); (2) (Schatz and Simmons, 1972) Fo86; (3) (Schatz and Simmons, 1972) Fo92 and (4) (Shankland et al., 1979).

This average gives an average of the photon mean free path on the temperature range where radiative diffusivity is expected to be effective (600-1100 K). The model may underestimate the photon mean free path at low temperature and probably overestimates the mean free path at high temperatures (>800K). Indeed the fitting curves are found to be systematically lower than the data points at low temperature <800K and higher than the experimental values for temperature >800K. This is in accordance with a temperature dependence of absorption behaviour. Averaging the photon mean free path is thus a limitation of the present experiments, as temperature dependence of photon mean free path is not derived by this experiment.

A further estimation of the temperature dependence of mean free path length of photons may be the difference between  $l_0$  and the mean free path length derived by and  $C_0$ . Using the equation (4), a photon mean free path of 4.7 mm would lead to a  $C_0$  coefficient of about  $11 \cdot 10^{-10}$  (equation 4) which is lower by 20% than the determined value  $C_0$ . This disagreement is also influenced by the temperature dependence of lattice diffusivity, which is probably overestimated by Eq. 3. Equation 3 implies a lattice thermal diffusivity reaching 0 at very high temperature. However, a lower bound is theoretically expected (e.g., Slack, 1979) and has been recently suggested by direct measurements of lattice diffusivity on olivine single crystals at temperature lower than 1000°C (Harrell et al., 2002). Indeed, this lower limit is related to the lower limit of the phonon mean free path, which cannot be lower than the inter-atomic distances, as derived by the Einstein approximation for thermal conductivity. Using equation (5) (e.g., Klemens, 1958) for the lattice diffusivity:

$$D_{\text{phonon}} = \frac{1}{3} \cdot v \cdot l_{\text{phonon}} \quad (5)$$

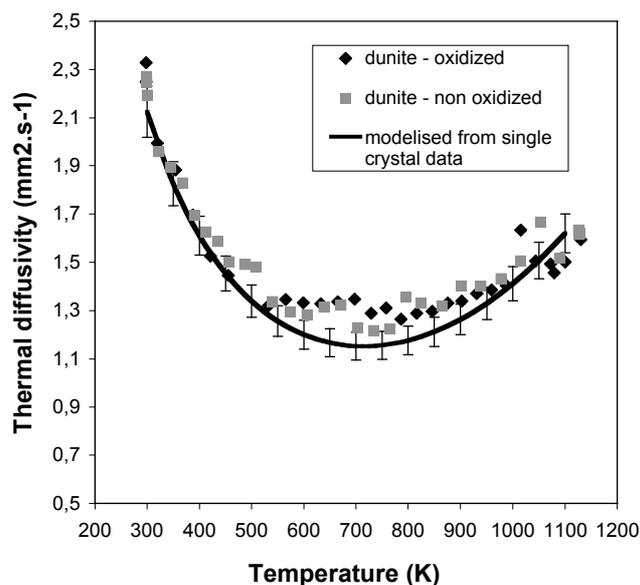
where  $v$  is the phonon velocity (taken as the average over the 3 polarizations of the acoustic velocities) and  $l_{\text{phonon}}$  the phonon mean free path, the lower limit of the thermal diffusivity can be approximated. Assuming the extreme case where the lower limit of the phonon mean free path is 2 Å (which is approximately the Mg-O bond length), and that the average phonon velocity is 6 km s<sup>-1</sup>, the lower limit of the thermal diffusivity is 0.4 mm<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>. The calculated lattice diffusivity in the [010] direction reaches this same value at 800°C. Thus, the lattice

diffusivity calculated in this study is in agreement with a lower limit reached at moderate temperature (<1000°C). Nevertheless, in the studied temperature range, this calculated lattice diffusivity may represent a lower bound of the lattice diffusivity, and therefore might overestimate radiative diffusivity. The radiative component of thermal diffusivity using  $C = \text{constant}$  in Eq. 4 is therefore an upper bound of the radiative contribution to thermal diffusivity.

A more precise determination of lattice contribution to thermal diffusivity at high temperature would allow a more precise determination of radiative contribution.

### 6.2.6.2 Heat transport by radiation in dunite

Measurements on a fine-grained, isotropic dunite sample, whose length was kept constant and equal to 10 mm, show a strong radiative contribution at high temperature. The same fitting procedure was used for analysing the thermal diffusivity measurements in this dunite (equation 2 and 3-4). The  $C$  coefficient obtained is about 10% lower than the  $C$  coefficient expected for an olivine single crystal of 10 mm length, which can be related to reflections at grain-boundaries. The small reduction of heat transport by radiation shows that the scattering of radiation at grain boundaries has a small effect on thermal diffusivity, even in a fine grained sample with a high amount of internal grain-boundaries. In the studied temperature range (<850°C) measurements under oxidizing conditions (air) or reducing conditions give similar results, showing that development of oxide films at olivine grain boundaries have a negligible effect on the radiative heat transfer in our experiments. The measured thermal diffusivity of the dunite is compared with an “isotropic” thermal diffusivity deduced by averaging the thermal diffusivities measured along the three principal axes of the olivine single crystals (10 mm length). This comparison (figure 12) shows that heat transport processes are similar in single crystals and rocks at both low and high temperature conditions (lattice and radiative diffusivities, respectively). This is in agreement with the conclusion that lattice diffusivity is not hindered by grain boundaries and rock imperfections, in the temperature range where phonon-phonon interactions dominate (Gibert et al., 2003b), and that the grain size is several orders of magnitude greater than the mean free path length of phonons. Moreover, the present results show that thermal cracking during the experiments has a very low effect on measured thermal transport properties. Thermally-induced cracks seem to remain closed at high temperature, if temperature is not decreased during the experiment. For a more detailed discussion of the influence of thermal induced cracking on thermal diffusivity see Gibert et al. (2003a).



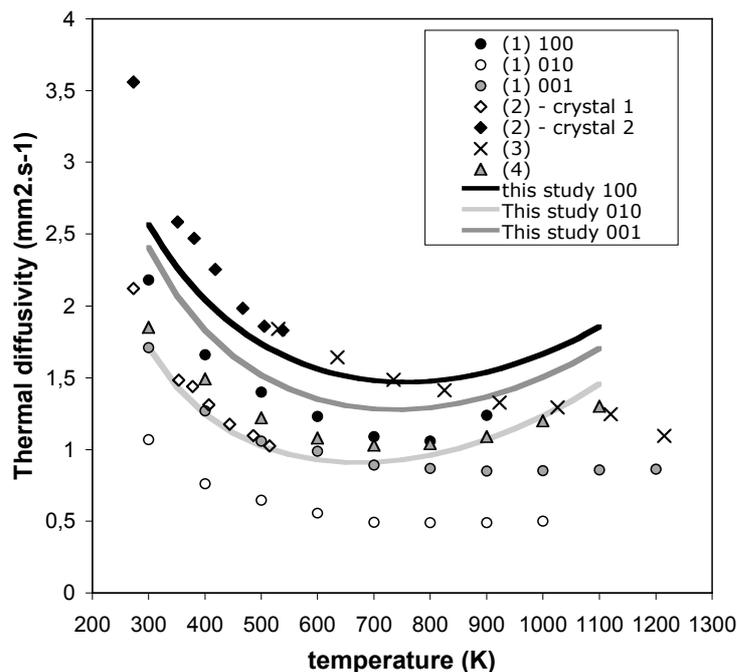
**Figure 12:** Comparison between the measured thermal diffusivity of the Oman dunite and the modelled thermal diffusivity of an “isotropic” polycrystalline sample using single crystal data (averaged lattice diffusivity from fitting parameters in the three principal directions and constant  $C=8.10^{-10} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-4}$  assumed for a 10 mm length single crystal). Errors bars on the modelled curve represent 5%.

The weak effect of grain boundary scattering on the heat transfer by radiation observed in the present experiments is in disagreement with the previous data on a sintered forsterite and on a Twin Sisters dunite sample (Schatz and Simmons, 1972) that show a strong reduction of the photon mean free path compared to their single crystal data. The sintered forsterite and the dunite sample show a photon mean free path lower by about 50% and 80% than the one measure in olvine single crystals, respectively. As our study shows no significative reduction in radiative thermal diffusivity, the observed reduction by Schatz and Simmons (1972) may be explained by a high porosity in the sintered forsterite aggregate, which would strongly enhance grain boundaries scattering (Klemens and Greenberg, 1973) and reduce the heat flow grains. There is evidence that the Twin Sisters dunite evaluated by Schatz and Simmons (1972) is serpentinised, which is probably associated with an enhanced porosity.

## 6.2.7 Thermal diffusivity of olivine

### *Single crystals*

The present measurements provide new estimates of the thermal transport properties of mantle materials. At low temperature, where phononic heat transport dominates thermal transport properties of olivine, absolute values of thermal diffusivity of single crystals are about 30% higher than the ones previously published (Chai et al., 1996; Kobayashi, 1974) (Figure 13). These differences may be due to the use of different methods of thermal diffusivity measurements and are discussed in (Gibert et al., 2003b). At moderate temperatures (<650K), the present values are in good agreement with those obtained by a carefully calibrated stationary hot wire method (Beck et al., 1978). At higher temperatures, the difference with other methods is preserved or increased due to radiative effects. Presence of radiative transport was already suggested in the measurements made with the modified Angström method (Kanamori et al., 1968; Kobayashi, 1974). However, this method used small samples (<4-5mm) and high amplitude thermal oscillations (>5K), and radiative equilibrium and diffusion approximation were probably not respected.

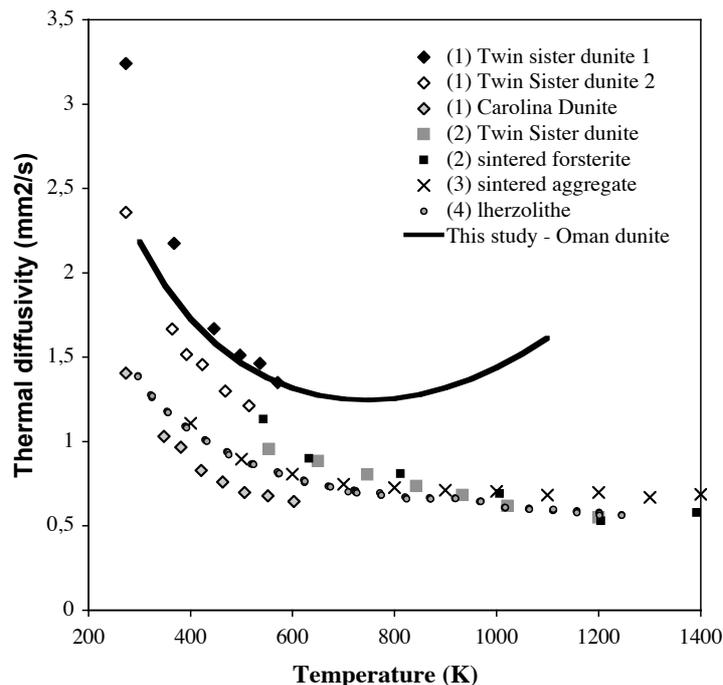


**Figure 13:** Comparison between thermal diffusivities obtained in the present study (temperature-dependent thermal diffusivity tensor from the fitting parameters  $A$ ,  $B$ , and  $C$  assuming a sample length of 10 mm) and previous determinations on olivine crystals: (1) (Kobayashi, 1974) ; (2) (Beck et al., 1978) non-oriented single crystals; (3) (Schatz and Simmons, 1972), Fo92 - [010] axis; (4) (Kanamori et al., 1968) - [001] axis.

### Rocks

Thermal diffusivities of single crystal olivine and low porosity dunite are in good agreement over the whole temperature range investigated in this study (figure 12). Most previous thermal diffusivity data on mantle rocks show thermal diffusivity values at ambient conditions about 30% lower than expected by single crystal data. Detail analysis of these data (Gibert et al. 2003b) suggests that the difference is mainly caused by different method bias in single crystal and rock studies, and by the poor quality of the rock samples (porosity and alteration). A good agreement with the present data is found with the Twin Sisters dunite measured by hot wire method by Beck et al. (1978).

At high temperatures, the difference between the present data and previous studies increases since previous data display only a weak radiative contribution at the aggregate scale (Gibert et al., 2003a; Katsura, 1995; Schatz and Simmons, 1972). This is probably due to the small size of the samples, especially in high pressure/high temperature experiments (e.g., Fujisawa et al., 1968; Katsura, 1995; Katsura, 1997), where the diffusion approximation is not fulfilled. In addition, radiative disequilibrium associated with a high-energy heat pulse is expected in transient methods (Gibert et al., 2003a; Holt, 1975; Seipold, 1988). This may lead to an underestimation of the radiative processes. Furthermore, both alteration and porosity will also lower the heat transfer by radiation.



**Figure 14:** Comparison between the thermal diffusivity measured on the Oman dunite and previous measurements on rocks or sintered polycrystalline aggregates. (1) (Beck et al., 1978); (2) (Schatz and Simmons, 1972); (3) (Katsura, 1995); (4) (Gibert et al., 2003b).

### 6.2.8 Concluding remarks

The present direct measurements of thermal diffusivity provide new evidence for a significant contribution of heat transport by radiation in olivine. The combination of numerical models, which illustrate the influence of sample length on the measurable diffusivity, as well as measurements of thermal transport properties as a function of sample length provides a new method to quantify radiative contribution of heat transport. The presented evaluation of the photon mean free path is in agreement with spectroscopic determinations. However, the determination of the radiative contribution from measurements of total thermal diffusivity is limited by uncertainties on the lattice diffusivity of olivine at high temperature. Thus, only an averaged phonon mean free path is determined over a large temperature range, and the radiative contribution deduced by Eq.4 is probably overestimated, since our model for lattice diffusivity is assumed to be the lower limit of true lattice diffusivity. Finally, our data obtained at moderated temperature suggest that experiments at higher temperatures (close to conditions), and under conditions where diffusion approximation is valid are clearly required in order to get better estimates of the thermal diffusivity of the upper mantle.

The present measurements give thermal diffusivity values for both olivine single crystal and polycrystalline aggregates higher by more than 50% than previous determinations. The difference with the previous studies at ambient conditions (Gibert et al., 2003b) is enhanced by the strong radiative heat transport observed at high temperature. Thus, the standard value of  $1.0 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  for the thermal diffusivity of the mantle probably underestimates the actual thermal diffusivity of the mantle. A higher thermal diffusivity may modify the thermal structure of the oceanic or continental lithospheric mantle and its rheology. It may hinder the development of small-scale convection or enhance the heating of subducting slabs. In

addition, a higher thermal diffusivity may influence convection patterns in the whole upper mantle (Dubuffet et al., 1999; Van Den Berg et al., 2002).

### Acknowledgements

We thank Dr Alex from the IKZ Institute, Berlin, for providing the single crystal orientation, M. Kreplin and G. Berger for sample preparation. This work was supported by the French-German PROCOPE program.

### Bibliography

- Aronson, J.R. et al., 1970. Infrared spectra and radiative thermal conductivity of minerals at high temperatures. *J. Geophys. Res.*, 75(17): 3443-3456.
- Beck, A.E., Darbha, D.M. and Schloessin, H.H., 1978. Lattice conductivities of single-crystal and polycrystalline materials at mantle pressures and temperatures. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 17: 35-53.
- Branlund, J.M., Kameyama, M.C., Yuen, D.A. and Kaneda, Y., 2000. Effects of temperature-dependent thermal diffusivity on shear instability in a viscoelastic zone: implications for faster ductile faulting and earthquakes in the spinel stability field. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 182: 171-185.
- Brewster, M.Q., 1992. *Thermal radiative transfer and properties*. John Wiley and Sons, New York.
- Chai, M., Brown, J.M. and Slutsky, L.J., 1996. Thermal diffusivity of mantle minerals. *Phys. Chem. Miner.*, 23: 470-475.
- Chui, G.K. and Gardon, R., 1969. Interaction of radiation and conduction in glass. *J. Am. Ceram. Soc.*, 52(10): 548-553.
- Dubuffet, F., Yuen, D.A. and Rabinovicz, M., 1999. Effects of a realistic mantle thermal conductivity on the patterns of 3D convection. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 171: 401-409.
- Fujisawa, H., Fujii, N., Mizutani, H., Kanamori, H. and Akimoto, S., 1968. Thermal diffusivity of Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> and NaCl at high pressures and temperatures. *J. Geophys. Res.*, 73: 4727-4733.
- Fukao, Y., Mizutani, H. and Uyeda, S., 1968. Optical absorption spectra at high temperatures and radiative thermal conductivity of olivines. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 1: 57-62.
- Gibert, B., Seipold, U., Tommasi, A. and D., M., 2003a. Thermal diffusivity of upper mantle rocks: influence of temperature, pressure and the deformation fabric. *J. Geophys. Res.*, 108(B8): doi:10.1029/2002JB002108.
- Gibert, B., Schilling, F.R., Tommasi, A. and Mainprice, D., 2003b. Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions - a comparison. *Geophys. Res. Lett.*, 30(22): doi:10.1029/2003GL018459.
- Harrell, M., Brown, J.M. and Abramson, E.H., 2002. Anisotropic lattice thermal conductivity of upper mantle minerals at high temperature, AGU fall meeting, San Francisco.
- Hauk, S.A., Phillips, R.J. and Hofmeister, A.M., 1999. Variable conductivity: effects on the thermal structure of subducting slabs. *Geophys. Res. Lett.*, 26(21): 3257-3260.
- Höfer, M. and Schilling, F.R., 2002. Heat-transfer in quartz, orthoclase and sanidine at elevated temperature. *Phys. Chem. Miner.*, 29: 571-584.
- Höfer, M., 2003. *Wärmetransport in Quarz und Feldspäten von 22 bis 800°C*. PhD dissertation, Freien Universität, Berlin.
- Hofmeister, A.M., 1999. Mantle values of thermal conductivity and the geotherm from phonon lifetimes. *Science*, 283: 1699-1706.

- Hofmeister, A.M., 2001. The radiative contribution to the thermal conductivity of spinels and olivines from vibrational and optical spectroscopy., 7th Workshop "numerical modeling of mantle convection and lithospheric dynamics", Aussois.
- Holt, J.B., 1975. Thermal diffusivity of olivine. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 27: 404-408.
- Honda, S. and Yuen, D.A., 2001. Interplay of variable thermal conductivity and expansivity on the thermal structure of oceanic lithosphere. *Geophys. Res.*, 28(2): 351-354.
- Kanamori, H., Fujii, N. and Mizutani, H., 1968. Thermal diffusivity measurement of rock-forming minerals from 300°K to 1100°K. *J. Geophys. Res.*, 73(2): 595-605.
- Katsura, T., 1995. Thermal diffusivity of olivine under upper mantle conditions. *Geophys. J. Int.*, 122: 63-69.
- Katsura, T., 1997. Thermal diffusivity of periclase at high temperatures and high pressures. *Phys. Earth Planet. Int.*, 101: 73-77.
- Klemens, P.G., 1958. Thermal conductivity and lattice vibrational modes. *Solid State Phys.*, 7: 1-98.
- Klemens, P.G. and Greenberg, I.N., 1973. Radiative heat transfer through composite materials. *J. Appl. Phys.*, 44(7): 2992-1995.
- Kobayashi, Y., 1974. Anisotropy of thermal diffusivity in olivine, pyroxene, and dunite. *Journal of Physics of the Earth*, 22: 359-373.
- Osako, M. and Ito, E., 1991. Thermal diffusivity of MgSiO<sub>3</sub> perovskite. *Geophys. Res. Lett.*, 18(2): 239-242.
- Schatz, J.F. and Simmons, G., 1972. Thermal conductivity of Earth materials at high temperatures. *J. Geophys. Res.*, 77: 6966-6983.
- Schilling, F.R., 1999. A transient technique to measure thermal diffusivity at elevated temperature. *Eur. J. Mineral.*, 11: 1115-1124.
- Seipold, U., 1988. Simultaneous measurements of thermal diffusivity and thermal conductivity under high pressure using thermal pulse of finite length. *High Temp. - High Pressures*, 20: 609-613.
- Seipold, U., 1998. Temperature dependence of thermal transport properties of crystalline rocks - general law. *Tectonophysics*, 291: 161-171.
- Shankland, T.J., Nitsan, U. and Duba, A.G., 1979. Optical absorption and radiative heat transport in olivine at high temperature. *J. of Geophys. Res.*, 84: 1603-1610.
- Slack, G.A., 1979. The thermal conductivity of Nonmetallic crystals. *Solid State Phys.*, 34: 1-71.
- Staudacher, W., 1973. Die Temperatur-Leitfähigkeit von natürlichem olivin bei hohen drucken und temperaturen. *Zeitschrift für Geophysik*, 39: 979-988.
- Van Den Berg, A.P., Yuen, D.A. and Allwardt, J.R., 2002. Non-linear effects from variable thermal conductivity and mantle internal heating: implications for massive melting and secular cooling of the mantle. *Phys. Earth Planet. Int.*, 129: 359-375.

### 6.2.9 Remarque sur l'anisotropie de la diffusivité thermique.

L'observation d'un transport radiatif important a de fortes conséquences sur l'anisotropie de la diffusivité thermique. Les données de spectroscopie I.R. issues de Shankland et al. (1979) ne documentant que très partiellement une éventuelle anisotropie du transfert radiatif, l'hypothèse d'un transport radiatif isotrope a été adoptée. Une augmentation isotrope de la diffusivité thermique due au transfert radiatif a donc pour effet de faire décroître l'anisotropie de la diffusivité thermique. La figure 6.15 montre que l'anisotropie du transport par les phonons (calculée à partir des paramètres du tableau 1 de l'article) a tendance à augmenter avec la température. L'ajout d'une contribution radiative isotrope fait largement chuter l'anisotropie. Cette observation remet en question les conclusions obtenues dans le chapitre 4. Une meilleure connaissance de l'anisotropie de la diffusion thermique nécessite donc de savoir si le transport radiatif peut être ou non anisotrope.

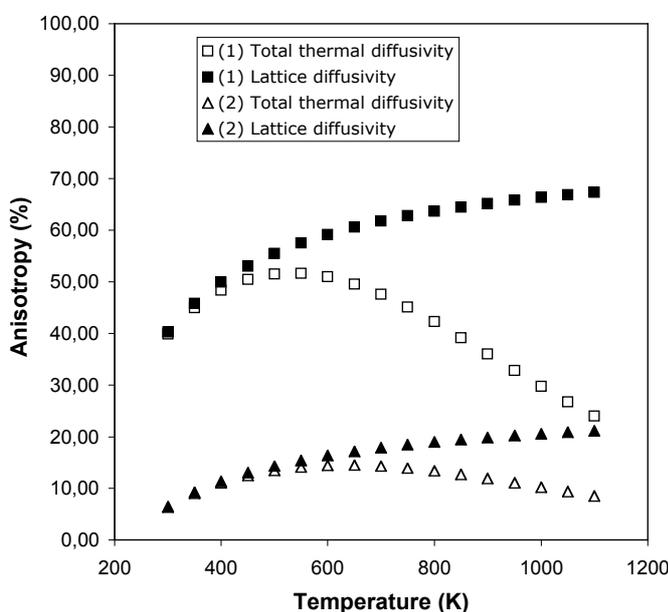


Figure 6.15 : Anisotropie de la diffusivité thermique du monocristal d'olivine calculée en considérant d'une part la contribution des phonons seulement et d'autre part en prenant en compte le rayonnement (anisotropies calculées à l'aide des paramètres du tableau 1 de l'article). La contribution radiative est calculée pour un échantillon de 10 mm de long.

### 6.3 Apport de la méthode (3).

La diffusivité thermique a été mesurée suivant les 3 axes cristallographiques (sous atmosphère réductrice), mais en n'utilisant qu'un cristal par direction. La figure 6.16 montre les résultats obtenus et la comparaison avec les résultats de la méthode 2. La direction [010] donne des résultats apparemment anormaux à haute température, où l'effet du rayonnement semble très élevé. Les résultats obtenus sur ce cristal ne seront pas pris en compte. Les dépendances en température montrent un fort transfert radiatif à haute température, comparable à celui observé par la méthode 2. Ces mesures ont été ajustées par la procédure utilisée dans l'article. La figure 6.17 montre le bon accord entre la contribution radiative (paramètre C de l'article) obtenue par les deux méthodes et confirme ainsi les conclusions de l'article.

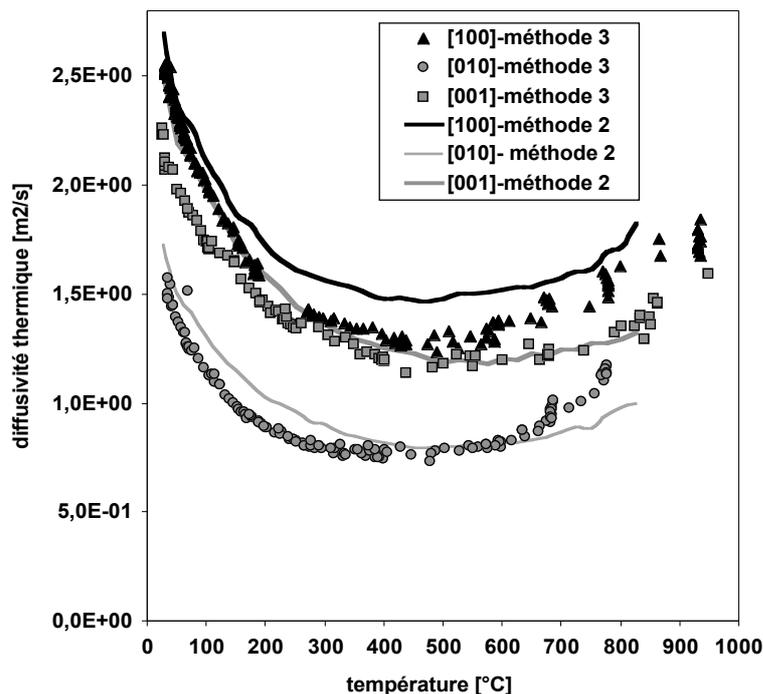


Figure 6.16 : Mesures du tenseur diffusivité thermique de l'olivine à haute température par la méthode 3 et comparaison avec la méthode 2.

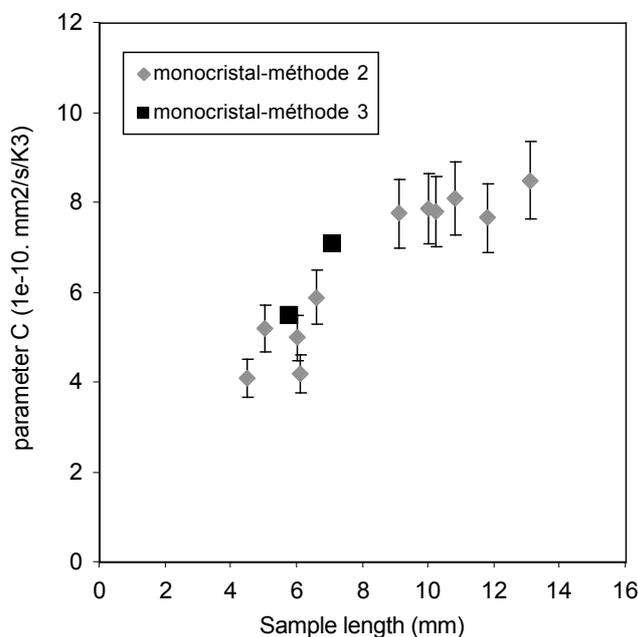


Figure 6.17 : Variation du paramètre C défini par l'équation (4) de l'article en fonction de la taille de l'échantillon. Les mesures réalisées par la méthode 3 s'accordent bien avec celles de la méthode 2

La dunite OMAN a également été étudiée jusqu'à plus de 1000°C (fig. 6.18) sous conditions oxydantes (air libre) et sous 1% $H_2/Ar$ . De la même façon qu'avec la méthode 2, les conditions d'oxydation ne semblent pas avoir d'effets sur le transfert radiatif, même jusqu'à plus de 1000°C. Cette observation marque une différence entre les mesures de diffusivité thermique et les mesures de spectroscopies I.R. . Pour ces dernières, l'oxydation à la surface des échantillons semble augmenter fortement l'absorption (e.g., Aronson et al., 1970). Enfin,

la contribution radiative obtenue par la méthode 3 semble sensiblement inférieure à celle mesurée par la méthode 2 (fig. 6.18). Deux effets peuvent expliquer cette différence. Une fracturation de l'échantillon à haute température dans la méthode 3 (pression uni-axiale de 10 MPa environ) peut conduire à une sous-évaluation du transfert radiatif. Par ailleurs, dans la méthode 2, le déséquilibre radiatif créé par l'émission du pulse peut conduire à des comportements différents dans les monocristaux et les agrégats. En effet, le flux balistique (non absorbé à la surface de l'échantillon) est susceptible d'être absorbé de façon plus importante dans les agrégats du fait des joints de grain. C'est pourquoi ce flux n'est que peu observable sur les roches (voir chapitre 5, figure 5.4a). Ce flux est toutefois transmis à travers l'échantillon et la réponse résultante au thermocouple peut se superposer dans le temps à la réponse liée au transport intrinsèque par conduction, conduisant à une surestimation artificielle de la diffusivité thermique. La comparaison des données sur monocristaux et sur la dunite (fig. 12 de l'article) montre que la diffusivité thermique à des températures intermédiaires (400-500°C) devient plus élevée pour la dunite que pour le monocristal « isotrope », alors qu'aucune différence n'était observée à basse température (<300°C). Cette différence à des températures intermédiaires ne peut être due qu'à la méthode, puisque l'agrégat n'est a priori pas meilleur conducteur que le cristal « isotrope ».

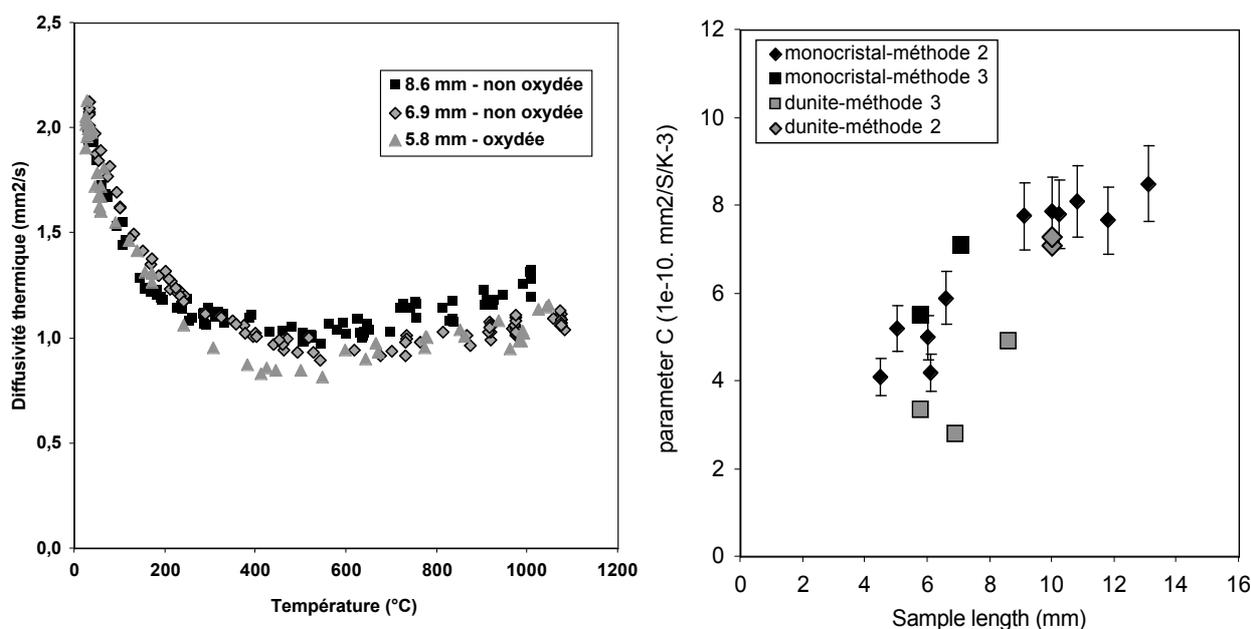


Figure 6.18 : A gauche, mesure de la diffusivité thermique de la dunite OMAN à haute température par la méthode 3. A droite, contribution radiative des monocristaux (en noir) et de la dunite (en gris).

En conséquence, la conclusion proposée à la lumière des mesures sur la dunite par la méthode 2 (article) doit être quelque peu atténuée. Une différence notable entre le comportement des monocristaux et agrégats peut être observée. La limitation des méthodes de mesures et le petit nombre de mesures réalisées avec la méthode 3 ne permettent pas de discuter ce transfert d'échelle en détail. On peut néanmoins conclure que le transfert thermique par rayonnement est important dans les agrégats polycristallins d'olivine.

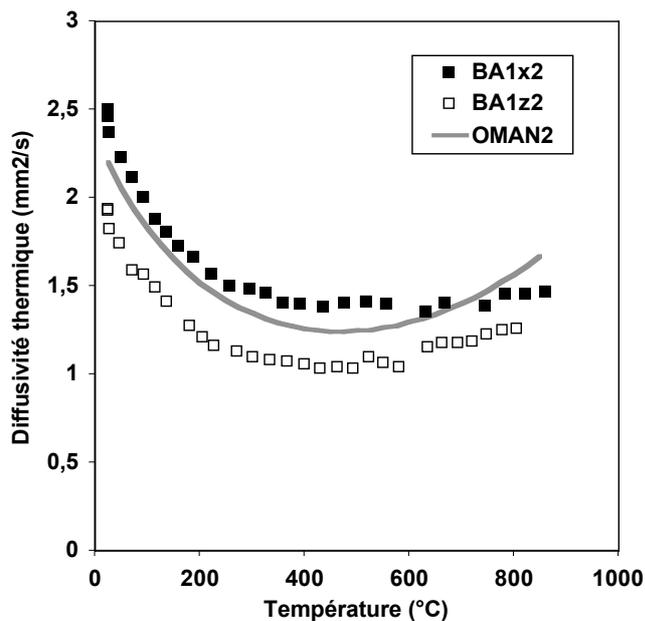
## 6.4 Discussion.

Un transfert radiatif important a été mesuré dans les monocristaux d'olivine, suggérant ainsi que ce processus peut contribuer de façon significative aux transferts thermiques dans le manteau. En particulier, ces mesures semblent confirmer les évaluations découlant des mesures de spectroscopies I.R.. Les deux méthodes utilisées étant limitées à des températures relativement faibles (900°C-1000°C), des mesures de spectroscopie I.R. pourraient permettre d'évaluer le transfert radiatif à plus haute température. Les mesures proposées par Shankland et al. (1979) comportent des incertitudes et peuvent sans doute être améliorées. L'évaluation du coefficient d'absorption en fonction de l'orientation semblerait très utile, de même qu'un contrôle parfait des conditions d'oxydation. Un dispositif de spectromètre I.R. équipé d'un système de chauffage est pour cela en cours d'élaboration au GFZ-Potsdam.

La méconnaissance d'une loi de comportement à haute température du transport par les phonons limite l'utilisation des mesures directes de diffusivité thermique. Un libre parcours moyen des photons moyenné sur un large intervalle de température est seulement calculable. Des données expérimentales (méthodes PTGS-chapitre 2) ou issues de modèles numériques (Dynamique Moléculaire) apparaissent indispensables pour mieux évaluer la contribution des phonons et donc celle des photons.

Les mesures sur la dunité montre que le transfert radiatif est important dans les agrégats, mais qu'il peut toutefois être atténué par les réflexions aux joints de grains. Cette réduction avait déjà été observée par des mesures sur des matériaux comme l'alumine (monocristal et polycristaux) (e.g., Kingery, 1962) et suggérée par des considérations relatives aux réflexions aux joints de grains (e.g., Pitt et Tozer, 1970). Cependant, ces mesures ont montré que les deux méthodes utilisées sont limitées pour l'étude des agrégats. Il apparaît qu'un déséquilibre radiatif faible est sans doute nécessaire et que des mesures sous pression sont indispensables pour éviter la microfracturation. La méthode Angström est celle qui permet le mieux de limiter le déséquilibre radiatif. Son utilisation à haute pression est possible et justifie l'élaboration du dispositif de mesure initiée dans la presse Paterson (chapitre 3).

L'extrapolation des mesures aux conditions du manteau comporte deux problèmes. D'une part, les mesures présentées n'atteignent pas des conditions de très hautes températures (>1000-1100°C). L'extrapolation à haute température en utilisant l'équation (4) de l'article ne tient pas compte des variations du libre parcours moyen des photons, qui est supposé diminuer à cause du pic d'absorption à 1  $\mu\text{m}$  (e.g., Burns, 1970). Des données à plus haute température sont donc indispensables. D'autre part l'effet des pyroxènes n'est pas pris en compte. S'ils ne semblent pas affecter sensiblement la contribution des phonons (chapitre 5), les pyroxènes peuvent diminuer les transferts radiatifs. En effet, les orthopyroxènes absorbent fortement le rayonnement dans le proche I.R. (Schatz et Simmons, 1972). Des mesures sur des lherzolites par la méthode 2 montrent par exemple que la contribution radiative est plus faible que pour la dunité (fig. 6.19). Une étude systématique sur des monocristaux d'orthopyroxènes, sur pyroxénites et lherzolites serait par conséquent indispensable.



**Figure 6.19 :** Mesures de la diffusivité thermique sur la lherzolite 00BA1 (directions X et Z - échantillons de 10 mm de long) et comparaison avec la dunité OMAN. Les paramètres  $C$  calculés sont  $5.6$  et  $6.33 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-3}$  pour les directions X et Z, respectivement, contre  $7.3$  pour la dunité OMAN (tableau 1 de l'article).

Enfin, les différences de valeurs absolues de diffusivité thermique obtenues par les différentes méthodes (chapitre 5) demeurent importantes à haute température et s'amplifient du fait du transport radiatif. La variation de la diffusivité thermique avec la taille de l'échantillon montre que les mesures conduites sous haute pression et haute température ne permettent pas de donner une valeur absolue réaliste de la diffusivité thermique. Elles ne donnent accès qu'à une faible fraction du transport radiatif (Fujisawa, 1968; Katsura, 1995; Katsura, 1997). Les différences entre les méthodes 2 et 3 et la méthode 1 est largement accentuée avec la température. La méthode 1 donne des coefficients  $C$  d'environ  $1 \cdot 10^{-10} \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{K}^{-3}$ , soit une contribution radiative environ 5 à 6 fois inférieure à celle mesurées dans ce chapitre. L'hypothèse de déséquilibre radiatif émise dans le chapitre 5 semble se confirmer. Il semblerait que seulement la contribution des phonons ne soit mesurée par la méthode 1. L'oxydation, évoquée dans le chapitre 4 ne semblerait pas être la cause de ses écarts à haute température, au vu son effet déduit des méthodes 2 et 3.



## 7 Implications géodynamiques



## 7.1 Introduction

Comme il l'a été rappelé dans l'introduction générale de la thèse, les propriétés de transport thermique des matériaux du manteau ont un impact très important sur la dynamique du manteau. La diffusion thermique contrôle la structure de la lithosphère, notamment son épaisseur, sa déformation (à travers la dépendance des propriétés rhéologiques en fonction de la température), mais aussi la durée nécessaire au rétablissement de l'équilibre thermique après une perturbation thermique. Tous les processus géodynamiques impliquant un déséquilibre thermique sont donc concernés. Ces derniers sont essentiellement liés à l'interaction entre la lithosphère conductive (continentale ou océanique) et le milieu convectif sous-jacent. Par exemple, le rifting est dans la plupart des cas lié à la création d'un déséquilibre thermique entre la lithosphère continentale et un panache mantellique. L'évolution des bassins océaniques, succédant à l'épisode de rifting, est un exemple de retour à l'équilibre. Ces deux processus sont donc fortement contrôlés par la capacité de la lithosphère à transporter la chaleur. L'objet de ce chapitre est d'utiliser les contraintes expérimentales déduites des chapitres précédents afin d'évaluer l'effet d'une variation de la diffusivité thermique du manteau supérieur sur ces deux processus géodynamiques. Les interactions entre la lithosphère et le manteau convectif seront également discutées dans le cas de la stabilisation de la lithosphère cratonique. Les exemples proposés intégreront tout particulièrement les données d'anisotropie de la diffusion thermique, qui constituent un des résultats majeurs du travail de thèse. Les effets associés à cette anisotropie, simplement évoqués dans les articles du chapitre 4, seront discutés en fonction des contextes géodynamiques et de la structure lithosphérique associée.

Les estimations de diffusivité thermique déduites des mesures réalisées dans la thèse montrent en effet de très fortes différences. Seule l'anisotropie est une valeur indépendante de la méthode ; une anisotropie de 15 à 25% semble être une valeur tout à fait réaliste pour des péridotites naturellement déformées. La méthode 1 donne globalement des valeurs absolues et des variations en température semblables à celles mesurées dans la plupart des études antérieures. La méthode 2 donne des valeurs beaucoup plus élevées et montre une forte contribution radiative. La méthode 3 donne des résultats intermédiaires. Les données obtenues par les trois méthodes ont été ajustées par une loi standard :

$$D = \frac{1}{A + BT} + C.T^3 \quad (7.1)$$

Les paramètres obtenus pour chaque méthode sont résumés dans le tableau 7.1. Ces paramètres ont été obtenus en ajustant les données acquises sur des agrégats.

Méthode	A [m <sup>2</sup> .s]	B [m <sup>2</sup> .s.K <sup>-1</sup> ]	C [m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> .K <sup>-3</sup> ]
Méthode 1 (Seipold)	22602	1755	9,7.10 <sup>-11</sup>
Méthode 2 (Schilling)	55740	1350	7,1.10 <sup>-10</sup>
Méthode 3 (Montpellier)	-87300	1995	4.10 <sup>-10</sup>

Tableau 7.1 : Coefficients obtenus par ajustement des mesures de diffusivité thermique sur les échantillons Oman ou BALM4 (recalculé isotrope) par l'équation (7.1) pour chacune des méthodes.

Pour chaque situation géodynamique envisagée, les trois modèles seront testés, le modèle 1 étant considéré comme celui se rapprochant le plus des données publiées antérieurement. Pour chaque cas, l'effet de la conductivité thermique sera montré et celui de l'anisotropie sera discuté.

## 7.2 Évolution de la lithosphère océanique.

L'évolution de la lithosphère océanique se caractérise principalement par l'évolution de son état thermique, c'est-à-dire, son refroidissement depuis la dorsale océanique jusqu'aux zones de subduction (e.g., Schubert et al., 1976). Ce refroidissement de la lithosphère océanique se fait de façon conductive (en négligeant tout phénomène d'hydrothermalisme proche des dorsales) et advective (mouvement de la plaque ou convection primaire). Il est donc caractérisé par deux paramètres : la conductivité thermique et la vitesse de la plaque océanique. Ce refroidissement s'accompagne d'une diminution du flux de chaleur en surface et d'une augmentation de la densité de la plaque, qui provoque la subsidence. Cette évolution thermique explique donc la subsidence des bassins océaniques, la bathymétrie des océans en fonction de l'âge de la lithosphère et le flux de chaleur en surface (e.g., Parsons and Sclater, 1977).

Plusieurs types de modèles sont généralement adoptés pour décrire ce refroidissement. Ils doivent ajuster au mieux les données de flux et de bathymétrie (mais aussi celles du géoïde). Ils ont en commun qu'ils considèrent la lithosphère océanique comme le résultat du refroidissement du matériel asthénosphérique accrété à la dorsale. Ils diffèrent principalement par les conditions aux limites utilisées, dont la plus importante est la condition à la base de la lithosphère. Certains modèles considèrent un milieu semi-infini, d'autres utilisent une température constante (1200°C-1300°C) ou un flux chaleur constant à la base de la lithosphère, qui pourrait être associé au développement d'une convection à petite échelle à l'interface lithosphère – manteau convectif. Tous ces modèles parviennent à reproduire la subsidence des bassins océaniques dans les premiers stades d'évolution de la lithosphère (<50 Ma). Les principales différences apparaissent à des âges avancés de la lithosphère (>70 Ma), lorsqu'une convection à petite échelle est supposée se mettre en place. Une lacune commune à tous ces modèles est liée aux incertitudes quant aux valeurs de la diffusivité thermique et de l'expansion thermique dans les premiers 200 km du manteau, essentielles pour calculer les échanges thermiques et la subsidence. La plupart des modèles utilisent d'ailleurs une conductivité constante. Une variation de la diffusivité en fonction de la profondeur (due à la dépendance à la température) ou en fonction de la structure de la lithosphère (due à l'anisotropie) peut toutefois modifier significativement la structure thermique et l'épaisseur de la lithosphère à l'équilibre. Le but de cette étude va être de vérifier l'effet de la diffusivité thermique sur l'évolution des bassins océaniques, en utilisant un modèle donné de refroidissement (Doin et Fleitout, 1996).

### 7.2.1 Les modèles physiques de refroidissement.

Le modèle de type plaque est un modèle très couramment utilisé pour la description de l'évolution thermique des bassins océaniques (Fowler, 1990 ; Stein et Stein, 1992). Dans ce modèle, la plaque est représentée par une boîte bidimensionnelle d'épaisseur  $L$  se déplaçant à une vitesse  $U$ . Les conditions aux limites imposent une température constante à la base de la plaque et à l'axe de la dorsale. La température constante est prise comme la température de l'asthénosphère  $T_m$ , soit 1300°C. La température à la surface est de 0°C. Le refroidissement de la plaque provoque un déplacement des isothermes vers la base de la boîte. Pour un âge assez grand (loin de la ride), l'épaisseur de la lithosphère (défini comme la profondeur de l'isotherme 1300°C) atteint l'épaisseur de la boîte.

Dans ce modèle, l'équation de la chaleur suivante est résolue, en considérant les paramètres physiques variables (voir annexe 1) :

$$\rho_m \cdot c_p(T, z) \cdot U \cdot \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial z} \left( k_x(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (7.2)$$

Où  $U$  est la vitesse de la plaque,  $c_p$  est la capacité thermique à pression constante,  $k(T, z)$  la conductivité thermique variant avec la température et la profondeur et  $\rho_m$  la masse volumique. Le temps  $t$  est introduit naturellement car  $U=x/t$ . La dérivée en fonction de  $x$  est souvent négligée car elle traduit la conduction latérale de la chaleur, considérée comme négligeable par rapport à l'advection (mouvement de la plaque dans la direction  $x$ ).

Le modèle CHABLIS (Constant Heat Flow Applied at the Bottom of the Lithosphere) est un modèle alternatif pour lequel un flux de chaleur constant, depuis la dorsale jusqu'aux zones de subduction, est imposé à la base de la lithosphère. Ce flux de chaleur constant serait dû à une convection à petite échelle à la base de la lithosphère. Cette convection est prédite par des modèles numériques et analogiques (e.g., Dumoulin et al., 2001). Il a été aussi suggéré qu'elle soit la cause d'anomalies du géoïde dans le Pacifique (e.g., Buck, 1985), mais l'interprétation de ces observations est encore discutée.

Dans ce modèle, l'asthénosphère, supposée convective, a une température constante et la transition entre l'asthénosphère et la lithosphère est modélisée par une zone conductive dont la base est soumise à un flux de chaleur constant. En pratique, un flux de chaleur constant est appliqué lorsqu'une température de coupure  $T_c$ , égale à une fraction de la température de l'asthénosphère  $T_m$  ( $T_c=0.9.T_m$ ), est atteinte. Cette température de coupure est prise comme la température à la base de la lithosphère. La résolution de l'équation de la chaleur utilise un modèle numérique en différences finies (schéma implicite) qui comporte 250 éléments suivant la direction  $x$  et 26 éléments suivant la direction  $z$  (profondeur). Le modèle fonctionne avec des variables adimensionnées (Doin et Fleitout, 1996). Les données adimensionnées en sortie sont le flux de chaleur en surface, la subsidence, le champ de température et la distance à l'axe de la ride (ou l'âge). La redimensionnalisation se fait par ajustement des prédictions des modèles sur l'évolution du flux de chaleur et de la bathymétrie avec l'âge aux données de flux et de bathymétrie mesurées directement dans les océans (e.g., Parsons et Sclater, 1977). La température de l'asthénosphère  $T_m$  et l'épaisseur de lithosphère  $Z_l$  à l'équilibre sont variées systématiquement de façon à ce que les données de flux et de bathymétrie ajustent au mieux les observations. Ce sont principalement ces deux variables qui différencient les divers modèles d'évolution des océans. Par ailleurs, le coefficient d'expansion thermique, qui contrôle la densité de la lithosphère, joue aussi un rôle important dans le calcul de la subsidence. Il peut être aussi ajusté de façon à obtenir un meilleur accord entre les subsidences calculée et modélisée. Dans cette étude, il sera considéré constant et égal à  $4.10^{-5} \text{ K}^{-1}$ .

### 7.2.2 Effet des variations de la diffusivité thermique

L'évolution thermique de la lithosphère a été calculée en utilisant le modèle CHABLIS pour les trois lois de diffusivité thermique définies dans le tableau 7.1. La redimensionnalisation a été réalisée en ajustant les prédictions des trois modèles sur le flux de chaleur et la bathymétrie observée pour une lithosphère océanique de 100 Ma (fig. 7.1). Le flux et la subsidence sont pris comme égaux à  $50 \text{ mW.m}^{-2}$  et 3000m, respectivement, à 100 Ma. Ces valeurs sont en accord avec la majorité des mesures réalisées à 100 Ma (Parsons et Sclater, 1977) (compilation de Doin et Fleitout, (1996)). Pour cet âge, ces données sont peu affectées par des phénomènes locaux tels que l'hydrothermalisme et sont donc relativement fiables. Pour être plus rigoureux, ces valeurs auraient dû être ajustées en utilisant l'ensemble des bases de données existantes depuis 0 Ma jusqu'au âges très élevés (200Ma). La figure 7.1 montre l'accord entre les flux et subsidence obtenue sur l'ensemble des âges de la lithosphère,

suggérant que le redimensionnement à partir d'une seule valeur de référence à 100 Ma n'induit pas d'erreur significative. Les méthodes 1 et 3 montrent un très bon accord, la méthode 2 donne des écarts faibles.

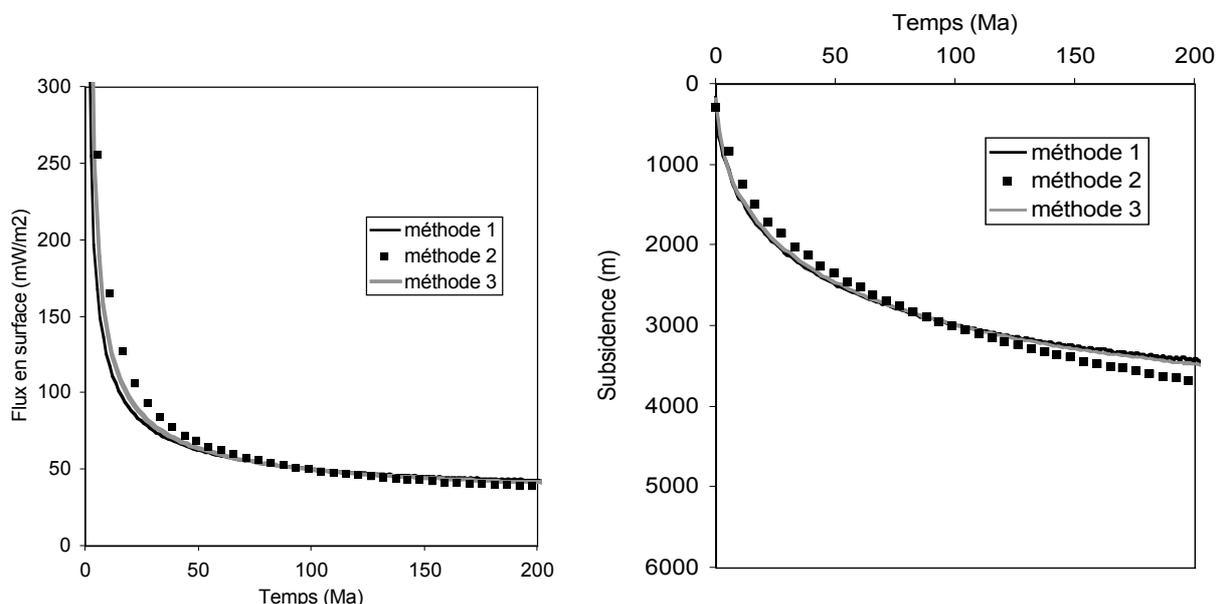


Figure 7.1 : Flux de chaleur en surface et subsidence en fonction du temps obtenus après redimensionnement pour les 3 lois de diffusivités thermiques.

Les paramètres  $T_m$  et  $Z_l$  nécessaires pour obtenir le meilleur ajustement avec les données de flux et de subsidence montrent de très grandes variations suivant les variations de diffusivité thermique utilisées (tableau 7.2).

Méthode de mesure	Température du manteau $T_m$ (°C)	Profondeur de la lithosphère à l'équilibre $Z_l$ (km)	Diffusivité thermique moyenne
Méthode 1	1628	78	$0.7 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Méthode 2	907	244	$1.7 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Méthode 3	1351	116	$1.1 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
Méthode 2 avec rayonnement atténué	1081	156	$1.4 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

Tableau 7.2 : Valeurs des paramètres obtenus pour le meilleur ajustement des données de flux et de subsidence.

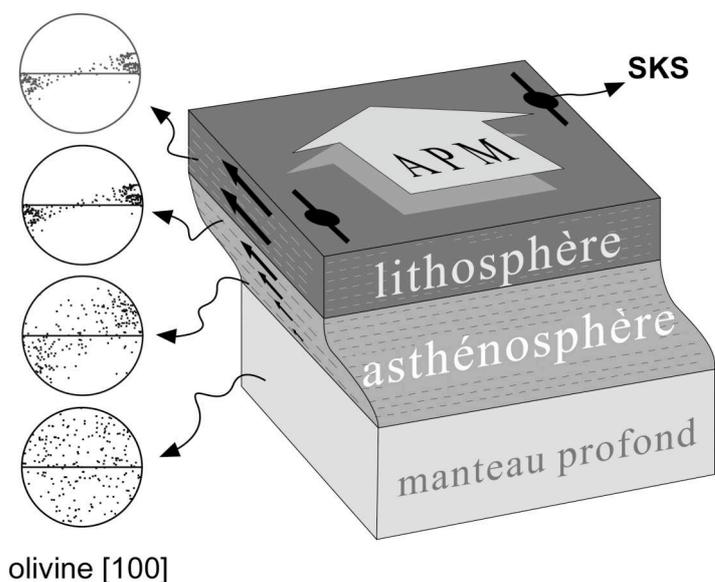
La méthode 1 donne une température du manteau excessive et une épaisseur à l'équilibre très faible. La méthode 2 donne par contre une température  $T_m$  très faible, incompatible avec une fusion à la dorsale (solidus à pression ambiante d'une péridotite étant de  $1100^\circ\text{C}$  environ (McKenzie et Bickle, 1988)), et une épaisseur à l'équilibre très élevée. La méthode 3 donne des valeurs réalistes de température  $T_m$  (valeur de  $1200^\circ\text{C}$ - $1300^\circ\text{C}$  généralement admise par les observations pétrologiques) et d'épaisseur à l'équilibre. Les valeurs de diffusivités obtenues par la méthode 1 sont clairement trop faibles pour expliquer l'évolution des bassins océaniques. Pour la méthode 2, l'extrapolation à haute température de la contribution

radiative par l'équation 7.1 exagère sans doute cette contribution. Les données de Shankland et al. (1979) suggérant une stabilisation de la contribution radiative à haute température, cette contribution a été considérée comme constante à des températures supérieures à la température maximale de mesure, soit 850°C (voir plus bas, discussion sur les géothermes continentaux). Dans ce cas, la température  $T_M$  est plus élevée (1081°C) et l'épaisseur  $Z_l$  plus faible.

Les écarts obtenus entre les méthodes 2 et 3 sont toutefois importants. La méthode 3 semble donner des résultats en accord avec la majorité des études (Doin et Fleitout, 1996), tandis que la méthode 2 suggère une température du manteau plus faible. Une telle température pourrait s'opposer à l'hypothèse d'une convection à petite échelle à tous les âges de la lithosphère. La calibration de cette méthode et la reproductibilité des mesures réalisées dans cette étude laisse toutefois penser qu'une température du manteau plus faible peut être suggérée. L'anisotropie de la diffusivité thermique va permettre d'affiner la discussion.

### 7.2.3 Rôle de l'anisotropie de conductivité thermique

Dans le cas de la lithosphère océanique, une orientation préférentielle des cristaux d'olivine cohérente sur des échelles spatiales supérieures à plusieurs dizaines de km est suggérée par l'observation sismologique d'une anisotropie sismique, fondée, en particulier, sur l'analyse du déphasage des ondes de cisaillement (SKS). Ces observations permettent de déduire l'orientation du plan de polarisation de la phase la plus rapide ainsi que le retard temporel de la phase la plus lente sur la phase la plus rapide. Pour la plupart des domaines océaniques, l'onde la plus rapide est polarisée parallèlement au vecteur vitesse de la plaque dans le référentiel hotspots (APM). L'association de ces observations et de la modélisation des vitesses des ondes de cisaillement pour des péridotites déformées naturellement (e.g., Mainprice et al., 2000) suggère deux grandes tendances. D'une part, l'épaisseur du milieu anisotrope est de l'ordre de 100 à 200 km. D'autre part, les axes [100] de l'olivine sont orientés parallèlement au vecteur déplacement de la plaque océanique. Ces observations sont en accord avec l'hypothèse d'un régime de déformation en cisaillement simple issu de l'entraînement de l'asthénosphère par la lithosphère rigide en mouvement (Schubert et al., 1976). Des modélisations numériques montrent que l'épaisseur de la zone affectée par ce cisaillement (lithosphère+asthénosphère) peut atteindre une épaisseur de 200 km pour une plaque d'environ 100 Ma (Tommasi, 1996). Ces modélisations montrent par ailleurs que sur cette épaisseur, les fabriques cristallographiques sont marquées par une forte concentration des axes [100] de l'olivine parallèlement à l'APM (Tommasi, 1998). Ceci est en accord avec les OPR d'olivine obtenues lors d'expériences de déformation en cisaillement simple de dunités à  $T=1200-1300^\circ\text{C}$  et  $P=300\text{MPa}$  (e.g., Bystricky et al., 2000; Zhang and Karato, 1995).



**Figure 7.3:** Illustration de la déformation du manteau sous l'effet du déplacement de la lithosphère océanique (APM = déplacement de la plaque dans le repère de points chauds) : développement des fabriques cristallographiques et anisotropie des ondes SKS.

Le cisaillement simple conduisant à une forte concentration des axes [100] dans la direction de cisaillement (Tommasi (1998)), il induit aussi une forte anisotropie de la diffusivité thermique. La plupart des échantillons étudiés dans la thèse ont des fabriques en accord avec une déformation de haute température par cisaillement simple. Pour ces échantillons, la diffusivité thermique est maximale dans le plan de foliation (=plan de cisaillement) et parallèlement à la linéation (direction du cisaillement), tandis qu'elle est minimale en direction du pôle de la foliation. Cette anisotropie, recadrée dans le contexte de la lithosphère océanique, suggère que la composante verticale de la diffusivité thermique est moindre que la composante horizontale. Des modélisations thermo-mécaniques d'évolution des bassins océaniques, fondées sur l'anisotropie du monocristal d'olivine, ont montré un effet de localisation de la déformation (Hearn et al., 1997). Cependant, l'anisotropie du monocristal surestime l'anisotropie à l'échelle de la roche (d'un facteur deux environ). Le modèle CHABLIS montre qu'une diffusivité accrue dans la direction horizontale n'a pas d'effet car les gradients thermiques horizontaux sont faibles. Des différences inférieures à 1°C sont obtenues en comparant un modèle isotrope et un modèle où la conductivité horizontale est augmentée. L'effet principal de l'anisotropie est de diminuer d'environ 10 à 15% la diffusivité verticale par rapport à une diffusivité isotrope. L'introduction de cette anisotropie, en utilisant les données de la méthode 2, a pour effet de diminuer l'épaisseur de lithosphère à l'équilibre et d'augmenter la température  $T_m$  du manteau.

Méthode de mesure	Température du manteau $T_m$ (°C)	Profondeur de la lithosphère à l'équilibre $Z_l$ (km)	Diffusivité thermique verticale moyenne
Méthode 2	995	239	1.46 mm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Méthode 3	1466	107	0.94 mm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>
Méthode 2 avec rayonnement atténué	1180	145	1.18 mm <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup>

**Tableau 7.3 :** valeurs des paramètres obtenus en ajustant les données de flux et de subsidence, en considérant une diminution de 15% de la diffusivité thermique verticale.

L'introduction de l'anisotropie rend les résultats de la méthode 2 en meilleur accord avec les paramètres attendus pour le manteau (tableau 7.3). Les données de la méthode 3 donnent alors des températures plus élevées. L'anisotropie permet de valider ainsi des valeurs élevées de la diffusivité thermique.

A la lumière de l'évolution de la lithosphère océanique un modèle réaliste de diffusivité thermique se situe entre les données des méthodes 2 et 3. Cependant, l'utilisation de la subsidence thermique pour redimensionner les paramètres nécessite une bonne connaissance de l'expansion thermique. Or ce paramètre, qui a été considéré comme constant ici, montre des variabilités non négligeables qui s'ajoutent aux variabilités de diffusivité thermique. Si cette étude permet d'écarter totalement les résultats de la méthode 1, dont une caractéristique est la faiblesse du transfert radiatif, elle ne permet pas de valider exactement les méthodes 2 et 3. Il faut simplement retenir qu'une conductivité thermique élevée pourrait impliquer une forte diminution de la température du manteau et avoir des implications sur la convection à petite échelle et notamment sur la déstabilisation de la lithosphère océanique (Dumoulin et al., 2001). Par ailleurs, la présence d'une croûte océanique dont les roches sont thermiquement moins conductrices que les péridotites (basaltes et gabbros) pourrait contribuer à diminuer la conductivité de la lithosphère océanique, permettant ainsi de valider une diffusivité thermique accrue dans le manteau (méthode 2).

### **7.3 La lithosphère continentale.**

De la même façon qu'elle contrôle fortement l'évolution des bassins océaniques, la diffusivité thermique va contrôler la structure thermique de la lithosphère continentale. Cette structure dépend de l'apport de chaleur à la base de la lithosphère, qui se fait principalement par convection, et de la production radiogénique dont elle est le siège, qui se concentre essentiellement dans la croûte (Fowler, 1990). Pour les lithosphères continentales qui ont atteint l'équilibre thermique, la résolution de l'équation de la chaleur en régime stationnaire permet d'évaluer la température en fonction de la profondeur, c'est-à-dire le géotherme. La détermination de ce géotherme est fondamentale pour le calcul de la résistance mécanique de la lithosphère, car la rhéologie des matériaux terrestres, dès que la profondeur atteint 10-15 km, dépend fortement de la température. C'est le géotherme qui va donc contrôler la déformation des continents (voir définition de la lithosphère thermique au chapitre 1).

Cependant, la structure thermique des continents est souvent modifiée par des interactions avec le manteau convectif. Deux effets sont attendus. D'une part, la déstabilisation de la lithosphère par des courants de convection ascendants provenant du manteau sous-jacent conduit à des processus thermo-mécaniques transitoires, qui modifient fortement la résistance mécanique de la lithosphère : c'est le cas du rifting. D'autre part, des courants de convection descendants peuvent stabiliser la lithosphère et conduire à des structures typiques : la lithosphère cratonique.

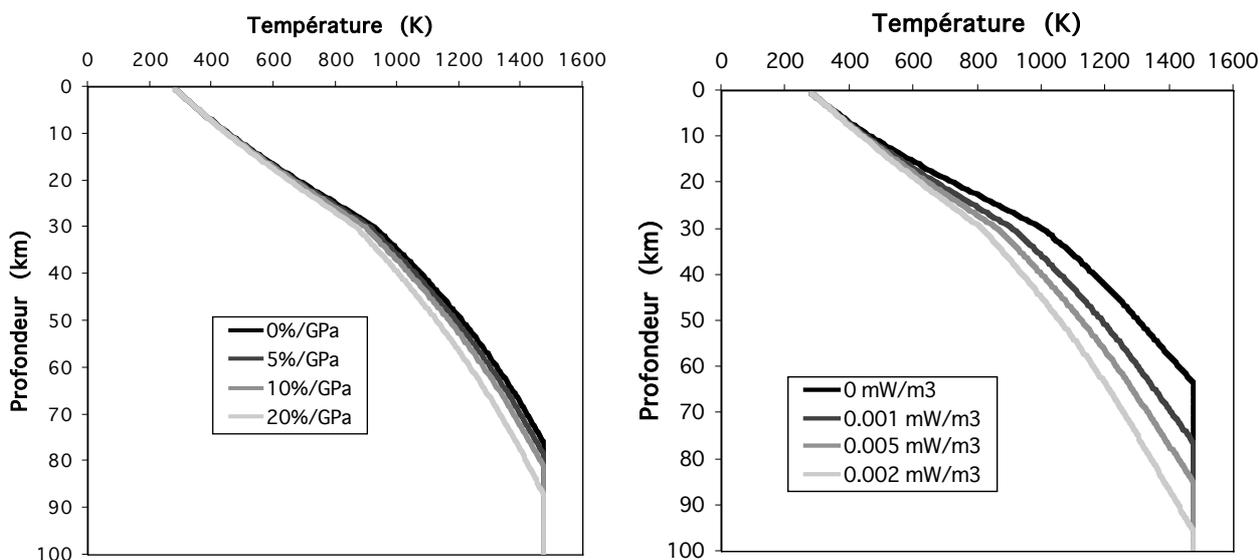
Dans un premier temps, les différentes lois de diffusivité thermique obtenues dans cette étude vont être utilisées pour calculer le géotherme continental. Le but est de seulement montrer l'importance d'utiliser des valeurs réalistes de la diffusivité thermique des roches du manteau. Les conséquences géodynamiques ou les comparaisons avec les modèles antérieurs ne seront pas discutées. Ensuite, l'effet de l'anisotropie de la diffusivité thermique sur le rifting et sur la stabilisation de la lithosphère cratonique sera discuté.

### 7.3.1 Le géotherme continental.

Le géotherme continental est calculé pour les trois modèles de conductivités thermiques proposés. Pour cela, un modèle en différences finies, incluant les variations en température et pression de la conductivité thermique et la production radiogénique a été construit. Le modèle extrapole en profondeur le flux de chaleur mesuré en surface jusqu'à la température de la limite de la lithosphère thermique (ici prise à 1300°C). La conductivité thermique de la croûte est considérée une fois et demi-inférieure à celle du manteau. Cette hypothèse est fondée sur les mesures de conductivités thermiques réalisées sur les roches de la croûte par la méthode 1 (Seipold, 1982; Seipold, 1990; Seipold, 1992; Seipold, 1995), associés aux mesures sur péridotites réalisées dans cette étude (chapitre 4). Ainsi, les différences obtenues entre les trois méthodes concernant les roches du manteau sont supposées se reproduire sur celles de la croûte.

Trois paramètres sont constants dans tous les modèles: la distance caractéristique de décroissance de la production radiogénique avec la profondeur dans la croûte (10 km), l'épaisseur de la croûte (la profondeur du Moho est de 30 km) et l'isotherme correspondant à la base de la lithosphère (1300°C-1573K). La contribution radiative est prise en compte de deux manières : soit elle est extrapolée à jusqu'à 1300°C en utilisant l'équation (7.1) et les coefficients  $C$  présentés dans le Tableau 7.1, soit elle est supposée constante pour des températures supérieures à la température maximale de mesure de la diffusivité thermique (1000°C pour les méthodes 1 et 3 et 850°C pour la méthode 2). Cette deuxième extrapolation se fonde sur les observations de Shankland (1979), qui suggèrent une faible augmentation de la contribution radiative à des températures supérieures à 800-1000°C, associée à une augmentation du coefficient d'absorption.

L'effet de la pression sur la contribution des phonons à la conductivité thermique ainsi que l'effet de la production radiogénique dans la croûte ont été testés en utilisant la diffusivité thermique en fonction de la température obtenue par la méthode 3 (Montpellier). La figure 7.4 montre que pour des dépendances de la pression entre 0 et 10%/GPa, l'effet sur le géotherme et sur la profondeur de la base de la lithosphère est relativement faible. Les incertitudes expérimentales sur cette dépendance (variations <5%/GPa pour les monocristaux et de 5 à 13%/GPa pour les roches (Gibert et al., 2003a)), ont donc peu d'influence sur le géotherme. Une dépendance de 5%/GPa a donc été utilisée dans tous les autres modèles. La production radiogénique dans la croûte a par contre un effet très important sur le géotherme. Une faible production accentue le géotherme et conduit à une lithosphère plus mince. Une production de  $2 \mu\text{W}/\text{m}^3$  n'est pas réaliste car elle correspond approximativement à la production d'un granite, dont la croûte n'est que partiellement composée. Une valeur de  $1 \mu\text{W}.\text{m}^3$  est généralement utilisée pour la croûte (e.g., Fowler, 1990) et sera prise comme valeur standard. Celle du manteau est d'au moins un ordre de grandeur inférieur, donc négligée ici. Les géothermes modélisés seront comparés à deux solidus : le solidus pour une péridotite anhydre est extrait de (McKenzie et Bickle, 1988) et celui pour une péridotite hydratée extrait de (Pollack et al., 1993).



**Figure 7.4** : Effet de la dépendance à la pression de la diffusivité thermique (gauche) et de la production radiogénique dans la croûte (droite) sur le géotherme

*Modèle 1 : extrapolation des lois de diffusivité thermique obtenues par les différentes méthodes jusqu'à 1300°C.*

Le géotherme pour une lithosphère « normale », caractérisée par un flux de chaleur en surface de  $60 \text{ mW.m}^{-3}$ , est calculé pour les 3 lois de variation de la diffusivité thermique en fonction de la température présentées dans le tableau 7.1. Les faibles diffusivités thermiques obtenues par la méthode 1 conduisent à une lithosphère très fine (60 km), alors que le calcul utilisant les diffusivités obtenues par la méthode 2 induisent une lithosphère très épaisse (160 km) (figure 7.5). Aucune de ces deux estimations n'est en accord avec l'épaisseur généralement admise pour une lithosphère normale à l'équilibre (100-120 km). Des épaisseurs de lithosphère de l'ordre de 160 km de profondeur sont plutôt attendues pour des cratons dont les flux de chaleur caractéristiques sont de l'ordre de  $40 \text{ mW.m}^{-2}$  (voir ci-après). Les diffusivités thermiques obtenues par la méthode 3 donnent une épaisseur réaliste (95km). Les valeurs de diffusivités thermiques en fonction de la profondeur montrent que l'extrapolation des données de la méthode 2 (acquise jusqu'à 1100K) est certainement exagérée à cause de la contribution radiative, car elle n'est pas en accord avec les données de spectroscopies au-delà de 1000-1200K. Dans le modèle 2, l'extrapolation à haute température va être adaptée aux données spectroscopiques. Les géothermes obtenus en utilisant des diffusivités constantes de  $1.5$  et  $1.0 \text{ mm}^2.\text{s}^{-1}$  donnent des épaisseurs de lithosphère semblables à celles obtenues par les méthodes 2 et 3, respectivement. Cependant, les diffusivités thermiques dépendantes de la température et plus faibles dans la croûte donnent des géothermes beaucoup plus chauds à faible profondeur (<60 km). A 30 km (Moho), des différences de  $200^\circ\text{C}$  peuvent être obtenues. Ceci est fondamental pour la rhéologie et la fusion du matériel crustal.

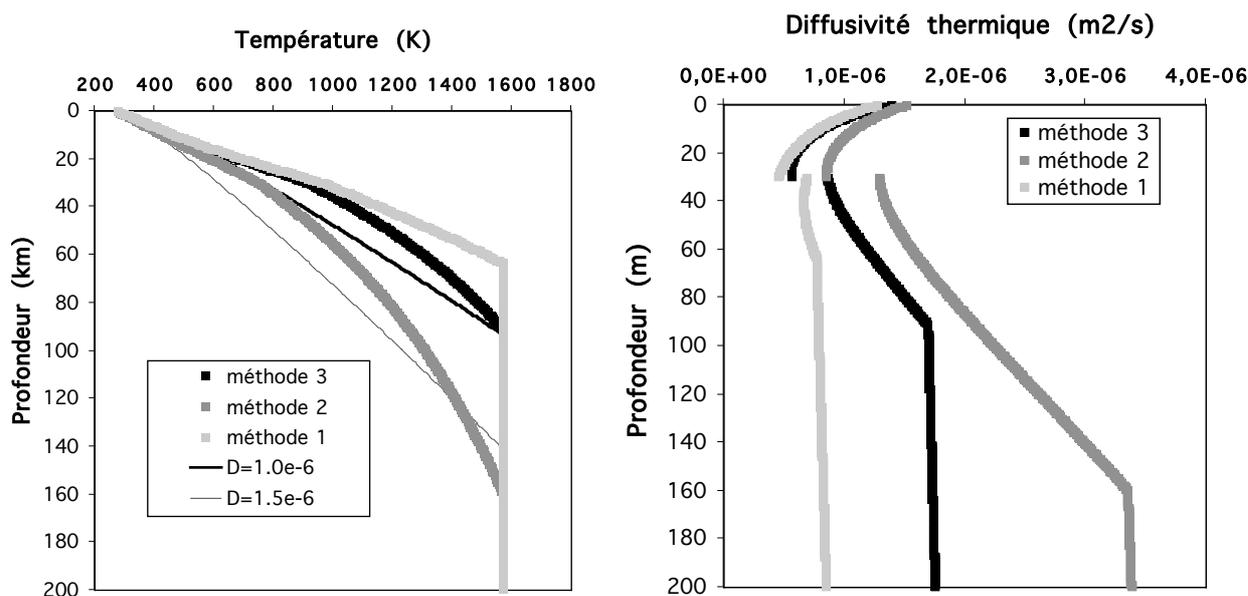


Figure 7.5 : Profils de température obtenus par le modèle 1 (voir texte) et profil de diffusivités thermiques correspondants en fonction de la profondeur.

*Modèle 2 : contribution radiative constante à haute température*

Si l'extrapolation des mesures est réalisée de telle façon que la contribution radiative est constante au delà de 800-1000°C, les épaisseurs de lithosphère calculés sont diminuées (fig. 7.6). La différence est la plus nette pour les calculs utilisant les diffusivités thermiques prédites par la méthode 2 (la base de la lithosphère est abaissée de 30 km environ), puisque c'est celle dont la température maximale est la plus faible (850°C), et celle qui montre le transfert radiatif le plus important. Une extrapolation de l'équation (7.1) n'est pas donc réaliste compte tenu des données spectroscopiques (e.g., Shankland et al. 1979).

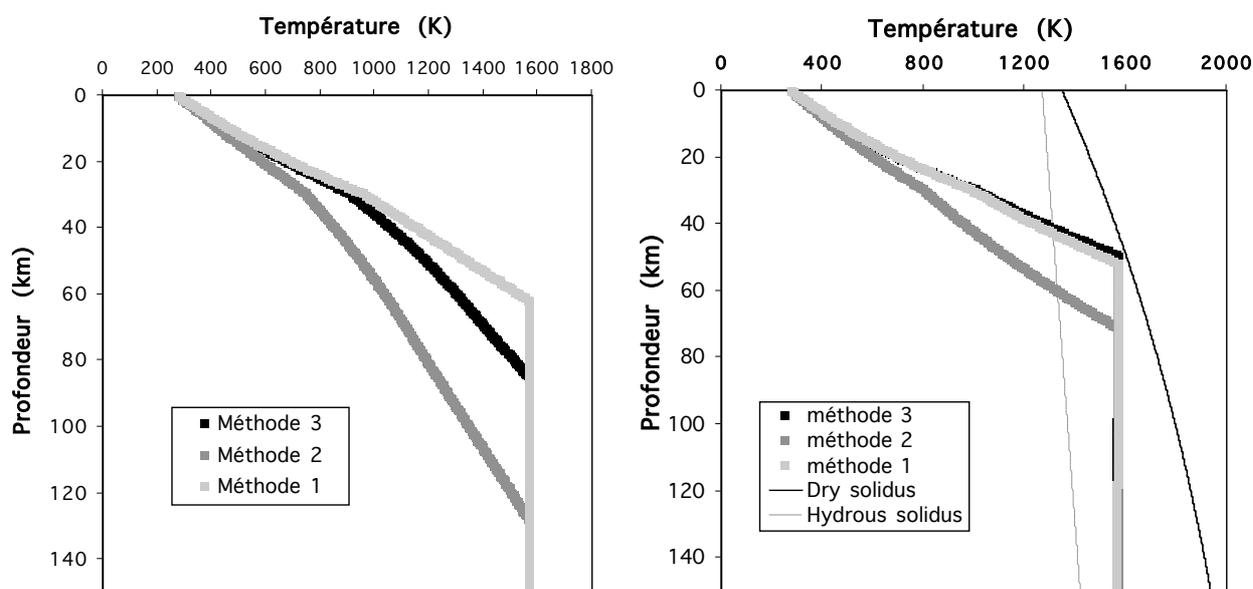


Figure 7.6 : A gauche, calcul du géotherme pour une lithosphère normale (flux de chaleur en surface de 40mW/m2) en considérant une contribution radiative constante à haute température (modèle 2). A droite, calcul du géotherme pour une lithosphère normale en excluant la contribution radiative (modèle 3).

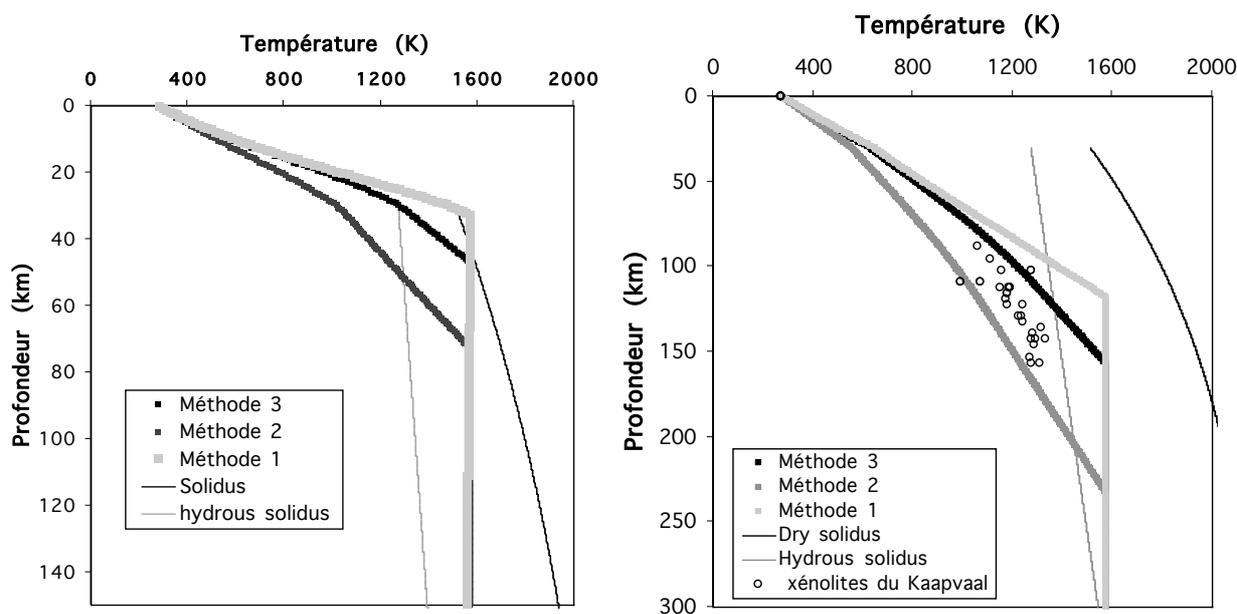
*Modèle 3 : pas de conduction de chaleur par rayonnement*

La figure 7.6 montre les géothermes obtenus si la contribution radiative est supprimée. Des épaisseurs de lithosphère très faibles sont obtenues et s'opposent à la majorité des études antérieures basées sur les mesures de flux de chaleur (e.g., Pollack et al., 1993) ou encore des études tomographiques. Pour les deux types de solidus, de tels géothermes prédisent de la fusion partielle, alors que le flux de chaleur n'est pas compatible avec l'observation de volcanisme (associés aux systèmes en extension, rifting et montrant de forts flux de chaleur en surface). Une contribution radiative est donc nécessaire pour équilibrer thermiquement une lithosphère.

Ces trois modèles comparatifs montrent en priorité que les mesures obtenues par la méthode 1 ne peuvent pas être en accord avec les observations de flux de chaleur en surface, de tomographie et d'activité tectonique. La méthode 1 donne une structure « de type rifting, pour lesquels un flux de chaleur beaucoup plus fort est attendu. Les méthodes 2 et 3 donnent des valeurs différentes, mais réalistes, à condition que l'extrapolation de la contribution radiative ne soit pas aberrante (méthode 2). Pour mieux contraindre l'extrapolation des diffusivités thermiques mesurées expérimentalement au manteau terrestre, les géothermes stationnaires pour une lithosphère amincie (un rift) et une lithosphère épaisse (un craton) ont été calculés. Les paramètres utilisés sont les mêmes que dans le modèle 2 (extrapolation modifiée de la contribution radiative). Seuls les flux de chaleur en surface sont modifiés.

Le géotherme dans un rift est calculé en utilisant un flux de chaleur en surface de  $90 \text{ mW.m}^{-2}$ , en accord avec les observations dans les régions en extension (fig. 7.7). Les mesures de la méthode 1 donnent une température de  $1300^\circ\text{C}$  au Moho, ce qui n'est pas envisageable compte tenu de la température de fusion faible des matériaux de la croûte inférieure ( $<1000^\circ\text{C}$ ). Des taux de fusion du manteau et de la croûte extrêmement élevés en résulteraient. Les deux autres modèles sont plus réalistes.

Le gradient thermique dans un domaine soumis à un rifting est toutefois difficilement analysable par cette méthode, puisque la lithosphère n'y atteint probablement pas un réel état d'équilibre, car les constantes de temps des processus mécaniques sont beaucoup plus faibles que celles des processus thermiques et puisque la présence de fusion partielle conduit à des processus de transport non-conductifs (advection). La section suivante montrera que l'action d'une anomalie thermique (convective en base de lithosphère) est très lente par rapport à la durée de l'épisode de rifting et de création de croûte océanique. Le flux de chaleur en surface ne peut être relié à la mise en équilibre purement conductive de la lithosphère.



**Figure 7.7 :** Géothermes calculés pour un rift (flux de chaleur en surface de  $90 \text{ mW.m}^{-2}$ , à gauche) et pour un craton (flux de chaleur en surface de  $40 \text{ mW.m}^{-2}$ , à droite). Les données de géothermobarométrie sont extraites de Ben Ismaïl (1999).

Le calcul du géotherme associé aux cratons est de ce point de vue plus intéressant, les cratons constituant une lithosphère ancienne, non déformée pendant plus d'un milliard d'année et sans doute équilibrée thermiquement. Pour modéliser un craton, un flux de surface de  $40 \text{ mW.m}^{-2}$  a été utilisé (e.g., Nyblade et Pollack, 1993) (voir partie suivante). Les modèles issus des méthodes 2 et 3 donnent un géotherme en accord avec les données de géothermobarométrie obtenues sous le craton du Kaapvaal, qui prévoient un isotherme  $1300^\circ\text{C}$  à 200 km environ (e.g., Ben Ismaïl, 1999; Hill, 1991) (figure 7.7). Il est aussi en accord avec les données de tomographie sismique qui suggèrent des épaisseurs de lithosphère de l'ordre de 150 km pour la majorité des cratons (e.g., Debayle et Kennett, 2000; Grand, 1987; James et al., 2001). L'intersection avec le solidus hydraté à environ 200 km permet d'envisager la présence de petits volumes de fusion partielle (et la remontée de xénolithes). Cependant, si la formation d'une lithosphère cratonique de 200 km de profondeur est explicable par une évolution purement conductive, sa stabilité dans le temps est problématique. Comment cette lithosphère d'âge archéen a-t-elle pu atteindre son équilibre thermique sans être affectée par la tectonique (orogénèse, extension) ou par la convection du manteau, contrairement à la majorité de la lithosphère continentale. Par exemple, la convection à petite échelle imposant un flux plus important à la base de la lithosphère, elle amincit celle-ci (Morency et al., 2002). Dans l'hypothèse d'un modèle de type CHABLIS, il a été par exemple montré qu'une épaisseur de lithosphère à l'équilibre d'environ 150 km était obtenue avec les mesures de la méthode 2 (tableau 7.3). Ces mêmes mesures de diffusivités thermiques donnent une épaisseur de plus de 200 km dans le cas des cratons. Ce point sera discuté par la suite (§7.3.3).

## 7.3.2 Interaction thermique panache-lithosphère

### 7.3.2.1 Initiation du rifting

L'interaction thermique entre un panache mantellique (anomalie « chaude » ou courant de convection ascendant) et une lithosphère « normale » mène à un processus thermique transitoire, souvent couplé à des processus mécaniques. Cette interaction a pour effet d'amincir la lithosphère et initie souvent la rupture continentale menant à la création de lithosphère océanique : ce sont des processus de rifting. Parmi les processus mécaniques, on peut compter le bombement de la lithosphère. En effet, le panache, constitué de matériel plus chaud, donc moins dense que le manteau environnant, induit une compression verticale, par poussée d'Archimède : les tensions mécaniques résultantes peuvent se traduire par de l'extension. Des forces appliquées aux frontières de plaques peuvent également entrer en jeu. Dans tous les cas, l'apport de matériau mantellique chaud à la base de la lithosphère induit une anomalie thermique qui se propage sous l'effet combiné de la diffusion thermique et de l'advection de matière liée aux contraintes mécaniques.

Deux théories extrêmes peuvent être envisagées : d'une part, le rifting est essentiellement lié aux contraintes (extensives) aux limites de la plaque, l'extension résultante provoquant un amincissement de la lithosphère et une remontée passive de matériel asthénosphérique vers la surface : c'est le rifting passif. D'autre un côté, l'amincissement lithosphérique est exclusivement lié à l'érosion thermique et mécanique imposée par un panache mantellique ascendant, qui affaiblit la lithosphère, mais qui impose aussi des contraintes mécaniques qui tendent à provoquer l'extension : c'est le rifting actif. Dans le premier cas, ce sont les contraintes aux limites de plaque (par exemple, la proximité d'une zone de subduction) qui guident l'extension et déterminent la direction du rifting. Dans le deuxième cas, la façon dont le rifting évolue et se propage dépend uniquement des interactions entre le panache et la lithosphère. Ces interactions étant mécaniques et thermiques, ce sont par conséquent les propriétés rhéologiques et les propriétés de transport thermique du manteau lithosphérique qui vont contrôler le rifting.

Une particularité des processus de rifting est qu'ils semblent donner lieu à des phénomènes de localisation de la déformation. Les reconstitutions de l'ouverture des bassins océaniques, en particulier pour l'Océan Atlantique, montrent que le rifting se propage selon des directions privilégiées, qui correspondent le plus souvent à une réactivation des structures pré-existantes comme des anciennes chaînes de montagnes (Tommasi et Vauchez, 2001). Cette localisation de la déformation suivant une direction donnée, dans le cas d'un rifting actif, dépend seulement de la structure et de la résistance mécanique de la lithosphère continentale. Or cette structure est largement hétérogène à l'échelle d'une plaque continentale. En particulier, l'épaisseur de la lithosphère peut présenter d'importantes variations. Des modèles numériques d'interactions panache-lithosphère ont en effet montré que les variations d'épaisseur de la lithosphère initiale peuvent guider le flux asthénosphérique lié au panache (Sleep, 1996). Une lithosphère épaisse provoque une déflexion des panaches mantelliques vers des domaines présentant une lithosphère plus fine (exemple du craton du Kaapvaal et de la province basaltique du Karoo) (Hill, 1991). La localisation du volcanisme peut ainsi être expliquée par l'interaction entre un panache et une lithosphère d'épaisseur variable (Ebinger et Sleep, 1998).

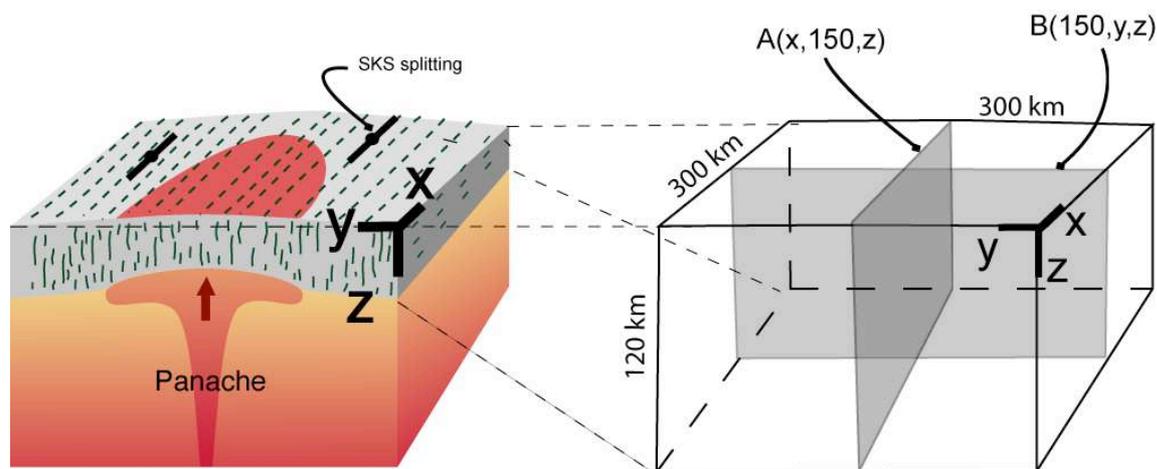
Il peut également être montré que la propagation de la rupture continentale semble se faire parallèlement aux anciennes chaînes de collisions (Hill, 1991; Vauchez et al., 1997). Dans ce cas, ce sont les propriétés rhéologiques de la lithosphère qui contrôlent le rifting. Une lithosphère épaissie par une orogénèse est mécaniquement moins résistante (Dunbar et Sawyer, 1989). Cependant, il existe des cas pour lesquels la propagation d'un rift n'est ni liée

à la présence de fortes hétérogénéités (cratons), ni à la présence de jeunes chaînes de montagne (encore épaissies et non re-équilibrées par des processus d'érosion en surface ou d'extension post-orogénique d'origine gravitationnelle). Cela semble être le cas pour l'ouverture de l'Atlantique sud il y a 130 Ma, pour lequel le rifting s'est propagé au sein de chaînes néoproterozoïques (1000Ma).

La structure pré-existante de la lithosphère est également caractérisée par la présence d'OPRs de l'olivine dans le manteau. Les données de déphasage d'ondes SKS rendent ainsi compte d'un héritage structural dû à un alignement des axes [100] de l'olivine parallèlement à la direction de la chaîne (Vauchez et Nicolas, 1991). L'olivine étant mécaniquement (e.g., Bai et al., 1991) et thermiquement anisotrope (ce travail), ces OPR conduisent à une anisotropie des propriétés mécaniques, et des propriétés de transport thermique à l'échelle de la lithosphère. Les interactions entre un panache et une lithosphère structurée auront alors un caractère anisotrope qui pourrait "guider" la déformation. L'effet d'une anisotropie des propriétés mécaniques conjugué à un héritage structural de la lithosphère a été modélisé (Tommasi et Vauchez, 2001). La surrection de la lithosphère causée par la poussée d'Archimède exercée par le matériau chaud du panache, comporte une composante déviatorique tensionnelle horizontale, a priori isotrope (Hill, 1991). La réponse à cette contrainte (i.e., l'extension) s'oriente préférentiellement à cause de l'anisotropie des propriétés mécaniques de la lithosphère (Tommasi et Vauchez, 2001). De la même façon, un transfert de chaleur anisotrope entre le plume et la lithosphère, plus efficace dans la direction d'alignement des axes [100] de l'olivine, pourrait conduire à une élévation de température plus efficace dans la direction d'alignement des axes [100] (fig. 7.8). Cela pourrait ainsi favoriser la propagation du rift le long de l'ancienne chaîne de collision. Cette dernière hypothèse, suggérée dans le chapitre 4, va être discutée à l'aide d'un modèle numérique en 3 dimensions permettant de prendre en compte l'anisotropie de la diffusion thermique.

### 7.3.2.2 Modélisation du transfert thermique conductif.

Le modèle numérique, construit par Marie-Pierre Doin, simule uniquement les transferts conductifs. L'anomalie thermique, supposée d'origine convective, est modélisée par un flux de chaleur additionnel à la base de la lithosphère, dont le principal effet est l'érosion thermique de celle-ci. Une condition aux limites du même type que le modèle CHABLIS est imposée : un flux de chaleur constant est appliqué lorsqu'une température de coupure  $T_c$ , égale à une fraction de la température de l'asthénosphère  $T_m=1300^\circ\text{C}$ , est atteinte. Ainsi, à chaque itération, le modèle recalcule l'isotherme  $T_c$  qui s'élève par conduction thermique, et la condition de flux se propage vers le haut, simulant ainsi l'érosion thermique. La profondeur de la lithosphère est calculée à chaque itération (ou pas de temps). Le modèle est construit en différences finies (voir annexe 1) et fonctionne avec des variables dimensionnées. La boîte a une longueur X et une largeur Y de 300 km, comportant chacune 100 nœuds. La profondeur Z de la boîte est de 120 km et comporte 80 nœuds (fig. 7.8). La variation spatiale de l'anomalie de chaleur suit une loi gaussienne positionnée au centre de la base de la boîte ; sa largeur à mi-hauteur est d'environ 80 km. Du fait de cette largeur, plus faible que celle de la boîte, un gradient thermique horizontal sera associé au gradient thermique vertical et permettra donc d'évaluer l'effet d'une anisotropie horizontale (X,Y).



**Figure 7.8 :** A droite, schématisation de l'interaction entre un panache et une lithosphère structurée (tirets=linéation parallèle à la direction des ondes de cisaillement les plus rapides). La direction X est celle selon laquelle la diffusivité thermique est la plus rapide. À gauche, caractéristiques du modèle et localisation des coupes verticales A et B.

Le modèle a été testé pour une seule loi de diffusivité thermique (méthode 3). Le flux normal (sans anomalie) imposé à la base de la boîte est de  $40 \text{ mW.m}^{-2}$  et aucune production de chaleur n'est prise en compte. Ces valeurs permettent d'avoir une lithosphère de départ « normale », d'une épaisseur de 120 km environ. L'anisotropie de la conductivité thermique est prise telle que la direction X correspond à la direction d'alignement des axes [100] de l'olivine. Les directions orthogonales à X sont supposées avoir une conductivité moindre et identique (milieu transverse isotrope):

$$K(x)=1.2K(T) ; K(y)=0.9K(T) \text{ et } K(z)=0.9K(T) \quad (7.3)$$

Un premier modèle a été testé en imposant une anomalie de  $50 \text{ mW.m}^{-2}$  à la base de la lithosphère. La figure 7.9 montrant l'évolution de la profondeur de la lithosphère à l'aplomb du panache en fonction du temps montre que l'érosion thermique, initialement rapide (environ 20 km d'érosion en moins de 50 Ma) n'est plus significative au delà de 50 Ma. Une coupe verticale (coupe A) met en évidence la pénétration du plume dans la lithosphère à 20, 40 et 100 Ma. Elle montre que l'anomalie de température préserve la forme gaussienne imposée initialement.

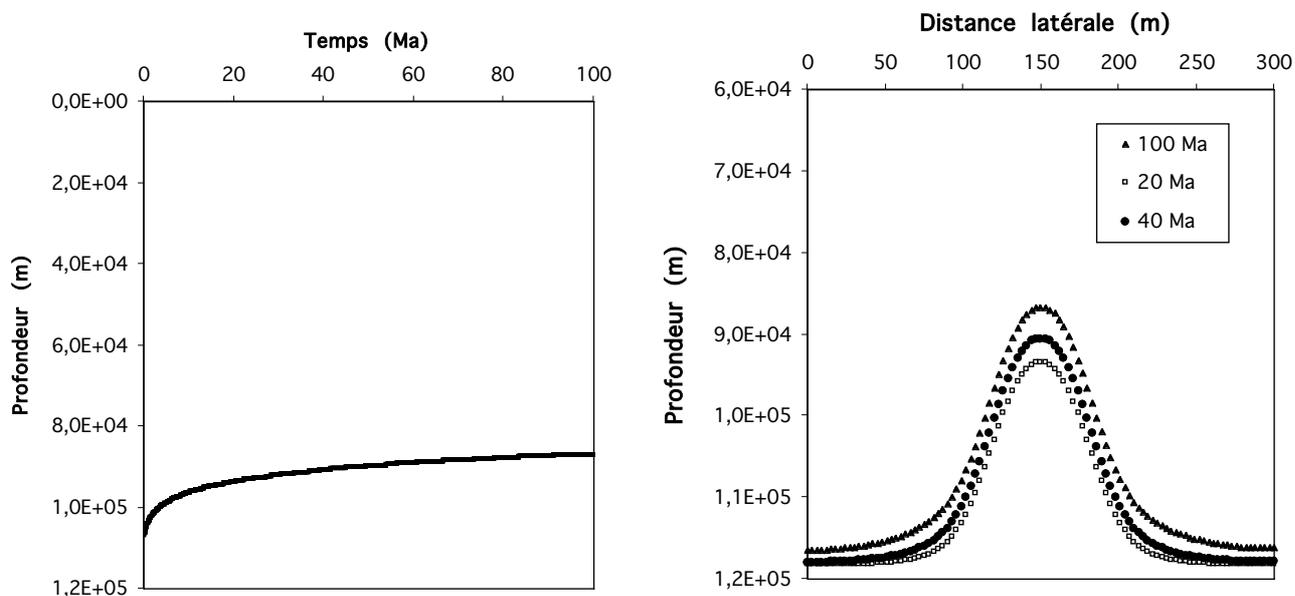


Figure 7.9 : A droite, évolution de la profondeur de la lithosphère (isotherme 1300°C) en fonction du temps à l'aplomb du panache. A gauche, profondeur de la lithosphère suivant la coupe A obtenue à 20, 40 et 100 Ma.

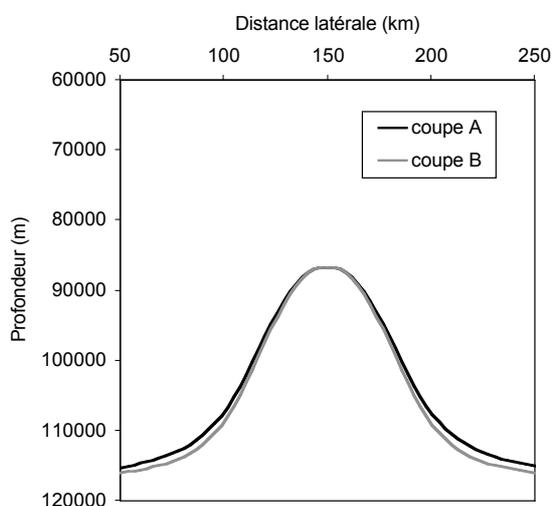


Figure 7.10: Profondeur de la lithosphère à 100Ma suivant les coupes A et B.

La figure 7.10 rend compte de la profondeur de la lithosphère le long de deux coupes verticales : la coupe A, parallèle à X avec Y=150 km et la coupe B parallèle à Y avec X=150 km. Elle montre que sur les bords de l'anomalie, l'érosion est plus importante suivant la direction X (environ 1 km de plus au maximum), et en particulier que l'élargissement horizontal de l'anomalie est plus important suivant la direction X. Cela est la preuve que le gradient thermique horizontal associé à la propagation verticale de l'anomalie, s'équilibre plus rapidement dans la direction X. Pour quantifier cette anisotropie, les champs de température obtenus suivant les deux coupes ont été soustraits (fig. 7.11). La figure 7.11 montre que la température suivant la direction X n'est que de 10 à 15°C plus élevée que celle

suivant l'axe Y. Cela est vrai à 40 Ma comme à 100 Ma. La figure 7.12 montre que les champs de température suivant une coupe horizontale à 60 km de profondeur (à 100 Ma) sont elliptiques, mais les différences de température sont très faibles suivant les directions X et Y.

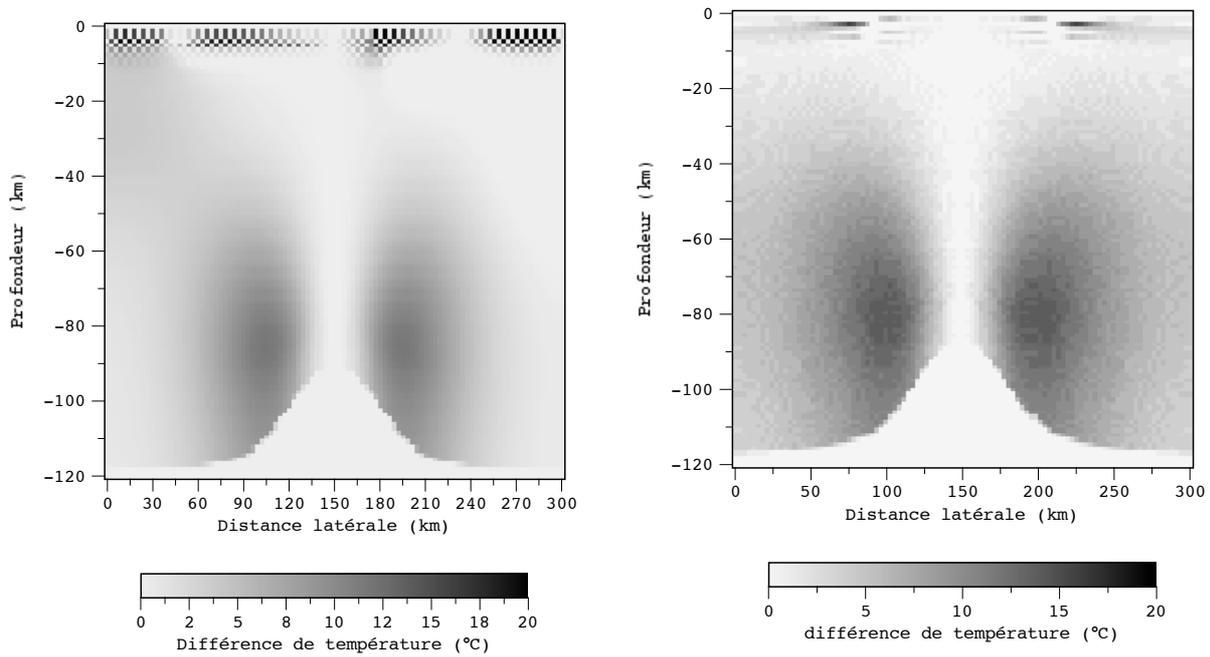


Figure 7.11 : Différence de température  $T_A - T_B$  suivant les coupes verticales A et B selon lesquelles la diffusivité thermique est maximale et minimale, respectivement. A gauche, coupe à 40 Ma et à droite, coupe à 100 Ma.

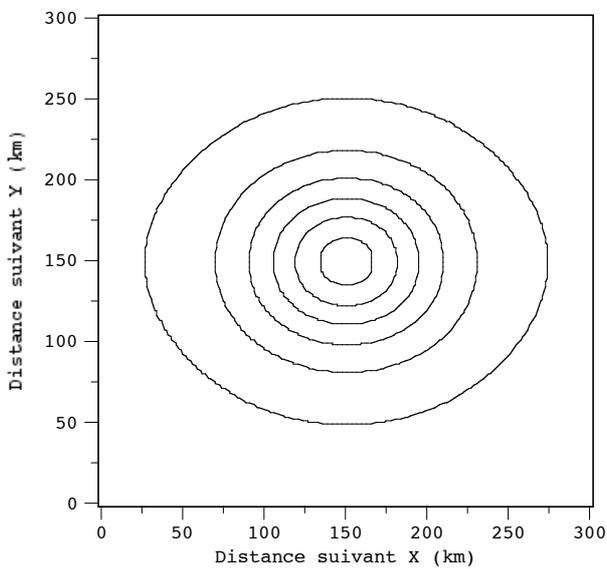


Figure 7.13 : Coupe horizontale à 60 km de profondeur représentant le champ de température à 100 Ma pour une anomalie de  $50 \text{ mW.m}^{-2}$ . Les contours sont espacés de  $100^\circ\text{C}$  et les températures minimales et maximales sont de  $800$  et  $1300^\circ\text{C}$ .

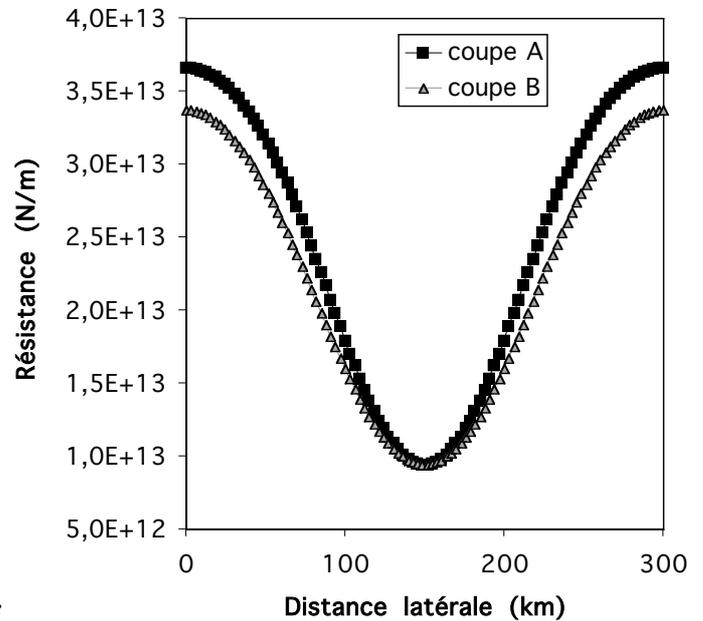


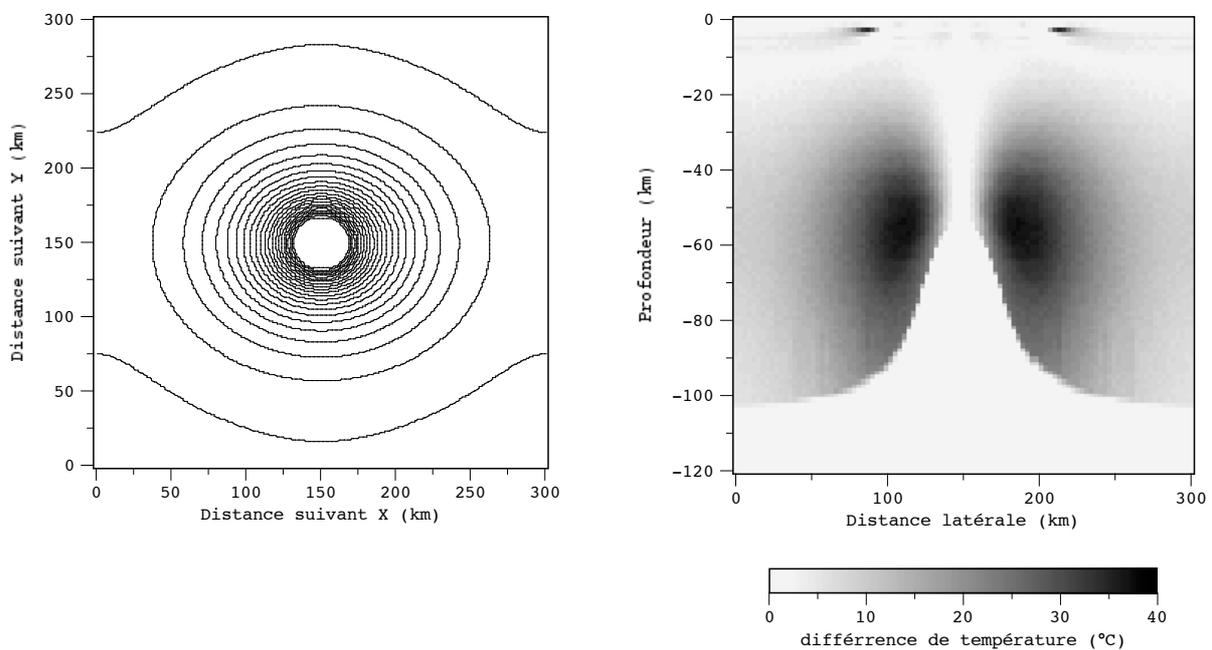
Figure 7.13 : Différence de température  $T_A - T_B$  suivant les deux coupes A et B.

Enfin, pour chaque cas, la variation spatiale de la résistance du manteau a été calculée en fonction de X et Y en intégrant la contrainte  $\sigma$  (pour un taux de déformation  $\dot{\epsilon}$  de  $10^{-15} \text{ s}^{-1}$ ) sur une épaisseur arbitraire de manteau (entre 40 km et 120km de profondeur, ne prenant pas en compte la résistance de la croûte). Une loi de puissance a été pour cela utilisée (Chopra and Paterson, 1981).

$$R_{\text{mécanique}} = \int_{40}^{120} \sigma \cdot dz \quad \text{avec} \quad \sigma = f(\dot{\epsilon}, T) \quad \text{et} \quad \dot{\epsilon} = 3.98 \times 10^{-25} \sigma^{4.5} \exp\left(\frac{-498000}{RT}\right) \quad (7.4)$$

Les contrastes de résistances suivant les axes X et Y (coupes A et B) sont décelables mais faibles (<10% au maximum), comme le suggère le contraste de température (fig. 7.12). Une anisotropie de conductivité thermique conduit donc à une faible anisotropie de la résistance mécanique du manteau. Cette anisotropie est sans doute très négligeable comparée aux hétérogénéités rhéologiques du manteau.

Afin de forcer le modèle et d'accroître les gradients horizontaux, une anomalie de  $120 \text{ mW.m}^{-2}$  a été imposée à la base de la lithosphère. Une telle anomalie peut simuler un réchauffement de la lithosphère par advection de chaleur associé au magmatisme. Une différence de  $40 \text{ }^\circ\text{C}$  peut être obtenue entre les 2 coupes A et B (fig.7.14). La section horizontale à 60 km de profondeur montre la forme elliptique du champ de température. Ces contrastes de température entre les deux directions X et Y impliquent un contraste de résistance de 20 % au maximum entre ces deux directions (fig. 7.15).



**Figure 7.14 :** Champs de température à 100 Ma pour un flux de chaleur de  $120 \text{ mW.m}^{-2}$ . A gauche, coupe horizontale à 60 km de profondeur, les contours sont de  $20^\circ\text{C}$  et les températures minimales et maximales sont de  $800$  et  $1300^\circ\text{C}$ . A droite, différence de température  $T_A - T_B$  suivant les deux coupes A et B.

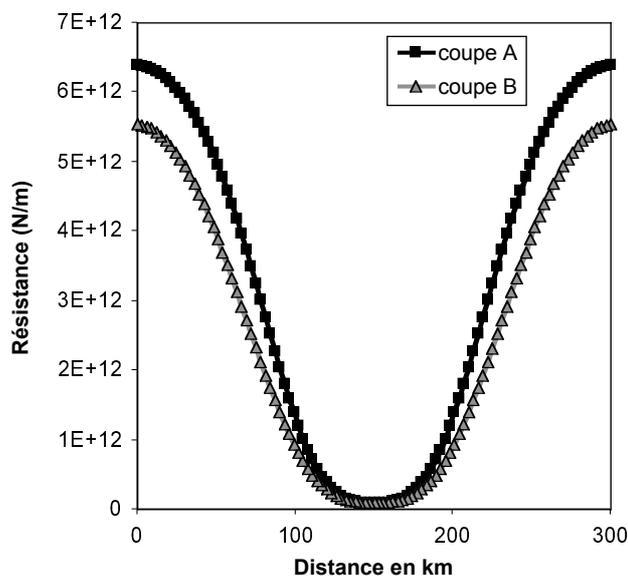


Figure 7.15 : Résistance mécanique du manteau à l'aplomb des deux coupes A et B

Un tel contraste de résistance pourrait impliquer une localisation de la déformation, dans le cas de contraintes isotropes. L'utilisation d'un modèle thermo-mécanique serait donc utile pour étudier les conséquences mécaniques d'un transfert thermique anisotrope. En effet, il a été montré qu'une anisotropie des propriétés mécaniques des roches du manteau, qui induit une anisotropie de la résistance du manteau proche de celle observée ici, pouvait induire une localisation de la déformation (Tommasi et Vauchez, 2001).

### 7.3.2.3 Conclusion

Ces exemples ont montré que l'interaction purement conductive entre une anomalie thermique et la lithosphère est un processus très lent. Des temps de 100 Ma ne sont pas compatibles avec l'évolution du rifting. Dans le cas d'une faible anomalie, les gradients thermiques verticaux prédominent et la perturbation thermique ne permet pas d'observer de forts gradients horizontaux. L'interaction ne permet pas de produire de fusion, même après 100 Ma (à 100 Ma, l'isotherme 1300°C n'est qu'à 85 km). Les épisodes de rifting nécessitent donc un mode de transport de chaleur plus efficace, associé probablement à une érosion mécanique d'origine convective, ainsi qu'à un transport advectif (magmatisme). Si ces modes de transport sont activés, ils permettent d'éroder plus rapidement la lithosphère et d'atteindre le solidus plus rapidement. Des transferts verticaux plus rapides induisent de forts gradients horizontaux autour du diapir. L'équilibration anisotrope de ces gradients pourrait alors conduire à des contrastes de résistance mécanique.

L'anisotropie des propriétés mécaniques et thermiques montrant les mêmes effets (affaiblissement de la résistance parallèlement à la direction  $X$  d'alignement des axes [100] de l'olivine), l'anisotropie thermique s'ajouterait à l'anisotropie mécanique pour guider la localisation de la déformation dans le cas d'un rifting actif (Vauchez et Tommasi, 2003). Ces deux effets pourraient contribuer à expliquer la propagation du rifting parallèlement aux anciennes chaînes de collisions.

### 7.3.3 Stabilité de la lithosphère cratonique.

#### 7.3.3.1 La lithosphère cratonique

L'évolution de la lithosphère continentale suit deux tendances générales : les données de sismologie indiquent que l'épaisseur de la lithosphère augmente avec l'âge de la croûte et les données de flux de chaleur en surface montrent une diminution du flux de chaleur en fonction de cet âge. En première approximation, ces variations sont attribuées à un refroidissement de la lithosphère, de façon conductive, indiquant ainsi des temps caractéristiques de refroidissement très élevés. Cependant, la transition entre les périodes protérozoïques et Archéennes s'accompagne d'un épaissement considérable de la lithosphère et d'un abaissement significatif du flux de chaleur en surface.

La présence de racines lithosphériques épaisses de plus de 150 km à l'aplomb des terrains archéens est mise en évidence par les études tomographiques. C'est le cas par exemple des cratons Amazonien et du São Francisco en Amérique du Sud, récemment imagés par une étude tomographique en ondes de surface sous la forme d'anomalies positives de vitesses s'étendant jusqu'à 200 km de profondeur (Heintz, 2003). Les cratons canadien, australien, ou sud-africain montrent aussi des anomalies positives de vitesses jusqu'à 200-400 km de profondeur (Debaille et Kennett, 2000; Grand, 1987; James et al., 2001). Les mesures de flux de chaleur en périphérie et au dessus de la majorité de cratons montrent aussi une diminution progressive du flux de chaleur lorsqu'on s'approche du craton pour atteindre un minimum sur le craton (Pollack et al., 1993). Des contrastes de flux de chaleur de plus de 30% sont mesurés sur entre la zone cratonique et les ceintures protérozoïques qui les entourent ( $41 \text{ mW.m}^{-2}$  sous les cratons et environ  $55 \text{ mW.m}^{-2}$  sous la ceinture protérozoïque située à plus de 400 km du craton (Nyblade et Pollack, 1993)). Par ailleurs, les cratons ont un caractère exceptionnel dans le sens où ce sont des domaines qui, en général, n'ont connu aucun épisode de déformation, depuis l'Archéen. Ceci est dû à leur résistance mécanique, principalement associé à leur gradient géothermique faible comparé aux structures lithosphériques récentes (paléozoïques). Bien que les cratons occupent une surface relativement faible sur la Terre, leur résistance mécanique a des implications importantes sur la dynamique de la lithosphère environnante. Ils constituent des hétérogénéités résistantes qui contrôlent et localisent la déformation des terrains environnants (e.g., Heintz, 2003; Tommasi, 1995; Vauchez et al., 1994).

Une lithosphère épaisse, de faibles flux de chaleur et une résistance mécanique élevée des cratons sont des faits démontrés. Cependant, la formation et surtout la stabilité de ces structures cratoniques, comparées à celles des autres structures continentales régulièrement affectées lors des cycles pangéens, demeurent mal expliquées. La stabilité des racines cratoniques est surtout remarquable par la présence de matériel « froid » en profondeur qui ne participe pas aux mouvements de convection : ce matériel est apparemment en équilibre gravitationnel. L'idée d'une stabilité s'oppose aux processus connus de délamination de lithosphères épaissies par des processus convectifs, processus souvent évoqués pour expliquer l'extension post-orogénique des chaînes de montagnes (e.g., Morency et al., 2002). Plusieurs hypothèses sont émises pour expliquer la formation et la stabilité des cratons (Jordan, 1988). Une première hypothèse consiste à considérer le craton comme la conséquence d'un simple refroidissement conductif. Les constantes de temps nécessaires (modèles de demi-espace classique) sont de l'ordre de quelques centaines de millions d'années pour atteindre 300 ou 400 km d'épaisseur. Une formation purement conductive est donc envisageable. Cependant, ce modèle conduit à des instabilités gravitationnelles en base de lithosphère : celle-ci ne peut alors éviter la déstabilisation convective. Des estimations de nombre de Rayleigh en base de lithosphère indiquent en effet qu'une lithosphère thermique ne peut excéder 200 km (Jordan, 1988).

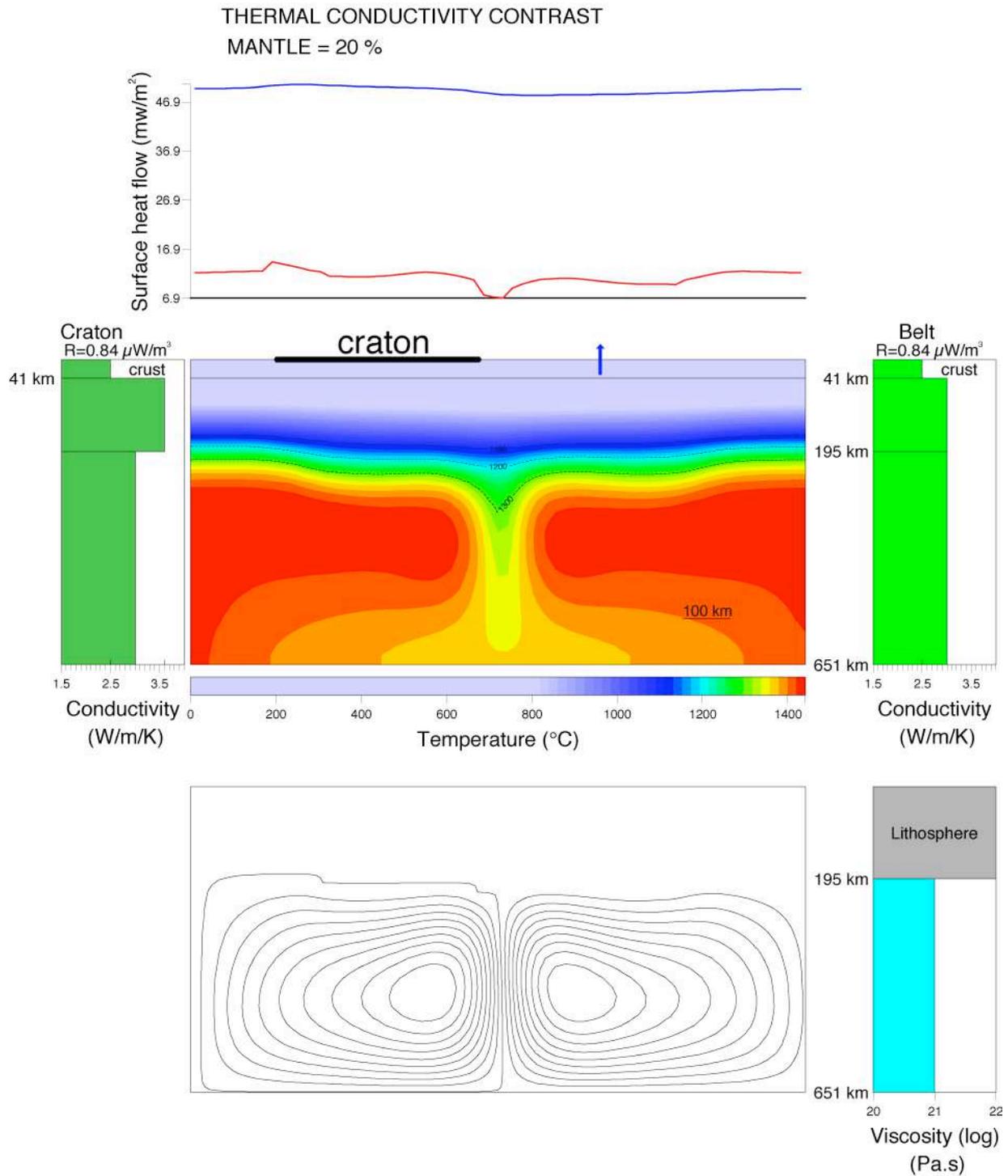
Une deuxième hypothèse consiste à considérer que la formation des cratons aux âges archéens peut être associée à des processus de différenciation pétrologique, et notamment à la formation de la croûte à l'Archéen (Pollack, 1986). Le manteau lithosphérique serait alors un résidu de manteau primitif après extraction de la croûte (Boyd, 1989). Ce résidu appauvri en fer et en volatiles serait alors moins dense et plus visqueux que le matériau environnant et aurait une température de fusion supérieure (Jordan, 1988). Des données de densités, extraites de la composition de xénolithes échantillonnées sur des différents cratons (Djomani-Poudjom et al., 2001) montrent en effet des contrastes de densités importants entre les péridotites cratoniques et celles issues d'un manteau « normal » (>1%). Ces anomalies sont en adéquation avec les données d'anomalies du géoïde (Doin et al., 1996). Des modèles de convection d'un manteau chaud (de type archéen), incluant les phénomènes de fusion partielle, montrent que le produit déplété de fusion réalisée en profondeur peut s'agglomérer à la base de la lithosphère, contribuant à son épaissement progressif (De Smet, 1999). Les racines cratoniques seraient donc composées de résidus de fusion partielle dans le manteau archéen concentrés en certains points du globe. A partir du Protérozoïque moyen à supérieur, le refroidissement général du manteau ne permettrait plus ce mécanisme. Ces modèles montrent aussi que la racine cratonique ainsi formée peut rester stable sur plus d'un milliard d'années, mais ils rendent compte aussi d'un début de déstabilisation en base de lithosphère. Par ailleurs, une hypothèse d'épaississement par addition au cours du temps de matériel lui aussi déplété à la base de la lithosphère est envisagée (Jordan, 1988). Ce matériel serait issu du recyclage de la lithosphère océanique. Enfin, cet épaissement de la lithosphère cratonique, qui constitue alors un bouclier thermique (et mécanique) conduit à une déflexion des courants de convection montants vers la lithosphère environnante plus fine et explique un faible flux de chaleur en surface (Hill, 1991). Enfin, un faible flux de chaleur en surface est aussi expliqué par une production radiogénique de chaleur plus faible dans la croûte cratonique, provoqué par une différenciation chimique, ou simplement par la décroissance naturelle de la teneur en éléments radioactifs avec le temps.

Cependant, ces modèles souffrent d'une large incertitude concernant la déstabilisation de la racine cratonique. Comment une convection vigoureuse à grande ou petite échelle, ajoutée aux mouvements incessants des plaques, peut-elle rester sans effet sur la stabilité du craton ? Un troisième processus, beaucoup moins documenté, est un processus de stabilisation contrôlé uniquement par les échanges thermiques entre le manteau convectif et la lithosphère cratonique conductive. Dans ce cas, c'est la capacité de la lithosphère à évacuer la chaleur qui permet la stabilisation du craton (Mimouni et Rabinowicz, 1988). En particulier, il est montré qu'une conductivité thermique plus élevée de 10 à 20% dans le manteau cratonique que dans le manteau environnant (non-Archéen) permet de localiser et de stabiliser sous le craton un courant froid de convection (courant descendant). Ce modèle permet donc de s'affranchir totalement des problèmes de convection à petite échelle et de déstabilisation de la racine cratonique.

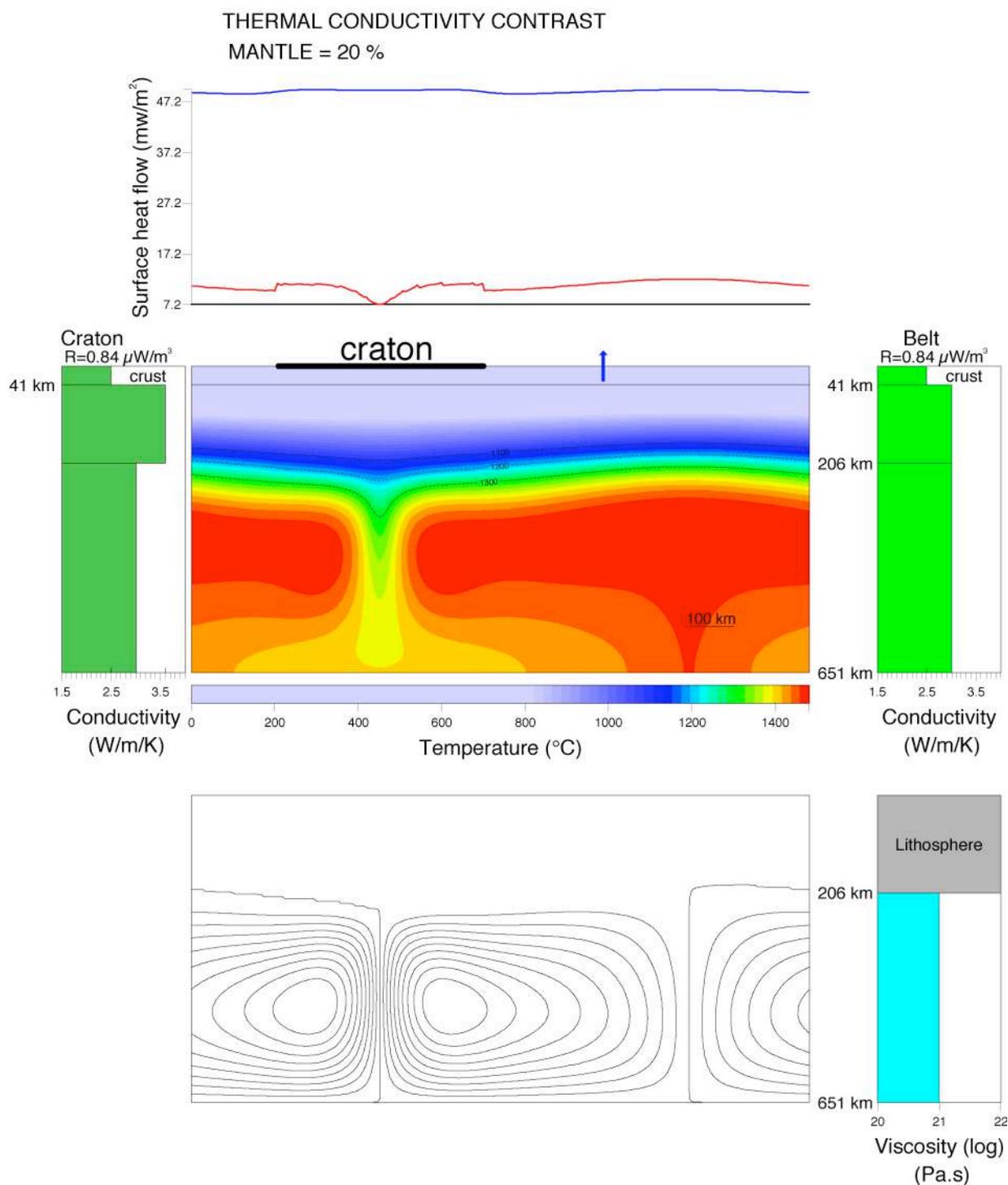
L'argument principal soutenant cette dernière hypothèse étant une anisotropie de la conductivité thermique des roches du manteau, cette hypothèse est brièvement discutée dans la suite. La discussion se fonde sur le travail de DEA et de thèse (en cours) réalisé par Sébastien Petitjean à l'Observatoire Midi Pyrénées à Toulouse (Petitjean, 2002). Un modèle de convection en 2 dimensions a été pour cela développé. Les figures suivantes ont été aimablement prêtées par Sébastien Petitjean.

### 7.3.3.2 Un modèle alternatif pour la stabilisation de la lithosphère cratonique.

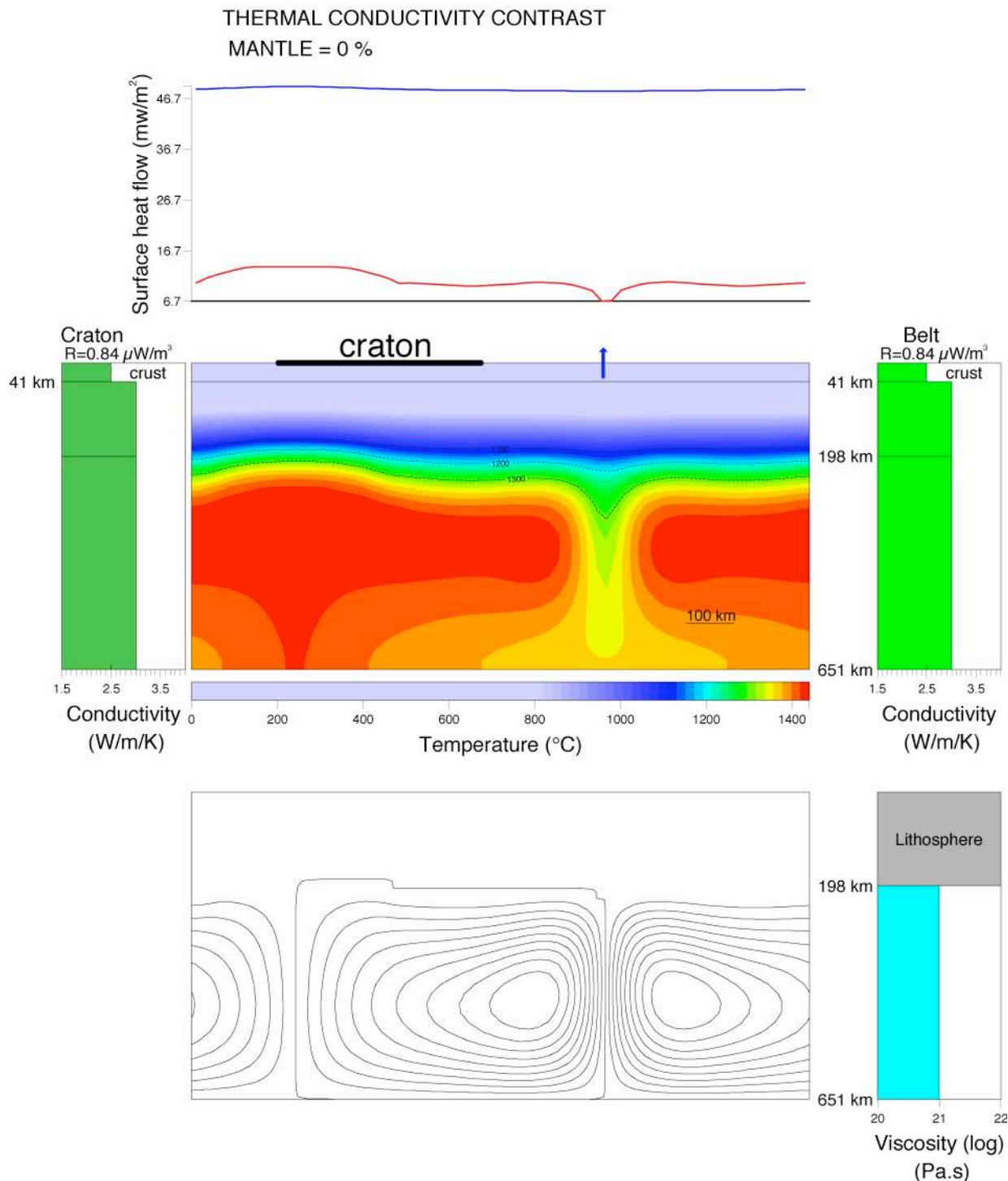
Les figures 7.16, 7.17 et 7.18 montrent comment une conductivité thermique 20 % plus importante dans le manteau cratonique que dans les domaines adjacents (protérozoïque) permet d'attirer sous le craton un courant de convection descendant, donc un flux de matière froide. La figure 7.16 montre la dérive d'une cellule de convection ayant pris naissance sous la flèche (voir figure 7.18) en direction du craton. La figure 7.17 montre l'état final (temps infini) pour lequel la cellule est localisée sous le craton. Dans ces modèles, l'état final (obtenu pour plus de 20 milliards d'années) n'est pas compatible avec l'âge de la terre, mais la vitesse de dérive est contrôlée par la vigueur de la convection, donc par le nombre de Rayleigh. Un nombre de Rayleigh de  $4 \cdot 10^5$  permet d'atteindre une dérive vers le craton en 500 millions d'années environ (Mimouni et Rabinowicz, 1988). Le fait que le courant de convection dérive très lentement vers le craton implique aussi une grande stabilité d'un courant descendant de matière sous le craton, une fois qu'il se trouve sous le craton. L'invariance du processus d'attraction en fonction du nombre de Rayleigh prouve que le phénomène ne dépend pas des échelles de temps (Mimouni et Rabinowicz, 1988). Enfin, la figure 7.18 montre l'état final lorsque aucun contraste de conductivité thermique n'est appliqué : la cellule de convection ne se déplace pas et l'état initial est le même que l'état final, montrant ainsi qu'aucun artefact (lié aux conditions aux limites de la boîte, par exemple) ne contribue à la dérive de la cellule. Ces modèles montrent que l'idée d'un panache froid plongeant sous les cratons est alternative à celle d'une racine cratonique inerte évoquée dans la majorité des études antérieures. Le double caractère stable (par sa position sous le craton) et dynamique (car il participe à la circulation convective) du panache froid plongeant évite toute présence de convection à petite échelle pouvant éroder la lithosphère, ce qui assure sa stabilité.



**Figure 7.16 :** Dérive de la cellule de convection (initialement sous la flèche bleue -voir figure 7.18) en direction du craton dans le cas d'une conductivité thermique 20% plus grande dans le manteau cratonique. La figure supérieure représente le flux de chaleur en surface (en bleu) et à la base de la lithosphère (en rouge). La figure centrale représente le champ de température, ainsi que les caractéristiques (épaisseur, conductivité thermique et production radiogénique) de la lithosphère cratonique (à gauche) et celles de la lithosphère environnante (à droite). Seul un contraste de conductivité est imposé dans le manteau cratonique. La figure du bas représente la fonction courant associée à la cellule de convection (Sébastien Petitjean, 2003, comm. pers.).



**Figure 7.17** : Etat final obtenu pour un temps très élevé, dans le cas d'un contraste de conductivité de 20% : la cellule de convection, et, plus précisément, un courant descendant, est centrée sous le craton (Sébastien Petitjean, 2003, comm. pers.).



**Figure 7.18** : Etat final associé à une cellule de convection évoluant dans un système où la conductivité thermique du craton et celle la ceinture lithosphérique environnante sont les mêmes. La cellule de convection ne se déplace pas vers le craton (Sébastien Petitjean, 2003, comm. pers.).

Ce phénomène lié à un contraste de conductivité semble extrêmement efficace. Cependant, quelles sont les observations qui permettent d'attribuer une conductivité thermique plus élevée sous le craton que dans la lithosphère environnante ? Le processus évoqué par Mimouni et Rabinowicz (1988) utilisait deux observations très peu contraintes à l'époque. D'une part une linéation verticale, donc une orientation verticale des axes [100] de l'olivine était supposée. Cette linéation serait due à un flux vertical de matière associé à un courant de convection descendant ou ascendant qui serait « gelé » depuis l'archéen (avec un cisaillement vertical lié à un gradient de vitesse du centre vers les bords du panache), âge durant lequel la convection était probablement très vigoureuse. D'autre part, l'alignement vertical des axes [100] conduirait ensuite à une composante verticale de la conductivité thermique plus élevée que dans les zones du manteau où il n'y a pas de fabrique (manteau non-cratonique environnant). Cependant, ils ne disposaient d'aucune mesure d'anisotropie de conductivité thermique sur des roches.

Les mesures de conductivité thermique réalisées dans la thèse montrent qu'une anisotropie de 25% est réaliste pour un manteau déformé et que la conductivité thermique maximale s'oriente parallèlement à la linéation (flux de matière). La dernière hypothèse est donc validée. L'hypothèse de linéation verticale reste cependant peu contrainte. Les kimberlites issues des cratons montrent effectivement des fabriques cristallographiques (Ben Ismail, 1999 ; Ben Ismail et al., 2001), ce qui montre que le manteau cratonique est probablement déformé. Mais elles ont évidemment perdu toute information concernant l'orientation spatiale de la fabrique lors de leur remontée dans le magma. Seule la mesure de l'anisotropie sismique, par exemple en analysant le déphasage des ondes de cisaillement, peut mettre en évidence une éventuelle fabrique du manteau. Les mesures de déphasages d'ondes SKS sous les cratons sont toutefois très variables. Deux cratons sont particulièrement étudiés. Le craton Nord Américain, très étudié, montre une forte anisotropie qui élimine toute hypothèse d'une linéation verticale (Kay et al., 1999). Cette anisotropie est mise en relation avec des déformations d'âge archéen (tectonique documentée par la géologie régionale) donc contemporaines de la mise en place du craton. Les études portant sur le craton du Kapvaal (Afrique du Sud) révèlent par contre un faible déphasage des ondes SKS (Silver et al., 2001), qui ne s'oppose pas à une linéation verticale. Cette hypothèse est toutefois mal contrainte.

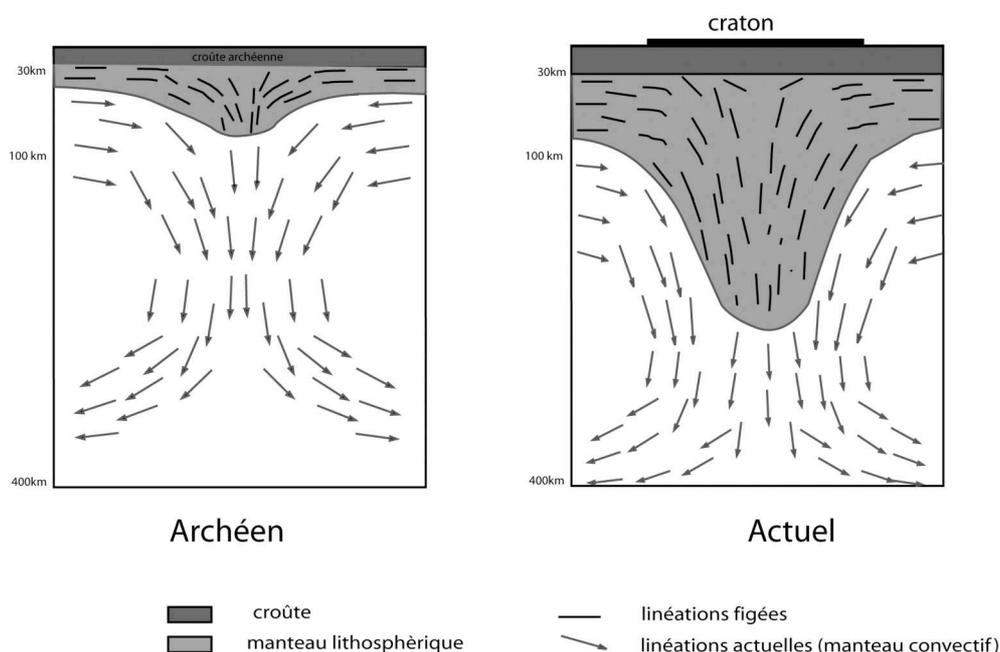
Par ailleurs, la déformation périphérique intense associée à l'hétérogénéité rigide constituée par le craton peut conduire à un fluage du manteau autour du craton (e.g., Heintz, 2003; Tommasi, 1995). Un tel fluage induit une linéation horizontale accompagnée d'une orientation horizontale et verticale des axes [100] et [010] de l'olivine, respectivement. Ce type de fluage a été récemment imagé autour du craton de Sao Fransisco au Brésil à l'aide de mesures d'anisotropie sismique (Heintz et al., 2003). Par conséquent, la conductivité thermique verticale est probablement réduite autour du craton, dans les zones protérozoïques. Ceci peut conduire à un contraste de conductivité thermique de 10-15% qui diminue la conductivité verticale dans la lithosphère environnante du craton.

La composition spécifique du manteau cratonique peut aussi jouer un rôle sur la diffusivité thermique. Un appauvrissement en fer de l'olivine dans le manteau cratonique (de composition Fo92-Fo93), suggéré par l'analyse des xénolithes (Boyd, 1989), peut contribuer à augmenter la conductivité thermique. En effet, il a été montré dans le chapitre 5 qu'un enrichissement en fer de 7% diminuait la diffusivité thermique de 15% environ, en accord avec (Horai, 1971). L'absorption du rayonnement étant fortement lié à la présence du fer, il est aussi possible que la contribution du rayonnement augmente lorsque la proportion de fer diminue. Aucune donnée expérimentale ne permet toutefois de confirmer cette possibilité. Cependant, l'analyse des xénolithes cratoniques suggère aussi un enrichissement de la lithosphère cratonique en orthopyroxène (Boyd, 1989), qui diminuerait alors la conductivité thermique. Des mesures de diffusivités thermiques sur des xénolithes représentatifs du manteau

cratonique et sur des cristaux d'olivine fortement magnésiens (Fo92-Fo93, forsterite pure par exemple) pourraient permettre de tester ces hypothèses.

### 7.3.3.3 Conclusion

Les hypothèses généralement évoquées pour expliquer la stabilité des cratons se heurtent au fait que les phénomènes de convection à petite échelle semblent être suffisamment efficaces pour entraîner la base de la lithosphère dans le manteau convectif et ainsi l'éroder significativement dans des échelles de temps de quelques centaines de millions d'années (Morency et al, 2002). L'hypothèse fondée sur les contrastes de conductivités thermiques s'affranchit de ce processus en assimilant un craton à un courant descendant de matière stable participant à la convection à grande échelle dans le manteau. La figure 7.19 illustre ce scénario.



**Figure 7.19 :** Scénario de formation et de stabilisation d'un craton fondé sur l'hypothèse de la stabilisation d'un plume froid plongeant. Le courant de convection qui se fige progressivement depuis l'Archéen avec le temps fixe les OPRs d'olivine (linéations), qui conduisent à une conductivité verticale accrue sous le craton, sachant que la conductivité est maximale parallèlement à la linéation et minimale perpendiculairement à celle-ci. Le contraste de conductivité ainsi créé permet la localisation des courants de convection plongeant sous le craton et permet ainsi de perpétuer l'accrétion de matériel froid sous le craton.

## 7.4 Conclusion

Les quelques exemples traités ont permis de discuter les divers résultats des mesures de diffusivités thermiques. Les résultats de la méthode 1 sont en désaccord avec la structure de la lithosphère attendue dans les cadres géodynamiques étudiés. Les deux autres méthodes, bien que donnant des géothermes différents, sont en accord avec les géothermes généralement attendus. Il est montré que les transferts par rayonnement sont indispensables pour modéliser des géothermes réalistes. Une meilleure connaissance de la contribution radiative à très haute

température (1300°C) apparaît donc indispensable, car les extrapolations utilisant un libre parcours moyen des photons constant conduisent à une conductivité thermique trop élevée. L'anisotropie est un paramètre qu'il faut systématiquement prendre en considération lorsque la lithosphère est structurée, car elle implique des contrastes importants de conductivités (25%).

Les situations géodynamiques évoquées font toutes intervenir des interactions entre des milieux convectifs et conductifs. Le cas des cratons montre que la conductivité de la couche limite (lithosphère) conditionne fortement la géométrie des cellules de convection. Les études récentes montrant le rôle de la conductivité thermique sur la géométrie de la convection suggèrent que les nouvelles données acquises sur l'olivine doivent être utilisées dans les modèles de convection. L'effet de ces nouvelles données n'est pas a priori pas discutable à cause des effets non-linéaires importants que représente l'introduction de dépendances en température de la conductivité thermique dans l'équation de la chaleur. Cependant, des valeurs absolues de conductivités thermiques plus élevées d'environ 50% devraient modifier significativement l'évolution des corps froids plongeant dans le manteau, notamment les slabs plongeant. Des études récentes suggèrent un réchauffement plus rapide des courants de convection plongeant au sein de milieux convectifs lorsque leur conductivité thermique interne est augmentée (Dubuffet et al., 2000; Hauk et al., 1999). Cet effet serait sans doute augmenté avec les nouvelles mesures présentées dans la thèse. Ce point est fondamental pour contraindre les hypothèses concernant l'évolution thermique des panneaux subductants et leur pénétration ou non dans le manteau inférieur. Une valeur réaliste de la conductivité thermique est par ailleurs indispensable pour évaluer la température du manteau inférieur. Des études utilisant les données de conductivité thermique de Hofmeister (1999) (faible contribution radiative) montrent que la température moyenne du manteau inférieur est augmentée d'environ 400 à 500°C par rapport à un modèle à conductivité constante (Dubuffet et al., 1999; Van Den Berg et al., 2002). En effet, une conductivité variable implique un minimum de conductivité dans la couche limite thermique (c'est-à-dire la lithosphère ou Low Conductivity Zone - voir figure 7.5), ce qui limite l'évacuation de l'énergie apportée par la convection. D'autre part, les variations de conductivité avec la pression, ainsi qu'un éventuel transfert radiatif ont pour effet d'accroître fortement la conductivité dans le manteau inférieur, limitant ainsi la vigueur de la convection. Ces deux effets concourent à une évacuation moins efficace de l'énergie résiduelle du manteau, d'où une augmentation de sa température. Le refroidissement séculaire du manteau serait en conséquence plus lent (Van Den Berg et al., 2002). À la lumière de ces études, il apparaît donc indispensable de prendre en compte les nouvelles valeurs de diffusivités thermiques obtenues dans la thèse afin de simuler aux mieux les transferts de chaleur dans les milieux convectifs.

Enfin, la convection impliquant une forte déformation des matériaux du manteau, une anisotropie de la diffusivité thermique conduirait à une augmentation de la conduction thermique parallèlement à la direction de fluage du manteau (supérieur), et une diminution de la diffusivité perpendiculairement à cette direction. Quelles pourraient être les effets d'une telle anisotropie sur l'évolution d'une cellule de convection?

## 8 Conclusions



La diffusivité thermique de l'olivine est un paramètre essentiel qui permet de quantifier les échanges thermiques au sein du manteau lithosphérique conducteur et qui contrôle la convection du manteau sub-lithosphérique. Cependant, les données antérieures de diffusivité ou de conductivité thermique concernant l'olivine, principalement acquises dans les années 1970, présentent de grandes incohérences relatives à la qualité des échantillons ou aux différentes méthodes de mesures utilisées. En particulier, le transfert d'échelle entre les propriétés du monocristal d'olivine et les propriétés des agrégats polycristallins d'olivine n'était pas documenté et semblait expliquer la grande dispersion des données disponibles. Le travail de thèse a consisté à déterminer la diffusivité thermique des matériaux du manteau par une approche originale fondée sur l'étude du transfert d'échelle entre les propriétés du monocristal d'olivine et celles des péridotites. L'utilisation de méthodes différentes a permis de discuter le rôle du type de méthode sur les valeurs absolues de diffusivités thermiques. Les principales conclusions de ce travail s'organisent en 4 points essentiels.

***L'anisotropie de diffusivité thermique.*** Ce travail a montré que le transport de chaleur par les vibrations du réseau cristallin (phonons) est très anisotrope dans les monocristaux d'olivine (50%). A l'échelle de la roche, la déformation naturelle orientant préférentiellement les cristaux d'olivine, une forte anisotropie est attendue. L'association des mesures d'OPRs de l'olivine, les données du tenseur du monocristal d'olivine et des modèles de calcul de propriétés effectives ont permis de quantifier l'anisotropie de la conduction thermique dans les péridotites (chapitre 4). Pour les péridotites étudiées, dont les fabriques cristallographiques sont typiques de celles attendues dans le manteau, une anisotropie de la diffusivité thermique comprise entre 15 et 25% est modélisée. Les données expérimentales ou de modélisation numérique de la déformation d'agrégats polycristallins d'olivine permettant de relier les fabriques cristallographiques à la déformation (aux contraintes, ou directions de fluage), l'anisotropie de diffusivité thermique a été directement reliée à la déformation du manteau. La diffusion thermique est ainsi maximale dans la direction de fluage du manteau et minimale dans la direction orthogonale de fluage. La mesure directe de la diffusivité thermique sur ces péridotites a montré que les anisotropies mesurées étaient en bon accord avec les anisotropies modélisées, validant ainsi les modèles de calculs pétrophysiques. Cette anisotropie du transport par les phonons se conserve à haute température (chapitre 4).

***Le transport de chaleur par les phonons.*** Outre l'anisotropie, la comparaison des mesures et des modèles pétrophysiques a montré que les valeurs absolues de diffusivité thermique modélisées et mesurées étaient en très bon accord à température ambiante (chapitre 5). Le transport de chaleur par les phonons n'est pas affecté lors du transfert d'échelle, signifiant que les joints de grain, les imperfections et impuretés présentes à l'échelle de la roche ne contrarient pas les transferts de chaleur. Des mesures à hautes pressions (1 GPa) ont également montré que la fracturation n'a pas d'effet sur le transport thermique par les phonons. Bien que suggéré par les études théoriques, cet accord n'était jusqu'à présent pas documenté par des mesures directes ; des différences entre roches et monocristaux de plus de 30% étaient couramment observées dans la littérature.

***La contribution du rayonnement à la diffusion thermique*** a été mise en évidence et quantifiée dans les monocristaux d'olivine, à haute température (chapitre 6). En particulier, il a été montré que seule une diffusivité thermique apparente était mesurée pour les petits monocristaux d'olivine (centimétriques), illustrant ainsi la difficulté de respecter l'approximation de diffusion lors de la mesure du transfert radiatif. La variation de la diffusivité thermique avec la taille du cristal a toutefois permis de quantifier la contribution radiative, qui s'avère représenter une composante dominante du transfert de chaleur dans l'olivine, et ce même à l'échelle de l'agrégat. Les mesures effectuées confirment les données

de spectroscopies I.R. (Shankland et al., 1979) et réfutent les arguments récents proposés par l'analyse des interactions entre phonons et photons (Hofmeister, 1999). Enfin, ce transfert radiatif, dans le cas où il est considéré comme isotrope, diminue significativement l'anisotropie de la diffusivité thermique.

*L'utilisation de méthodes de mesures* dont les principes différent largement a permis de mettre en évidence la difficulté d'interpréter la propagation d'un signal thermique dans un échantillon au cours d'une expérience. Cette difficulté est probablement à l'origine des écarts importants observés dans les études antérieures, mais également au sein même du travail de thèse. D'une part, les mesures de température à l'aide de thermocouples apparaissent délicates et la qualité du contact thermocouple-échantillon est essentielle. D'autre part, les conditions d'équilibre radiatif semblent être primordiales aussi bien pour la mesure de la contribution des phonons que pour la contribution radiative. Ces erreurs systématiques semblent être commises lorsque cet équilibre est largement modifié dans l'échantillon, ou lorsque l'analyse des signaux aux thermocouples n'est pas appropriée. L'étude expérimentale suggère que la minimisation de ce déséquilibre, ou la prise en compte des effets qu'il peut engendrer est indispensable. Les deux méthodes utilisées satisfaisant l'une de ses deux conditions (méthode 2 et 3) ont en effet montré des résultats très proches, aussi bien pour leur calibration sur du quartz que pour les mesures sur l'olivine. En particulier, elles ont montré une forte contribution radiative et des valeurs absolues de diffusivités thermiques relativement proches.

Les diffusivités thermiques obtenues par ces deux méthodes sont plus élevées d'au moins 50% que celles proposées par les études antérieures. Cette différence est le fait :

- de valeur absolues plus élevée à température ambiante
- de l'absence de différence observée entre les monocristaux et les roches
- d'une contribution radiative plus importante à haute température

La calibration attentive de ces deux méthodes permet d'affirmer que ces nouvelles valeurs donnent une meilleure idée de la diffusivité thermique effective dans les conditions du manteau. Bien que ces méthodes aient permis de mieux quantifier les processus de transport de chaleur dans l'olivine, elle demeurent toutefois insuffisantes pour une extrapolation dans les conditions du manteau. Plusieurs carences apparaissent :

-Les températures maximales atteintes dans les expériences sont insuffisantes. Le transfert radiatif n'a été quantifié que jusqu'à 850°C et a été observé jusqu'à 1000°C. Réaliser des mesures à plus haute température nécessite une forte diminution du bruit électronique enregistré aux thermocouples, ce qui semble difficile à obtenir. De plus, les problèmes de microfracturation des roches à haute température, dont les effets apparents sont mal contraints, doivent être résolus. Cela nécessiterait un travail sous haute pression de confinement (200 MPa). Mais cela réduirait alors la taille des échantillons et limiterait la mesure du transfert radiatif. Le développement de la méthode Angström en géométrie cylindrique dans la presse Paterson représenterait un bon compromis entre pression de confinement (200-300 MPa), température maximale (1200-1300°C) et taille d'échantillon (7.5mm). Une configuration linéaire est aussi possible, permettant des mesures sur des échantillons plus longs. Les premiers résultats suggèrent que de telles expériences sont réalisables.

-l'anisotropie n'est pas contrainte à très haute pression (plusieurs GPa). Une compressibilité anisotrope (plus élevée dans la direction [010] pourrait diminuer cette anisotropie. Une éventuelle anisotropie du transfert radiatif n'est pas non plus contrainte et

apparaît primordiale pour vérifier si l'anisotropie de la diffusivité thermique se conserve ou non à haute température.

-les dérivées croisées en pression-température ne sont que peu contraintes. Seules les données de Katsura (1995) sont disponibles. Le problème majeur des expériences à très haute pression est que l'utilisation de petits échantillons ne permet pas d'étudier le transfert radiatif.

- les autres phases minérales du manteau supérieur n'ont pas été étudiées. Les orthopyroxènes, qui constituent la deuxième phase la plus abondante dans le manteau lithosphérique, semblent montrer une contribution radiative plus faible que l'olivine. Leurs propriétés pourraient donc avoir une conséquence non négligeable sur le transfert radiatif dans le manteau.

Ces insuffisances sont principalement les conséquences de difficultés expérimentales. Plusieurs alternatives existent. Elles consistent à évaluer indépendamment les contributions des phonons et du rayonnement. Les extrapolations aux hautes températures conduisent en effet à des hypothèses fortes sur ces deux contributions (discussion du chapitre 6). Pour le transfert par les phonons, les expériences conduites sur de très petits échantillons pourraient éviter la présence de transfert radiatif (Harrell, 2002; Xu, 2001). Les modèles de Dynamique Moléculaire pourraient aussi apporter de nouvelles contraintes. Déterminer une borne inférieure de la diffusivité thermique à haute température semblerait primordial. Le transfert par les photons pourrait être évalué à haute pression/haute température par spectroscopies I.R., dont les quelques valeurs disponibles ont été contraintes par les mesures directes conduites dans la thèse. Cette démarche est par exemple conduite sur les minéraux de la zone de transition (Ross, 1997). Elle est reprise actuellement au GeoForschungsZentrum par le développement de spectromètre I.R. à haute température (Schilling et al., 2002). Les mesures directes de diffusivités thermiques telles qu'elles ont été conduites dans la thèse apparaissent largement limitées pour une étude dans les conditions du manteau. Elles sont inutilisables pour l'étude des propriétés de transport thermique sous conditions extrêmes (manteau inférieur et zones de transition). Cependant, elles apportent des contraintes importantes sur les processus de transferts d'échelle (cristal-roche) et peuvent permettre d'ajuster de nouvelles techniques expérimentales (spectroscopies I.R., méthode PTGS par exemple) ou des modèles numériques.

Des valeurs réalistes de la contribution des phonons, du rayonnement et de l'anisotropie ont des effets importants sur les géothermes (chapitre 7). Bien qu'extrapolées de façon incertaine, les valeurs obtenues dans la thèse suggèrent des modifications non négligeables de la température du manteau lithosphérique, pouvant contrarier les phénomènes de convection à petite échelle. Les valeurs de diffusivité thermique montrent qu'une évolution purement conductive de la lithosphère permet de générer des lithosphères très épaisses (cratons). L'intervention de l'anisotropie de la diffusivité thermique contribue à mieux expliquer la stabilisation des cratons et la propagation des rifts. Enfin, une diffusion thermique de l'olivine plus élevée pourrait avoir des conséquences sur l'évolution des panneaux lithosphériques plongeant dans le manteau (zones de subduction), mais également sur la vigueur de la convection dans le manteau supérieur.



Références  
Bibliographiques



- Abramson, E.H., Brown, M., Slutsky, L.J. et Zaug, J., 1997. The elastic constants of San Carlos olivine up to 17 GPa. *Journal of Geophysical Research*, 102: 12,252-12,263.
- Abramson, E.H., Brown, J.M. et Slutsky, L.J., 2001. The thermal diffusivity of water at high pressures and temperatures. *Journal of chemical physics*, 115(22): 10461-10463.
- Achauer, U. and the KRISP working group., 1994. New ideas on the Kenya rift based on the inversion of the combined dataset of the 1985 and 1989/90 seismic tomography experiment. *Tectonophysics*, 236: 305-329.
- Aronson, J.R. et al., 1970. Infrared spectra and radiative thermal conductivity of minerals at high temperatures. *Journal of Geophysical Research*, 75(17): 3443-3456.
- Bai, Q., Mackwell, S.J. et Kohlstedt, D.L., 1991. High-temperature creep of olivine single crystals. 1. Mechanical results for buffered samples. *Journal of Geophysical Research*, 96(B2): 2441-2463.
- Barruol, G., 1993. *Pétrophysique de la croûte inférieure. Rôle de l'anisotropie sismique sur la réflectivité et le déphasage des ondes S*. Thèse d'Université, Université Montpellier II, Montpellier, 277 pp.
- Beck, A.E., Darbha, D.M. et Schloessin, H.H., 1978. Lattice conductivities of single-crystal and polycrystalline materials at mantle pressures and temperatures. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 17: 35-53.
- Ben Ismail, W. et Mainprice, D., 1998. An olivine fabric database: an overview of upper mantle fabrics and seismic anisotropy. *Tectonophysics*, 296: 145-158.
- Ben Ismail, W., 1999. *La lithosphère cratonique: Pétrophysique des xénolithes mantelliques d'Afrique du Sud*. Ph.D. Thesis, Université de Montpellier II, Montpellier, 196 pp.
- Ben Ismail, W., Barruol, G. et Mainprice, D., 2001. The Kaapvaal craton seismic anisotropy: petrophysical analyses of upper mantle kimberlite nodules. *Geophysical Journal International*, 28(13): 2497-3000.
- Ben Ismail, W., Azaïs, P. et Mainprice, D., 2003. Développement of an EBSD with image tilt correction. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*, soumis.
- Benigni, P. et Rogez, J., 1997. High temperature thermal diffusivity measurement by the periodic cylindrical method: the problem of contact thermocouple thermometry. *Reviews of Scientific Instrumentation*, 68(7): 2767-2773.
- Bouhifd, M.A., Andrault, D., Fiquet, G. et Richet, P., 1996. Thermal expansion of forsterite up to the melting point. *Geophysical Research Letters*, 23(10): 134-1136.
- Boyd, F.R., 1989. Compositionnal distinction between oceanic and cratonic lithosphere. *Earth and Planetary Science Letters*, 96: 15-26.
- Branlund, J.M., Kameyama, M.C., Yuen, D.A. et Kaneda, Y., 2000. Effects of temperature-dependent thermal diffusivity on shear instability in a viscoelastic zone: implications for

- faster ductile faulting and earthquakes in the spinel stability field. *Earth and Planetary Science Letters*, 182: 171-185.
- Brewster, M.Q., 1992. *Thermal radiative transfer and properties*. John Wiley and Sons, New York.
- Brown, J.M., 1986. Interpretation of the D" zone at the base of the mantle: dependence on assumed values of thermal conductivity. *Geophysical Research Letters*, 13(13): 1509-1512.
- Brüesch, P., 1982. *Phonons: theory and experiments I. Lattice dynamics and models of interatomic forces*. Solid-State Sciences, 34. Springer-Verlag, Berlin, 261 pp.
- Brüesch, P., 1986. *Phonons: theory and experiments III. Phenomena Related to Phonons*. Solid-State Sciences, 66. Springer-Verlag, Berlin.
- Buck, W.R., 1985. When does small-scale convection begin beneath oceanic lithosphere? *Nature*, 313: 775-777.
- Bunge, H.J., 1985. Representation of preferred orientations. In: H.R. Wenk (Editor), *Preferred orientation in deformed metals and rocks: an introduction to modern texture analysis*. Academic Press, New York, pp. 78-108.
- Burns, R.G., 1970. *Mineralogical application of crystal field theory*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Bystricky, M., Kunze, K., Burlini, L. et Burg, J.P., 2000. High shear strain of olivine aggregates: rheological and seismic consequences. *Science*, 290: 1564-1567.
- Cahill, D.G., Watson, S.K. et Pohl, R.O., 1992. Lower limit to the thermal conductivity of disordered crystals. *Physical Review B*, 46(10): 6131-6140.
- Carslaw, H.S. et Jaeger, J.C., 1959. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, London, 510 pp.
- Chai, M., Brown, J.M. et Slutsky, L.J., 1996. Thermal diffusivity of mantle minerals. *Physics and Chemistry of Minerals*, 23: 470-475.
- Chastel, Y.B., Dawson, P.R., Wenk, H.-R. and Bennet, K., 1993. Anisotropic convection with implications for the upper mantle. *Journal of Geophysical Research*, 98(B10): 17757-17771.
- Chopra, P.N. et Paterson, M.S., 1981. The experimental deformation of dunite. *Tectonophysics*, 78: 453-473.
- Chui, G.K. et Gardon, R., 1969. Interaction of radiation and conduction in glass. *Journal of The American Ceramic Society*, 52(10): 548-553.
- Clark, S.P., 1957. Absorption spectra of some silicates in the visible and near infrared. *American Mineralogist*, 42: 732-742.

- Clauser, C. et Huenges, E., 1995. Thermal conductivity of rocks and minerals. In: J. Ahrens (Editor), *Rocks physics and phase Relations: a handbook of physical constant*. AGU, Washington, pp. 105-126.
- Darot, M. et Gueguen, Y., 1981. High-temperature creep of forsterite single crystals. *Journal of Geophysical Research*, 86: 6219-6234.
- De Smet, J.H., 1999. The evolution of continental roots in numerical thermo-chemical mantle convection models including differentiation by partial melting. *Lithos*, 48: 153-170.
- Debayle, E. et Kennett, B.L.N., 2000. The Australian continental upper mantle: Structure and deformation inferred from surface waves. *Journal of Geophysical Research*, 105: 25,423-25,450.
- Djomani-Poudjom, Y.H., O'Reilly, S.Y., Griffin, W.L. et Morgan, P., 2001. The density structure of subcontinental lithosphere through time. *Earth and Planetary Science Letters*, 184: 605-621.
- Doin, M.P. et Fleitout, L., 1996. Thermal evolution of the oceanic lithosphere: An alternative view. *Earth and Planetary Science Letters*, 142(1-2): 121-136.
- Doin, M.P., Fleitout, L. et McKenzie, D., 1996. Geoid anomalies and the structure of continental and oceanic lithosphere. *Journal of Geophysical Research*, 101(B7): 16119-16135.
- Dubuffet, F., Yuen, D.A. et Rabinovicz, M., 1999. Effects of a realistic mantle thermal conductivity on the patterns of 3D convection. *Earth and Planetary Science Letters*, 171: 401-409.
- Dubuffet, F., Yuen, D.A. et Yanagawa, T., 2000. Feedback effects of variable conductivity on the cold downwellings in high Rayleigh number convection. *Geophysical Research Letters*, 27(18): 2981-2984.
- Duffy, T.S. and Vaughan, M.T., 1988. Elasticity of enstatite and its relationships to crystal structure. *Journal of Geophysical Research*, 93(B1): 383-391
- Dumoulin, C., Doin, M.-P. et Fleitout, L., 2001. Numerical simulations of the cooling of an oceanic lithosphere above a convective mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 125: 45-64.
- Dunbar, J.A. et Sawyer, D.S., 1989. How preexisting weaknesses control the style of continental breakup. *Journal of Geophysical Research*, 94(B6): 7278-7292.
- Durham, W.B., Mirkovich, V.V. et Heard, H.C., 1987. Thermal diffusivity of igneous rocks at elevated pressure and temperature. *Journal of Geophysical Research*, 92(B11): 11,615-11,634.
- Ebinger, C. et Sleep, N., 1998. Cenozoic magmatism throughout east Africa resulting from impact of one large mantle plume. *Nature*, 395: 788-791.

- Fowler, C.M.R., 1990. The solid Earth. An introduction to global geophysics. Cambridge University Press, Cambridge, 472 pp.
- Fujisawa, H., Fujii, N., Mizutani, H., Kanamori, H. et Akimoto, S., 1968. Thermal diffusivity of Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> and NaCl at high pressures and temperatures. *Journal of Geophysical Research*, 73: 4727-4733.
- Fukao, Y., Mizutani, H. et Uyeda, S., 1968. Optical absorption spectra at high temperatures and radiative thermal conductivity of olivines. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 1: 57-62.
- Gauffriau, A., 2000. Caractérisation des orientations préférentielles des cristaux dans les mylonites à grains très fins (Mesures au MEB par la méthode EBSD). Diplôme d'Etudes Approfondies, Université Montpellier II, Montpellier, 40 pp.
- Gibert, B., Seipold, U., Tommasi, A. et D., Mainprice, 2003a. Thermal diffusivity of upper mantle rocks: influence of temperature, pressure and the deformation fabric. *Journal of Geophysical Research*, 108(B8): doi:10.1029/2002JB002108.
- Gibert, B., F. R. Schilling, A. Tommasi et D. Mainprice. Thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates at ambient conditions – a comparison, *Geophys. Res. Lett.*, 30 (22), 2172, doi: 10.1029/2003GL018459, 2003.
- Gillet, P., Richet, P., Guyot, F. et Fiquet, G., 1991. High-temperature thermodynamic properties of forsterite. *Journal of Geophysical Research*, 96(B7): 11,805-11,816.
- Gillet, P., 1995. Mineral physics, mantle mineralogy and mantle dynamics. *Compte Rendus de l'Académie des Sciences*, 320: 341-356.
- Grand, S.P., 1987. Tomographic inversion for shear velocity beneath the north American plate. *Journal of Geophysical Research*, 92: 14065-14090.
- Grimvall, G., 1986. Thermophysical properties of materials. Selected topics in solid state physics, 18. Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 348 pp.
- Harrell, M., Brown, J.M. et Abramson, E.H., 2002. Anisotropic lattice thermal conductivity of upper mantle minerals at high temperature, AGU fall meeting, San Francisco.
- Hauk, S.A., Phillips, R.J. et Hofmeister, A.M., 1999. Variable conductivity: effects on the thermal structure of subducting slabs. *Geophysical Research Letters*, 26(21): 3257-3260.
- Hazen, R.M., 1976. Effects of temperature and pressure on the crystal structure of forsterite. *American Mineralogist*, 61: 1280-1293.
- Hearn, E.H., Humphreys, E.D., Chai, M. et Brown, J.M., 1997. Effect of anisotropy on oceanic upper mantle temperatures, structure and dynamics. *Journal of Geophysical Research*, 102(B6): 11943-11956.

- Heintz, M., 2003. Structure et déformation du manteau continental sud américain: apport de la tomographie en ondes de surface et de l'anisotropie sismique, Université Montpellier II, Montpellier, 234 pp.
- Heintz, M., Vauchez, A., Assumpção, M., Barruol, G. et Egydio-Silva, M., 2003. Shear wave splitting in SE Brazil: an effect of active or fossil upper mantle flow, or both? *Earth and Planetary Science Letters*, 211: 79-95.
- Hill, R.I., 1991. Starting plumes and continental break-up. *Earth and Planetary Science Letters*, 104: 398-416.
- Höfer, M. et Schilling, F.R., 2002. Heat-transfer in quartz, orthoclase and sanidine at elevated temperature. *Physics and chemistry of minerals*, 29: 571-584.
- Höfer, M., 2003. Wärmetransport in Quarz und Feldspäten von 22 bis 800°C. PhD dissertation, Freien Universität, Berlin.
- Hofmeister, A.M., 1995. Infrared microspectroscopy in Earth Science. In: H.J. Humecki (Editor), *Practical guide to infrared microspectroscopy*. Marcel Dekker, Inc., New York, pp. 377-416.
- Hofmeister, A.M., 1999. Mantle values of thermal conductivity and the geotherm from phonon lifetimes. *Science*, 283: 1699-1706.
- Hofmeister, A.M., 2000. Why the radiative component of thermal conductivity should be tiny compared to the lattice?, AGU fall meeting, San Francisco.
- Hofmeister, A.M., 2001. The radiative contribution to the thermal conductivity of spinels and olivines from vibrational and optical spectroscopy., 7th Workshop "numerical modeling of mantle convection and lithospheric dynamics", Aussois.
- Hofmeister, A.M., 2001. Thermal conductivity of spinels and olivines from vibrational spectroscopy: Ambient conditions. *American Mineralogist*, 86: 1188-1208.
- Holt, J.B., 1975. Thermal diffusivity of olivine. *Earth and Planetary Science Letters*, 27: 404-408.
- Horai, K. et Simmons, G., 1969. Thermal conductivity of rock-forming minerals. *Earth and Planetary Science Letters*, 6: 339-368.
- Horai, K., 1971. Thermal conductivity of rock-forming minerals. *Journal of Geophysical Research*, 76(5): 1278-1308.
- Horai, K., 1981. A remark on the theory of measuring thermal diffusivity by the modified Angström's method. *Journal of Geophysical Research*, 86(B8): 7163-7169.
- Horai, K. et Susaki, J., 1989. The effect of pressure on the thermal conductivity of silicate rocks up to 12 kbar. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 55: 292-305.
- Huenges, E., Burkhardt, H. et Erbas, K., 1990. Thermal conductivity profile of the KTB pilot corehole. *Scientific Drilling*, 1: 224-230.

- Isaak, D.G., 1992. High-temperature elasticity of iron-bearing olivines. *Journal of Geophysical Research*, 97(B2): 1871-1885.
- Jackson, H.E. et Walker, C.T., 1971. Thermal conductivity, second sound, and phonon-phonon interactions in NaF. *Physical review B*, 3(4): 1428-1439.
- James, D.E., Fouch, M.J., VanDecar, J.C., Van der Lee, S. et Group, T.K.G., 2001. Tectospheric structure beneath southern Africa. *Geophysical Research Letters*, 28(13): 2489-2492.
- Jordan, T.H., 1988. Structure and formation of the continental tectosphere. *Journal of petrology*(special lithosphere issue): 11-37.
- Julian, C.L., 1965. Theory of heat conduction in Rare-gas crystals. *Physical Review*, 137(1A): 128-137.
- Jund, P. et Jullien, R., 1999. Molecular-dynamics calculation of the thermal conductivity of vitreous silica. *Physical Review B*, 59(21): 13707-13711.
- Kanamori, H., Fujii, N. et Mizutani, H., 1968. Thermal diffusivity measurement of rock-forming minerals from 300°K to 1100°K. *Journal of Geophysical Research*, 73(2): 595-605.
- Kanamori, H., Mizutani, H. et Fujii, N., 1969. Method of thermal diffusivity measurement. *Journal of Physics of the Earth*, 17(1): 43-53.
- Karato, S. et Wu, P., 1993. Rheology of the upper mantle: A synthesis. *Science*, 260: 771-778.
- Kasahara, J., Suzuki, I., Kumazawa, M., Kobayashi, Y. and Iida, K., 1968. Anisotropism of P wave in dunite. *Zisin (J. Seism. Soc. Japan)*, 21: 222-228.
- Katsura, T., 1993. Thermal diffusivity of silica glass at pressures up to 9 GPa. *Physics and Chemistry of Minerals*, 20: 201-208.
- Katsura, T., 1995. Thermal diffusivity of olivine under upper mantle conditions. *Geophysical Journal International*, 122: 63-69.
- Katsura, T., 1997. Thermal diffusivity of periclase at high temperatures and high pressures. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 101: 73-77.
- Kay, I. et al., 1999. Shear wave splitting observations in the archaic craton of western superior. *Geophysical Research Letters*, 26(17): 2669-2672.
- Khedari, J., Benigni, P., Rogez, J. et Mathieu, J.C., 1995. New apparatus for thermal diffusivity measurements of refractory solid materials by the periodic stationary method. *Reviews of Scientific Instrumentation*, 66: 193-198.

- Kieffer, S.W., Getting, I.C. and Kennedy, G.C., 1976. Experimental determination of the pressure dependence of the thermal diffusivity of Teflon, sodium chloride, quartz and silica. *Journal of Geophysical Research*, 81: 3018-3024.
- Kieffer, S.W., 1979. Thermodynamics and lattice vibrations of minerals: 1. Minerals heat capacities and their relationships to simple lattice vibrational models. *Reviews of geophysics and space physics*, 17(1): 1-18.
- Kieffer, S.W., 1982. Thermodynamics and lattice vibrations of minerals 5: Applications to phase equilibria, isotopic fractionation, and high-pressure thermodynamic properties. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 20(4): 827-849.
- Kingery, W.D., 1962. The thermal conductivity of ceramic dielectric. In: B. J.E. (Editor), *Progress in ceramic sciences*. Pergamon, New York, pp. 182-235.
- Klemens, P.G., 1958. Thermal conductivity and lattice vibrational modes. *Solid State Physics*, 7: 1-98.
- Klemens, P.G. et Greenberg, I.N., 1973. Radiative heat transfer through composite materials. *Journal of Applied Physics*, 44(7): 2992-1995.
- Kobayashi, Y., 1974. Anisotropy of thermal diffusivity in olivine, pyroxene, and dunite. *Journal of Physics of the Earth*, 22: 359-373.
- Kukkonen, Jokinen et Seipold, 1999. Temperature and pressure dependencies of thermal transport properties of rocks: implications for uncertainties in thermal lithosphere models and new laboratory measurements of high-grade rocks in the central fennoscandian shield. *Surveys in Geophysics*, 20: 33-59.
- Larive, E., 2002. Etude expérimentale des roches à très faible perméabilité par la mise en oeuvre d'un perméamètre de précision. Thèse d'Université, Montpellier, 188 pp.
- Mainprice, D. et Humbert, M., 1994. Methods of calculating petrophysical properties from lattice preferred orientation data. *Surveys in Geophysics*, 15 (Special issue 'Seismic properties of crustal and mantle rocks: laboratory measurements and theoretical calculations'): 575-592.
- Mainprice, D., Barruol, G. et Ben Ismaïl, W., 2000. The seismic anisotropy of the Earth's mantle: From single crystal to polycrystal. In: S.-I. Karato, A.M. Forte, R.C. Liebermann, G. Masters et L. Stixrude (Editors), *Earth's Deep Interior: Mineral Physics and Seismic Tomography: From Atomic to Global Scale*. AGU, pp. 237-264.
- McGaughey, A.J.H. et Kaviany, M., 2002. Molecular dynamics calculations of the thermal conductivity of silica based crystals, 8th AIAA/ASME Joint thermophysics and heat transfer conference, St Louis.
- McKenzie, D. et Bickle, M.J., 1988. The volume and composition of melt generated by extension of the lithosphere. *Journal of Petrology*, 29(3): 625-679.
- Mareschal, M. et al., 1995. Archean cratonic roots, mantle shear zones and deep electrical anisotropy. *Nature*, 375: 134-137.

- Mimouni, A. et Rabinowicz, M., 1988. The old continental shields stability related to mantle convection. *Geophysical Research Letters*, 15(1): 68-71.
- Mirkovich, V.V., 1977. Thermal diffusivity measurement of Armco iron by a novel method. *Rev.Sci. Instrum.*, 48(5): 560-565.
- Montardi, Y., 1987. Etude du frittage et de la déformation plastique expérimentale de plagioclases. Thèse d'Université, Université Montpellier II, Montpellier, 249 pp.
- Morency, C., Doin, M.P. et Dumoulin, C., 2002. Convective destabilization of a thickened continental lithosphere. *Earth and Planetary Science Letters*, 202: 303-320.
- Nicolas, A. et Poirier, J.P., 1976. Crystalline plasticity and solid state flow in metamorphic rocks. Wiley, London, 444 pp.
- Nicolas, A. and Christensen, N.I., 1987. Formation of anisotropy in upper mantle peridotites - A review. In: K. Fuchs and C. Froidevaux (Editors), *Composition, structure and dynamics of the lithosphere-asthenosphere system*. Am. Geophys. Un., Washington, D.C., pp. 111-123.
- Nitsan, U. et Shankland, T.J., 1976. Optical properties and electronic structure of mantle silicates. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 45: 59-87.
- Nitsan, U., 1974. Stability field of olivine with respect to oxidation and reduction. *Journal of Geophysical Research*, 79(5): 706-711
- Nyblade, A.A. et Pollack, H.N., 1993. A global Analysis of heat flow from precambrian terrains: Implications for the thermal structure of archaean and proterozoic lithosphere. *Journal of Geophysical Research*, 98(B7): 12207-12218.
- Nye, J.F., 1972. *Physical properties of crystals. Their representation by tensors and matrices*. Oxford University Press, Oxford, 329 pp.
- O'Reilly, S.Y. et Griffin, W.L., 1996. 4-D lithosphere mapping: methodology and examples. *Tectonophysics*, 262: 3-18.
- Osako, M. et Ito, E., 1991. Thermal diffusivity of MgSiO<sub>3</sub> perovskite. *Geophysical Research Letters*, 18(2): 239-242.
- Osako, M. et Ito, E., 1997. Simultaneous thermal diffusivity and thermal conductivity measurements of mantle materials up to 10 GPa. 67, Institute for Study of the Earth's Interior, Tottori.
- Parker, W.J., Jenkins, R.J., Butler, C.P. et Abbott, G.L., 1961. Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 32: 1679-1684.
- Parsons, B. et Sclater, J.G., 1977. An analysis of the variation of ocean floor bathymetry and heat flow with age. *Journal of Geophysical Research*, 82: 803-827.

- Petitjean, S., 2002. Etude de la structure thermique des cratons. Diplôme d'études Approfondies, Université Paul Sabatier, Toulouse.
- Pérez, J.P., 1997. Thermodynamique: Fondements et applications, Paris, 543 pp.
- Pitt, G.D. et Tozer, D.C., 1970. Radiative heat transfer in dense media and its magnitude in olivines and some other ferromagnesian minerals under typical upper mantle conditions. *Physics of the earth and planetary interiors*, 2: 189-199.
- Poirier, J.P., 1991. Les profondeurs de la Terre. Masson, Paris, 136 pp.
- Pollack, H.N., 1986. Cratonization et thermal evolution of the mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 80: 175-182.
- Pollack, H.N., Hurter, S.J. et Johnson, J.R., 1993. Heat flow from the Earth's interior: Analysis of the global dataset. *Reviews of Geophysics*, 31(3): 267-280.
- Popov, Y.A., Pribnow, D.F.C., Sass, J.H., Williams, C.F. et Burkhardt, H., 1999. Characterization of rock thermal conductivity by high-resolution optical scanning. *Geothermics*, 28: 253-276.
- Pribnow, D. et Umsonst, T., 1993. Estimation of thermal conductivity from mineral composition: influence of fabric and anisotropy. *Geophysical Research Letter*, 20(20): 2199-2202.
- Pribnow, D.F.C. et Sass, J.H., 1995. Determination of thermal conductivity for deep boreholes. *Journal of Geophysical Research*, 100(B6): 9981-9994.
- Pros, Z., Lokajicek, T., Prikryl, R. and JKlima, K., 2003. Direct measurement of 3D elastic anisotropy on rocks from the Ivrea zone (Southern Alps, NW Italy). *Tectonophysics*, 370(31-47).
- Randle, V. et Engler, O., 2000. Introduction to texture analysis: microtexture, microtexture and orientation mapping. Gordon and Breach, Amsterdam, 388 pp.
- Rao, K.R. et al., 1988. Lattice dynamics and inelastic neutron scattering from forsterite, Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>: phonon dispersion relation, density of states and specific heat. *Physics and Chemistry of Minerals*, 16: 83-97.
- Ringwood, A.E., 1975. Composition and petrology of the Earth's mantle. McGraw-Hill, New York, 618 pp.
- Ross, N.L., 1997. Optical absorption spectra of transition zone minerals and implications for radiative heat transport. *Physics and Chemistry of the Earth*, 22(1-2): 113-118.
- Roufosse, M. et Klemens, P.G., 1973. Thermal conductivity of complex dielectric crystals. *Physical Review B*, 7(12): 5379-5386.
- Roufosse, M.C. et Klemens, P.G., 1974. Lattice thermal conductivity of minerals at high temperatures. *Journal of Geophysical Research*, 79(5): 703-705.

- Sass, J.H., Lachenbruch, A.H. et Munroe, R.J., 1971. Thermal conductivity of rocks from measurements on fragments and its application to heat-flow determinations. *Journal of Geophysical Research*, 76(14): 3391-3401.
- Schärmeli, G.H., 1982. Anisotropy of olivine thermal conductivity at 2.5 GPa and up to 1500K measured on optically non-thick samples. In: W. Schreyer (Editor), *High-pressure researches in geosciences*. E. Schweizerbart'sche Verlagbuchhandlung, Stuttgart, pp. 349-373.
- Schatz, J.F. et Simmons, G., 1972. Method of simultaneous measurement of radiative and lattice thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, 43(6): 2586-2594.
- Schilling, F.R., 1999. A transient technique to measure thermal diffusivity at elevated temperature. *European Journal of Mineralogy*, 11: 1115-1124.
- Schilling, F.R., Gibert, B., Höfer, M. et Spiekerman, G., 2002. Is there radiative heat transfer in the mantle?, *High Pressure Mineral Physics Workshop*, Verbania, Italy.
- Schloessin, H.H. et Dvorak, Z., 1972. Anisotropic lattice thermal conductivity in enstatite as a function of pressure and temperature. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 27: 499-516.
- Schmidt, N.H. et Olesen, N.O., 1989. Computer-aided determination of crystal-lattice orientation from electron-channeling patterns in the SEM. *Can. Mineralogist*, 27: 15-22.
- Schock, R.N., Duba, A. et Shankland, T.J., 1989. Electrical conduction in olivine. *Journal of Geophysical Research*, 94: 5829-5839.
- Schubert, G., Froidevaux, C. et Yuen, D., 1976. Oceanic lithosphere and asthenosphere: Thermal and mechanical structure. *Journal of Geophysical Research*, 81(20): 3525-3540.
- Seipold, U. et Gutzeit, W., 1980. Measurements of the thermal properties of rocks under extreme conditions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 22(3/4): 272-276.
- Seipold, U., 1982. The distribution of the thermal diffusivity in the crust. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 29: 69-72.
- Seipold, U., 1988. Simultaneous measurements of thermal diffusivity and thermal conductivity under high pressure using thermal pulse of finite length. *High Temperatures - High Pressures*, 20: 609-613.
- Seipold, U., 1990. Pressure and temperature dependence of thermal transport properties for granites. *High Temperatures - High Pressure*, 22: 541-548.
- Seipold, U., 1992. Depth dependence of thermal transport properties for typical crustal rocks. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 69: 299-303.
- Seipold, U., 1992. Depth dependence of thermal transport properties for typical crustal rocks. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 69: 299-303.

- Seipold, U., 1995. The variation of the thermal transport properties in the Earth's crust. *Journal of Geodynamics*, 20: 145-154.
- Seipold, U., 1996. Measurement of thermal conductivity and thermal diffusivity of serpentinites at high pressures up to 500 MPa. *High Temperatures - High Pressures*, 28: 147-155.
- Seipold, U., 1998. Temperature dependence of thermal transport properties of crystalline rocks - general law. *Tectonophysics*, 291: 161-171.
- Seipold, U. et Huenges, E., 1998. Thermal properties of gneisses and amphibolites - high-pressure and high-temperature investigations of KTB-rocks samples. *Tectonophysics*, 291: 173-178.
- Seipold, U., Mueller, H.J. et Tuisku, P., 1998. Principle differences in the pressure dependence of thermal and elastic properties of crystalline rocks. *Physics and Chemistry of the Earth*, 23(3): 357-360.
- Seipold, U., 2001. Der Wärmetransport in kristallinen Gesteinen unter den Bedingungen der kontinentalen Kruste, GeoForschungsZentrum Potsdam, Potsdam.
- Seront, B., 1993. Déformation expérimentale à haute pression et température d'agrégats polycristallins de plagioclase et olivine. Ph.D. Thesis, Université de Montpellier II.
- Shankland, T.J., 1970. Pressure shift of infrared absorption bands in minerals and the effect on radiative heat transport. *Journal of Geophysical Research*, 75: 409-413.
- Shankland, T.J., Nitsan, U. and Duba, A.G., 1979. Optical absorption and radiative heat transport in olivine at high temperature. *Journal of Geophysical Research*, 84: 1603-1610.
- Siegesmund, S., 1994. Modelling the thermal conductivity observed in paragneisses of the KTB pilot hole. *Scientific Drilling*, 4: 207-213.
- Silver, P.G., 1996. Seismic anisotropy beneath the continents: Probing the depths of geology. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences*, 24: 385-432.
- Silver, P.G., Gao, S.S., Liu, K.H. et Group, K.S., 2001. Mantle deformation beneath southern Africa. *Geophysical Research Letters*, 28(13): 2493-2496.
- Simpson, F., 2001. Resistance to mantle flow inferred from the electromagnetic strike of the Australian upper mantle. *Nature*, 412(6847): 632-635.
- Simpson, F., 2002. Intensity and direction of lattice-preferred orientation of olivine: are electrical and seismic anisotropies of the Australian mantle reconcilable? *Earth and Planetary Science Letters*, 203: 535-547.
- Slack, G.A., 1979. The thermal conductivity of Nonmetallic crystals. *Solid State Physics*, 34: 1-71.

- Sleep, N.H., 1996. Lateral flow of hot plume material ponded at sublithospheric depths. *Journal of Geophysical Research*, 101: 28,065-28,083.
- Staudacher, W., 1973. Die Temperatur-Leitfähigkeit von natürlichem Olivin bei hohen drucken und temperaturen. *Zeitschrift für Geophysik*, 39: 979-988.
- Stein, C.A. et Stein, S., 1992. A model for the global variation in oceanic depth and heat flow with lithospheric age. *Nature*, 359: 123-129.
- Taylor, R., 1983. Thermal diffusivity of composites. *High Temperatures - High pressures*, 15: 299-309.
- Thacher, P.D., 1967. Effect of boundaries and isotopes on the thermal conductivity of LiF. *Physical Review*, 156: 975-988.
- Tommasi, A., 1995. Développement de systèmes de décrochements d'échelle continentale dans une lithosphère hétérogène: Cas naturels et modélisation numérique. Ph. D. Thesis, Université de Montpellier II, 183 pp.
- Tommasi, A., Vauchez, A. et Russo, R., 1996. Seismic anisotropy in ocean basins: resistive drag of sublithospheric mantle? *Geophysical Research Letters*, 23: 2991-2994.
- Tommasi, A., 1998. Forward modeling of the development of seismic anisotropy in the upper mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 160: 1-13.
- Tommasi, A., Tikoff, B. and Vauchez, A., 1999. Upper mantle tectonics: Three-dimensional deformation, olivine crystallographic fabrics and seismic properties. *Earth and Planetary Science Letters*, 168: 173-186
- Tommasi, A. et Vauchez, A., 2001. Continental rifting parallel to ancient collisional belts: An effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 185: 199-210.
- Tommasi, A. et Vauchez, A., 2001. Continental rifting parallel to ancient collisional belts: An effect of the mechanical anisotropy of the lithospheric mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, 185: 199-210.
- Tommasi, A., Gibert, B., Seipold, U. et Mainprice, D., 2001. Anisotropy of thermal diffusivity in the upper mantle. *Nature*, 411: 783-786.
- Van Den Berg, A.P., Yuen, D.A. et Allwardt, J.R., 2002. Non-linear effects from variable thermal conductivity and mantle internal heating: implications for massive melting and secular cooling of the mantle. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 129: 359-375.
- Vauchez, A. et Nicolas, A., 1991. Mountain building: Strike-parallel displacements and mantle anisotropy. *Tectonophysics*, 185: 183-201.
- Vauchez, A., Tommasi, A. et Egydio-Silva, M., 1994. Self-indentation of continental lithosphere. *Geology*, 22: 967-970.

- Vaucher, A., Barruol, G. et Tommasi, A., 1997. Why do continents break up parallel to ancient orogenic belts? *Terra Nova*, 9: 62-66.
- Vaucher, A. et Tommasi, A., 2003. Wrench faults down to the asthenosphere: geological and geophysical evidence and thermo-mechanical effects. In: T.g.S.o. London (Editor), *Intraplate Strike-Slip Deformation Belts*, pp. 15-34.
- Walsh, J.B., 1965. The effect of cracks on the compressibility of rocks. *Journal of Geophysical Research*, 70: 381-388.
- Xu, Y., Shankland, T.J., Rubie, D.C. et Langenhorst, F., 2001. Thermal diffusivity measurements of olivine, wadsleyite and ringwoodite to 20 GPa, EUG XI, Strasbourg.
- Zaug, J., Abramson, E.H., Brown, J.M. et Slutsky, L.J., 1992. Elastic constants, equation of state and thermal diffusivity at high pressure. In: Y. Syono and M.H. Manghani (Editors), *High-pressure research: Applications to Earth and planetary sciences*. Terra Scientific Publishing Co., Tokyo, pp. 157-166.
- Zhang, S. et Karato, S., 1995. Lattice preferred orientation of olivine aggregates in simple shear. *Nature*, 375: 774-777.
- Ziman, J.M., 1962. *Electrons and phonons*, Oxford University Press, London.



# Annexe 1 : Méthode des différences finies



Les modélisations numériques utilisées pour simuler les transferts de chaleur dans les dispositifs expérimentaux (chapitre 3) ou bien dans des situations géodynamiques (chapitre 5) sont toutes fondées sur la méthode des différences finies. L'équation de la chaleur à résoudre est (les paramètres sont définis dans le chapitre 2):

$$\rho.C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot (-K \cdot \vec{\nabla} T) + \sigma \quad (\text{A1.1})$$

Elle peut se simplifier lorsque la conductivité ne dépend pas des variables d'espace (ou de la température et de la pression) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \Delta T + \frac{\sigma}{\rho.C_p} \quad (\text{A1.2})$$

La méthode des différences finies repose sur le mode de calcul des dérivées spatiales et temporelles apparaissant dans les équations différentielles aux dérivées partielles. Soit un champ scalaire  $T$  (température pour cette étude), ses dérivées premières et secondes sont approchées par des différences finies dans la direction correspondante, centrées en un point  $x_i, y_i, z_i$ . Dans le cas d'un modèle uni-dimensionnel et discrétisé avec un pas d'espace égal à  $dx$  on peut écrire les dérivées partielles pour le  $i$ -ème élément de température  $T_i$ :

$$\frac{\partial T_i}{\partial x} = \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2dx} \quad (\text{Exprime les flux de chaleur : conditions aux limites par exemple})$$

$$\frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{dx^2} \quad (\text{Exprime le Laplacien de l'équation de la chaleur})$$

L'introduction d'une conductivité variable en température et pression (donc dépendante des variables d'espaces) ne permet pas de calculer simplement le Laplacien. On écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_i \frac{\partial T_i}{\partial x} \right) = \frac{K_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial T_{i+\frac{1}{2}}}{\partial x} - K_{i-\frac{1}{2}} \frac{\partial T_{i-\frac{1}{2}}}{\partial x}}{2dx} = \frac{K_{i+\frac{1}{2}}(T_{i+1} - T_i) - K_{i-\frac{1}{2}}(T_i - T_{i-1})}{dx^2} \quad \text{avec } K_i = K(T_i, P)$$

L'extension à 2 ou 3 dimensions nécessite de calculer les dérivées de la même façon suivant les variables  $y_i, z_i$ . Le principe est également le même dans le cas de coordonnées cylindriques. L'introduction de l'anisotropie nécessite d'utiliser une conductivité fonction de  $x, y$  et  $z$ . Dans le modèle 3D utilisé pour modéliser l'interaction entre un panache avec la lithosphère (modèle construit par Marie-Pierre Doin), les différences finies en un nœud sont calculées entre ce nœuds et les nœuds les plus proches, soit 26 nœuds. Ceci permet de calculer plus précisément la température en introduisant des directions supplémentaires différentes des axes  $x, y, z$ .

Le terme temporel définit généralement le schéma de calcul. Dans le schéma explicite, le champ de température au pas de temps  $n+1$  est calculé uniquement à partir du champ de température au temps  $n$  :  $T_{n+1} = f(T_n)$ . Ainsi, lorsque le temps est discrétisé avec pas de temps  $dt$ , on a par exemple dans le cas d'un schéma explicite d'Euler au premier ordre :

$$T_{n+1} = T_n + dt \cdot \frac{\partial T_n}{\partial t} \quad \text{le terme } \frac{\partial T}{\partial t} \text{ étant calculé par l'équation de la chaleur au pas de temps } n.$$

Les conditions de convergence du schéma explicite nécessite un pas de temps suffisamment court, ou un pas d'espace élevé. Dans le cas de la résolution de l'équation (A1.2) sans terme de production, on peut par exemple écrire :

$$T_{i,n+1} = T_{i,n} + \frac{D \cdot dt}{dx^2} (T_{i+1,n} - 2T_{i,n} + T_{i-1,n})$$

La condition de convergence s'écrit :

$$\frac{D \cdot dt}{dx^2} < \frac{1}{2}$$

Cette condition impose souvent un pas de temps très faible, un nombre de pas de temps élevé et un temps de calcul élevé. Par contre ce schéma ne nécessite pas de résolution de matrice.

Dans le schéma implicite, une résolution de matrice est nécessaire car  $T_{n+1} = f(T_n, T_{n+1})$ . Dans le cas d'un schéma d'Euler implicite, on a :

$$T_{n+1} = T_n + dt \cdot \frac{\partial T_{n+1}}{\partial t}$$

Par contre les conditions de convergence sont moins restrictives que le schéma explicite.

Pour ces deux schémas, des méthodes permettant une précision à des ordres supérieurs sont utilisables, on a par exemple :  $T_{n+1} = f(T_n, T_{n-1}, T_{n-2})$  (schémas de Adams-Bashforth au 2<sup>ème</sup> ordre ou de Adams-Moulton au 3<sup>ème</sup> ordre). Les méthodes prédiction-correction permettent d'améliorer la précision des calculs. Une d'entre elles a été utilisée dans le modèle 3D. Le principe est de prédire le champ de température au pas de temps  $n+1$  avec un schéma explicite (prédiction au 3<sup>ème</sup> ordre ici) et de le recalculer avec un schéma implicite d'ordre supérieur (correction au 4<sup>ème</sup> (Milne)).

Les modèles 1D ont tous été calculés au premier ordre (Euler explicite). Ces modèles comportant peu d'éléments, les pas d'espace et de temps ont pu être aisément ajustables. Le modèle CHABLIS 2D fonctionne en schéma implicite (Euler).

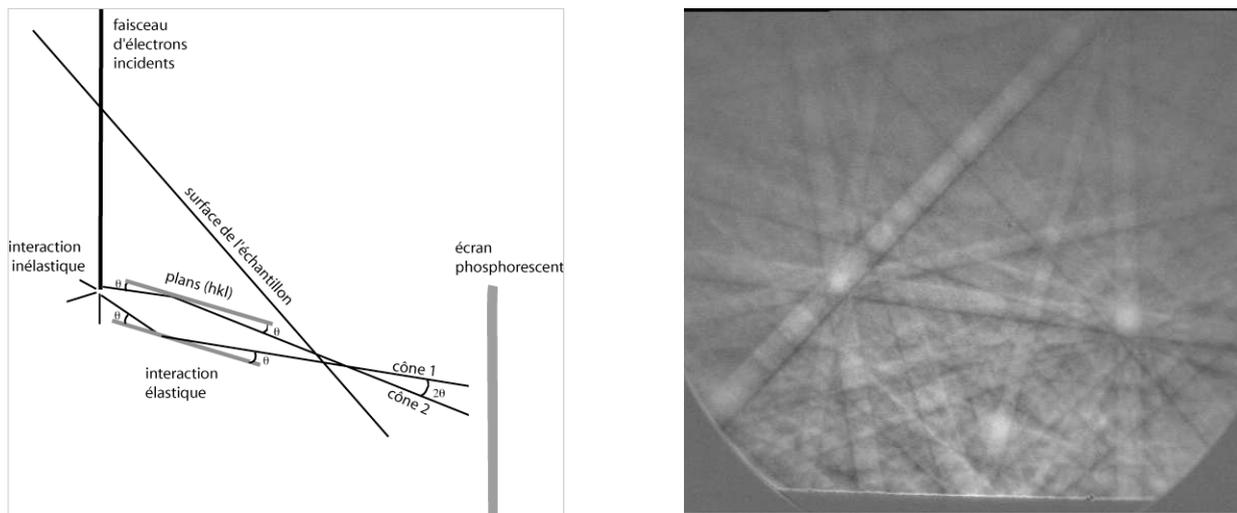
## Annexe 2: Méthode EBSD



Les mesures d'orientations préférentielles de réseau (OPR) ont été réalisées grâce à la technique EBSD développée au laboratoire de Tectonophysique (Ben Ismail et al., 2003).

### Principe

Cette technique, développée dans un microscope électronique à balayage, se fonde sur l'analyse des interactions entre un faisceau vertical d'électrons et une lame mince polie inclinée à  $70^\circ$  (e.g., Randle et Engler, 2000). Les interactions inélastiques entre les électrons incidents et les atomes de l'échantillon produisent une dispersion du faisceau d'électrons dans l'échantillon. Si les électrons déviés se trouvent en position de Bragg pour une famille de plans réticulaires (hkl) d'un cristal, ils sont diffractés. Cette diffraction (interaction élastique) donne naissance aux électrons rétrodiffusés. En trois dimensions, les trajectoires des électrons qui satisfont les conditions de Bragg définissent deux cônes appelés cônes de Kossel (fig. A2.1). Projetés sur un écran, ces 2 cônes produisent deux lignes qui délimiteront une zone brillante dont l'épaisseur est proportionnelle à l'angle de Bragg  $\theta$  (ou à la distance inter-réticulaire des plans (hkl)). Cette bande brillante est appelée bande de Kikuchi en référence à leur première description par Kikuchi en 1928, et elle est caractéristique du plan (hkl) du cristal. Ainsi, les angles que font les différentes bandes de Kikuchi entre elles correspondent aux angles que font les familles de plans réticulaires entre elles. Chaque intersection entre au moins deux bandes représente donc une direction cristallographique donnée. Ainsi, les bandes de Kikuchi contiennent l'information cristallographique complète du cristal analysé.



**Figure A2.1 :** A gauche, principe de formation des cônes de Kossel et des bandes de Kikuchi. A droite, exemple de bandes de Kikuchi pour un cristal d'olivine révélées par l'intermédiaire de l'écran au phosphore et de la caméra CCD.

### Montage dans un MEB

L'équipement EBSD utilisé est illustré en figure A2.2. Il est monté dans un microscope à balayage JEOL 5600 piloté par ordinateur. Dans la chambre à vide, les électrons rétrodiffusés sont générés par un faisceau incident d'électrons focalisé sur la surface de l'échantillon incliné par rapport à l'horizontale de  $70^\circ$ . Un écran au phosphore placé à l'intérieur de la chambre à environ 30 mm de l'échantillon reçoit les électrons rétrodiffusés et émet une image photonique de la figure de diffraction. Cette image est capturée à l'extérieur de la chambre par

une caméra CCD haute résolution et traitée numériquement de façon à minimiser le bruit de fond. L'image de diffraction est ensuite indexée par le logiciel Channel+. L'indexation consiste à détecter et à identifier les bandes de diffraction. La détection des bandes peut être automatique. Toutefois, lorsque le contraste n'est pas assez élevé, le manipulateur peut lui-même choisir les bandes de diffraction (3 à 6 bandes de diffraction sont nécessaires pour une identification par le logiciel Channel+). Les orientations cristallographiques sont ensuite déterminées par comparaison de l'image de diffraction obtenue dans le MEB (bandes détectées) et de la sphère de diffraction modélisée. Cette sphère de diffraction couvre toutes les orientations possibles d'un cristal. Elle est déterminée à partir des paramètres réticulaires et des positions équivalentes des différents atomes dans la maille élémentaire (symétries) (Schmidt and Olesen, 1989). Elle est donc calculable pour tous les minéraux dont on connaît ces informations cristallographiques.

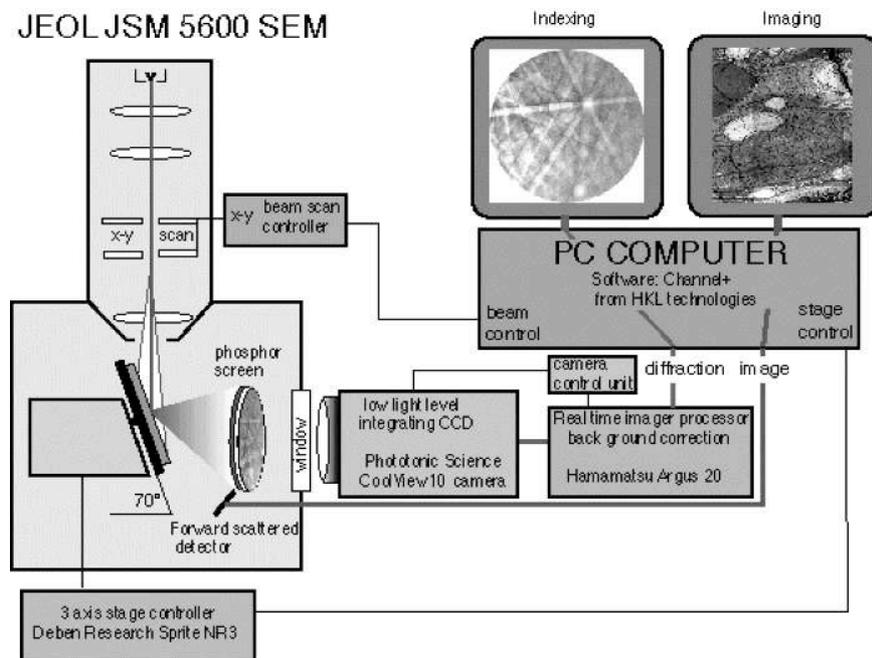


Figure A2.2 : Equipement EBSD utilisé à Montpellier

Une indexation optimale des figures de diffraction nécessite un bon contraste entre les bandes de Kikuchi et le bruit de fond. Ce bruit de fond est accentué lorsque les interactions inélastiques sont accrues, c'est-à-dire lorsque la profondeur de pénétration du faisceau dans l'échantillon est plus grande. Ce contraste est donc optimisé en ajustant l'énergie des électrons : une tension d'accélération de 15-20 kV donne les meilleurs contrastes. L'inclinaison de l'échantillon permet aussi de limiter la profondeur d'interaction des électrons. L'optimisation des conditions de travail est décrite dans Randle et Engler (2000).

La qualité des figures de diffraction exige une minimisation des irrégularités à la surface de la lame mince étudiée. En effet, des irrégularités de surface pouvant dévier le faisceau électronique, les figures de diffraction peuvent résulter de l'interaction du faisceau avec plusieurs cristaux différents, faussant ainsi la mesure. Par ailleurs, ces irrégularités ont pour effet de localiser les charges électriques issues du faisceau d'électron, rendant impossible la

visualisation des figures de diffraction. Un bon poli de l'échantillon est donc exigé. Outre un poli mécanique traditionnel, la lame mince subit un poli chimique-mécanique avec une solution silicatée de SYTON. Selon la qualité de la lame mince, une métallisation au platine (quelques Å d'épaisseur) est parfois nécessaire afin de mieux évacuer les charges de surface. Les difficultés rencontrées dans la thèse concernant la mesure des orientations cristallographiques par la méthode EBSD ont été essentiellement liées à la qualité du contraste, les olivines analysées ayant généralement montré un faible contraste. Enfin, la précision des mesures d'orientation généralement admise est d'environ 1°.

Les détails concernant l'installation du système EBSD du laboratoire de Tectonophysique et des exemples de mesures sur divers minéraux et roches sont disponibles sur le site Internet suivant :

**<http://www.dstu.univ-montp2.fr/TECTONOPHY/EBSD/EBSD-intro.html>**

## Résumé

La connaissance de la structure thermique interne de la Terre est essentielle pour mieux appréhender les phénomènes géologiques observables à la surface du globe. Cette structure thermique est déterminée par les échanges thermiques conductifs et convectifs au sein du manteau. Ces derniers sont essentiellement contrôlés par les propriétés de transport thermique des roches du manteau. Le travail de thèse propose une étude de ces propriétés par la détermination expérimentale de la diffusivité thermique à haute température et haute pression. Pour cela, des mesures de diffusivité thermique sur monocristaux et agrégats naturels d'olivine (roches) ont été conduites à l'aide de trois méthodes de mesures, dont l'une a été élaborée à Montpellier. Les mesures sur monocristaux montrent une forte anisotropie de la diffusivité thermique et une contribution significative du rayonnement au transport thermique à haute température. Les mesures sur des péridotites déformées naturellement montrent que l'orientation préférentielle des cristaux d'olivine conduit à une anisotropie significative (25%) de la diffusivité thermique, qui se conserve à haute température. La comparaison entre le comportement des monocristaux et des agrégats d'olivine suggère que la contribution des phonons à la diffusivité thermique n'est pas affectée par les joints de grain ou les imperfections de la roche et que bien que diminuée par l'effet des joints de grains, la contribution radiative demeure significative à l'échelle de la roche. La diffusivité thermique résultante dans les conditions du manteau est proche de  $1.5 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , et elle est 50% plus élevée que celle déduite des études antérieures. La modélisation des géothermes dans divers contextes géodynamiques montre que des valeurs réalistes de la contribution des phonons, ajoutées à une contribution radiative significative et une anisotropie de la diffusivité thermique peuvent avoir un effet majeur sur la dynamique de la lithosphère et du manteau convectif.

**Mots clés :** manteau supérieur, lithosphère, olivine, péridotite, diffusivité thermique, conductivité thermique, phonons, rayonnement, anisotropie, modèles pétrophysiques, mesures physiques, haute température, haute pression, méthode EBSD.

## Abstract

The knowledge of the thermal structure of the Earth is a prerequisite to better understand the geological processes observed at the Earth's surface. Conductive and convective heat transport mechanisms within the mantle determine this thermal structure and are mainly controlled by heat transport properties of mantle rocks. This study proposes to investigate these properties by measuring the thermal diffusivity of olivine single-crystals and polycrystalline aggregates (rocks) at high temperature and high pressure, using three methods of measurement. Measurements on single-crystals display a strong anisotropy of thermal diffusivity and a significant heat transport by radiation at high temperature. Measurements on naturally-deformed peridotites show that the lattice preferred orientations of minerals lead to a significant anisotropy of thermal diffusivity (25%), which is preserved at high temperature. Comparison between single-crystals and rocks behaviours suggests that heat transfer by phonons is not hindered by grain boundaries and rock imperfections and that heat transport by radiation remains significant at the rock scale, in spite of reflections at grain boundaries. The resulting thermal diffusivity under mantle conditions is close to  $1.5 \text{ mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , which is about 50% higher than the one determined in previous studies. Numerical models of geotherms show that the combination of realistic values of phonon contribution, heat transport by radiation and anisotropy of thermal diffusivity may have major implications on the lithosphere dynamics and mantle convection.

**Keywords:** upper mantle, lithosphere, olivine, peridotite, thermal diffusivity, thermal conductivity, phonons, radiation, anisotropy, petrophysical modelling, high temperature, high pressure, EBSD method.