



Simulation expérimentale et numérique de l'altération de roches supposées martiennes

Vincent GIRARD,

Directeurs de thèse : Jean DUBESSY, Marie-Christine BOIRON

UMR G2R 7566, Nancy Université, CNRS, BP 239, 54506 Vandoeuvre-les-Nancy Cedex, FRANCE.

Projet soutenu par les programmes PNP, OPV, la région Lorraine et
Nancy Université.

Nancy, le 28 janvier 2010

Christine C.

1. Pourquoi ce projet :

Observation à la surface de Mars de dépôts sédimentaires avec des sulfates + des argiles + oxydes de fer et d'aluminium

2. Expérimentations et modélisations numérique pour :

- Déterminer les minéraux issus de l'altération d'un verre basaltique de composition supposée martienne**
- Déterminer l'influence des rayonnements ultraviolets de fortes énergies sur la chimie des solutions et des minéraux néoformés**
- Déterminer l'influence d'espèces gazeuses telle que CO2 sur la chimie des solutions et des minéraux**

3. Conséquences attendues :

- Aider à l'interprétation des données des missions spatiales futures (orbitales et in-situ : ex : ChemCam sur MSL ou Aurora)**
- Contraindre les conditions régnant à la surface de Mars primitive**

Approche expérimentale

Simulations expérimentales en boîte à gants :

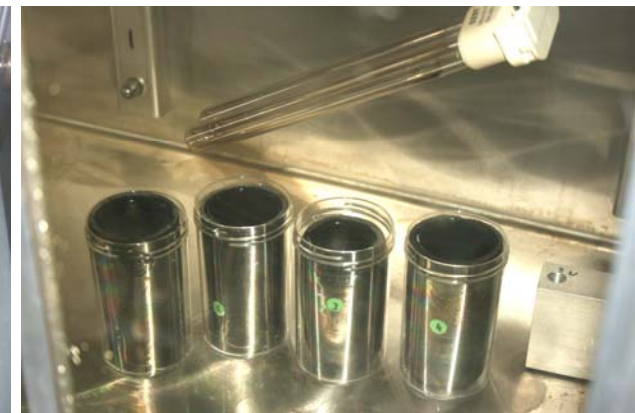
- Temps d'expérience : 3 mois.
- Température d'expérience : 20 °C environ
- Atmosphère contrôlée ($O_2 < 1\text{ppm}$) :
 1. 100% N_2
 2. 99,9% N_2 avec 0.1% CO_2
 3. 99% N_2 avec 1% CO_2
- Présence ou non de rayonnement ultraviolet C (180 nm – 250 nm)
- Solution d'expérience : eau pure
- Solide : verre basaltique (composition noritique + Li, Cs, B (0.1%) + FeS (0.02%)) sous forme de poudre (100 à 200 microns) + béccher ou barreau



Boîte à gants

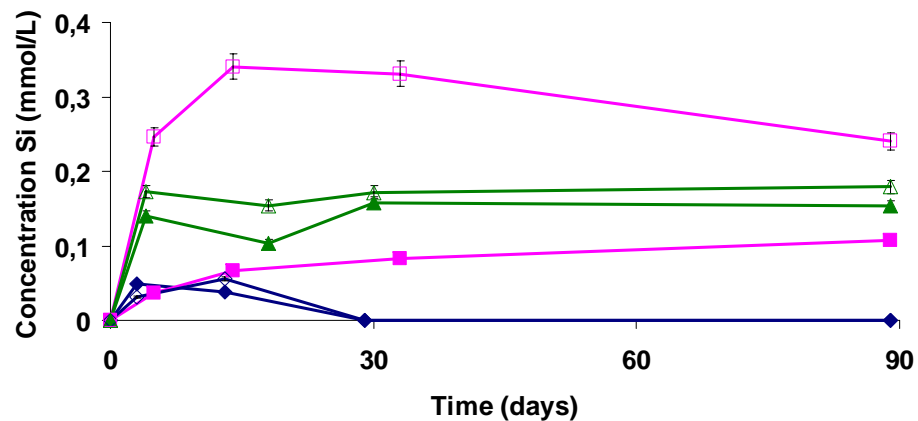
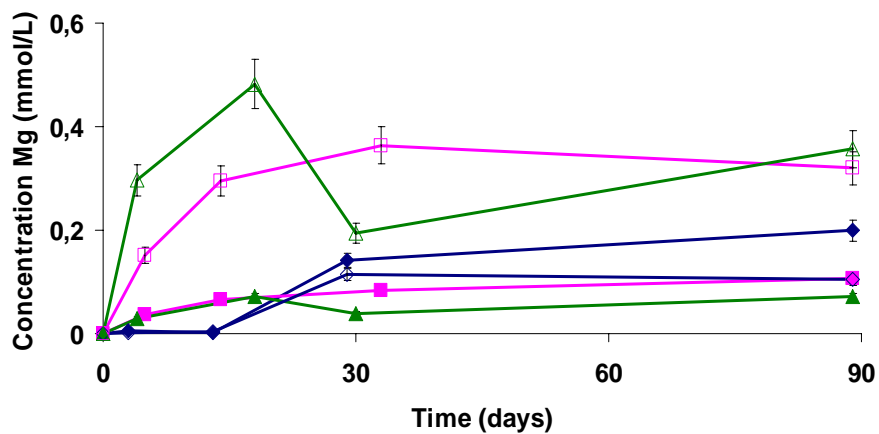
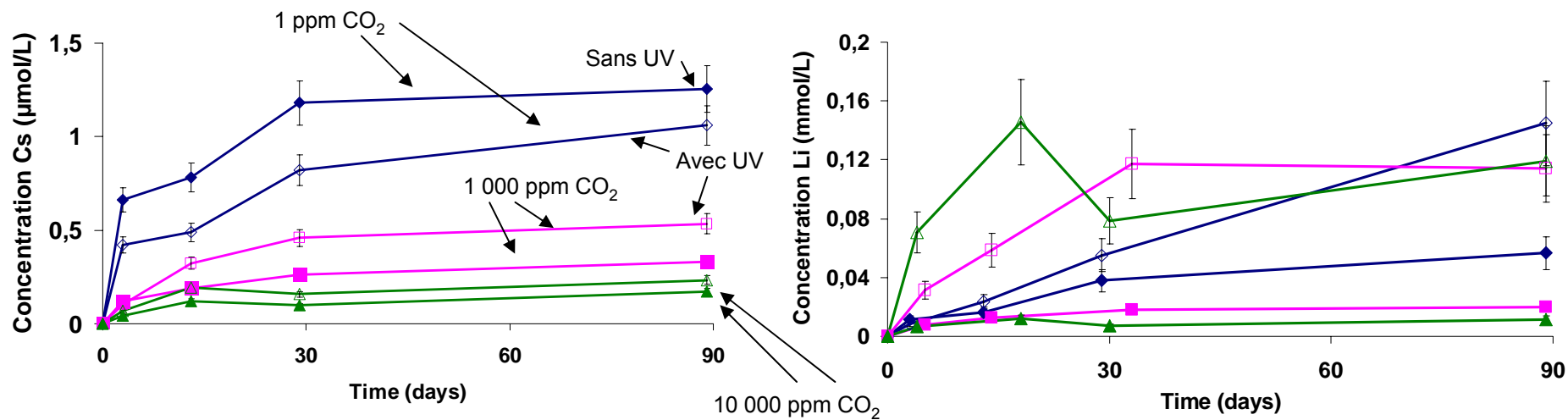


Béchers Nalgène avec
poudre et barreau

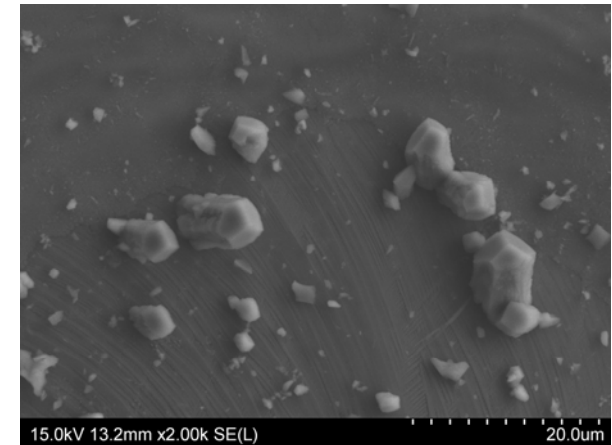
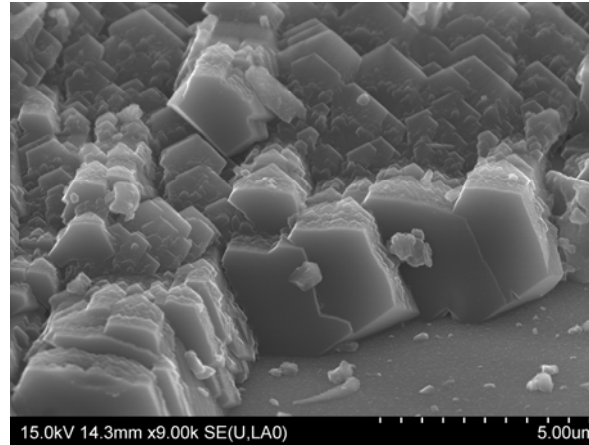
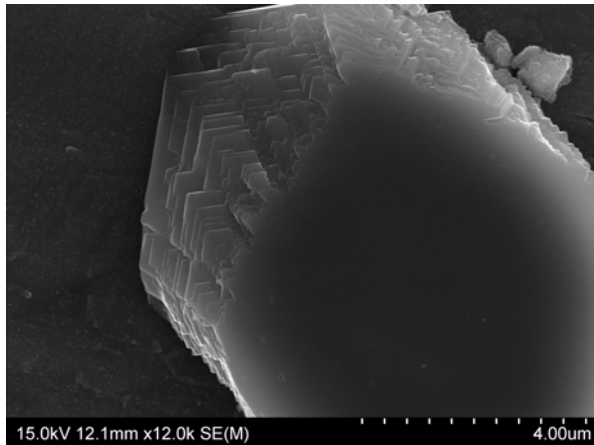


Béchers en verre
basaltique sous lampes à
ultraviolets C

Résultats expérimentaux : solutions

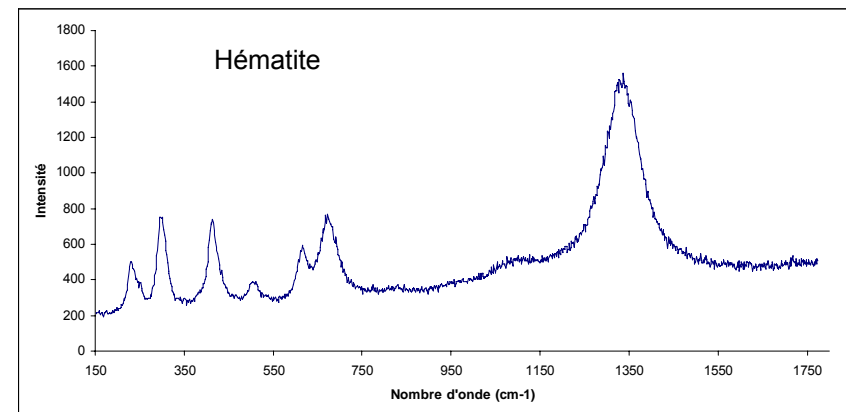
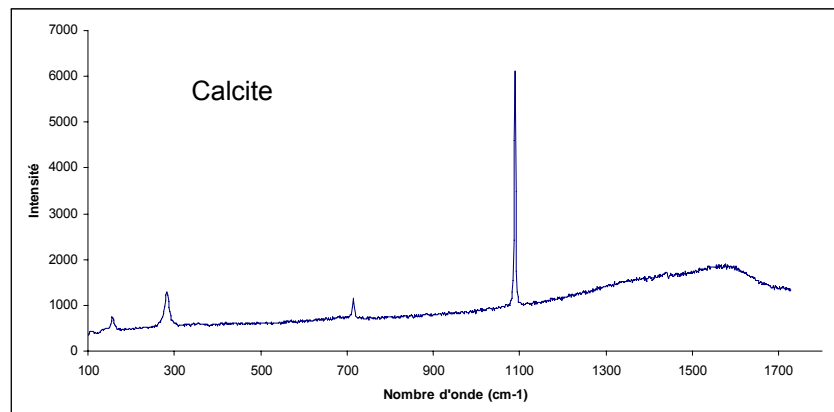


Résultats expérimentaux : solides (1)

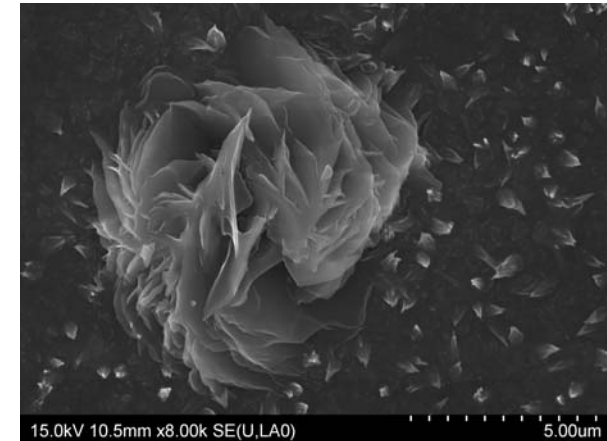
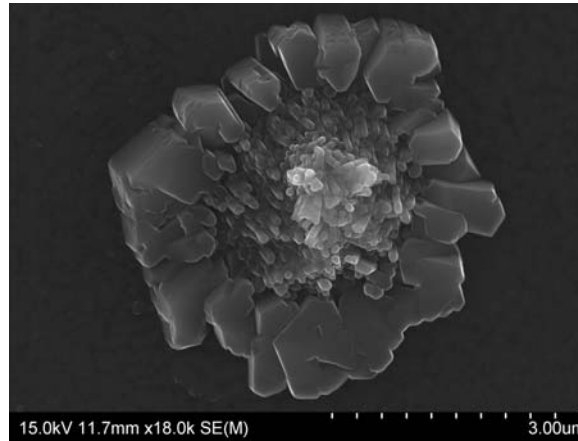
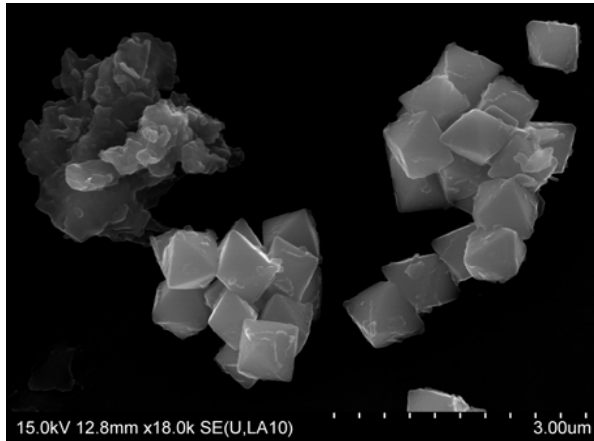


Calcite formées dans les expériences sans ajout de CO_2 avec et sans UVC

Analyses par spectroscopie Raman :

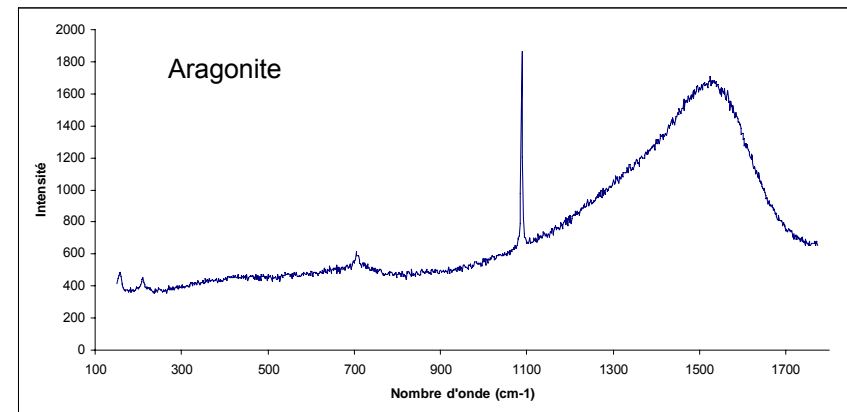
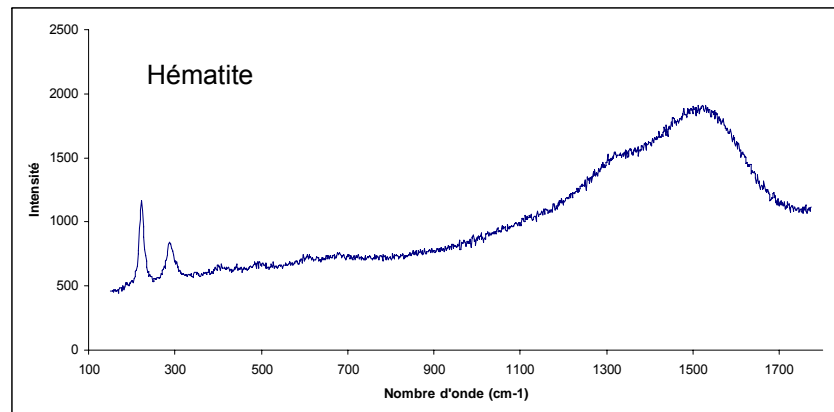


Résultats expérimentaux : solides (2)



Cristaux de « pyrite » (à gauche), d'aragonite (au centre) et d'un minéral magnésien (à droite) formés dans les expériences avec $p_{\text{CO}_2} = 10^{-3}$ bar et en présence de rayonnement UVC

Analyses par spectroscopie Raman :



Synthèse expérimentale

1. Solutions :

- Concentrations en éléments augmentent très rapidement en début de série avant d'avoir un palier à partir de 1 mois
- Dépendance de la concentration en Cs vis-à-vis du CO₂
- Concentrations en éléments souvent plus importantes dans les expériences avec irradiations UVC

2. Minéraux :

- Précipitation de calcite et d'hématite pour $p_{\text{CO}_2} = 10^{-6}$ bar
- Précipitation de calcite, d'aragonite et d'hématite pour $p_{\text{CO}_2} \geq 10^{-3}$ bar
- Présence de cristaux de « pyrite » et d'un minéral magnésien dans un échantillon issu des expériences sous irradiations ultraviolettes
- Pas d'argiles ni de sulfates encore observés

Simulation numérique

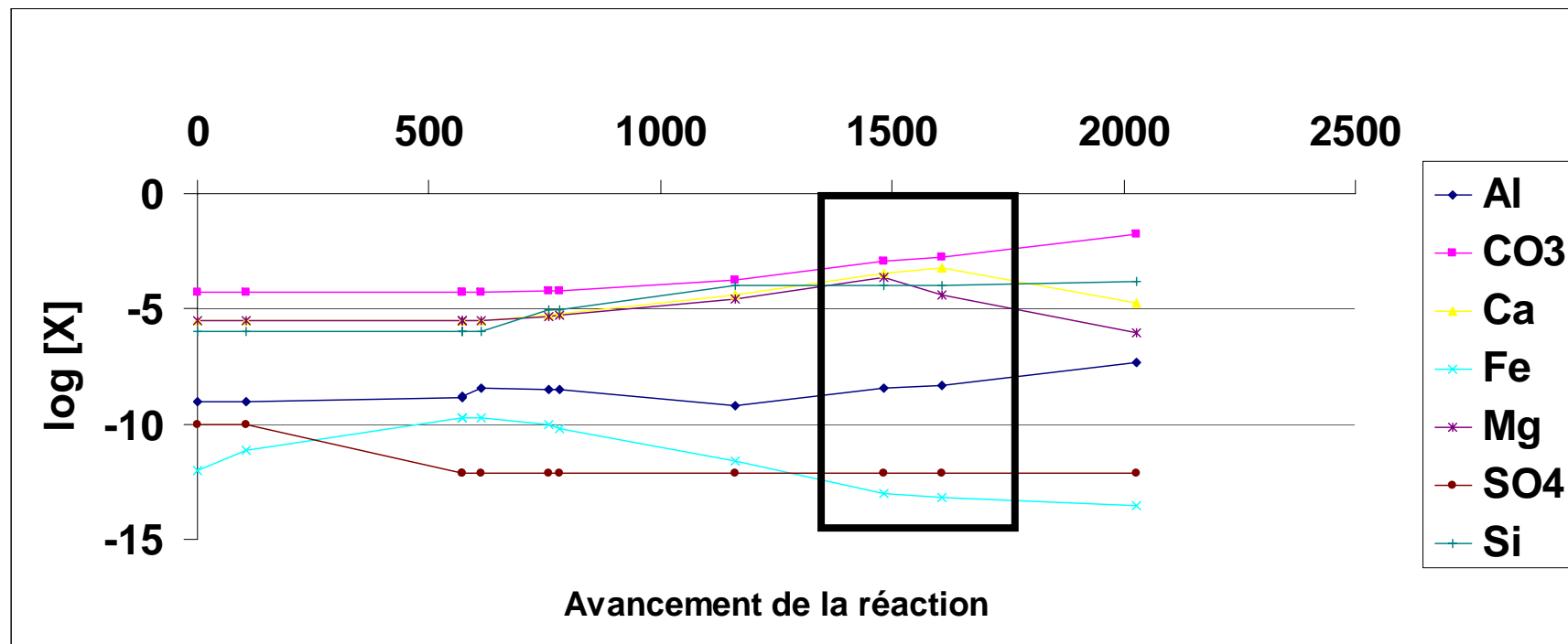
Utilisation du logiciel Kindis (KINetic DISSolution) (Made et al, 1994).

Fonctionnement : A partir d'un état initial entre un solide réactant et une solution, le logiciel va dissoudre une fraction de ce solide dans la solution et calculer l'état de saturation vis-à-vis des minéraux autorisés par l'utilisateur dans des conditions définies par l'utilisateur (P_{CO_2} , P_{O_2} , T , X_{sol} , $pH_{initial}$...).

Résultats	$P_{CO_2} = 10^{-6}$ bar		$P_{CO_2} = 10^{-3}$ bar		$P_{CO_2} = 10^{-2}$ bar	
	Minéraux précipités ou dissous	pH	Minéraux précipités ou dissous	pH	Minéraux précipités ou dissous	pH
Incréments croissants	Jarosite H3O ⁺	6,80	Jarosite H3O ⁺	6,00	Jarosite H3O ⁺	5,00
	Hématite	6,80	Hématite	6,00	Boehmite	5,00
	Jarosite H3O ⁺	6,80	Jarosite H3O ⁺	6,00	Hématite	5,00
	Boehmite	6,81	Boehmite	6,00	Jarosite H3O ⁺	5,00
	Kaolinite	8,47	Kaolinite	6,17	Kaolinite	5,13
	Boehmite	8,64	Boehmite	6,24	Boehmite	5,18
	Talc	8,93	Quartz	6,98	Quartz	5,95
	Quartz	9,61	Dolomite	7,86	Dolomite	7,20
	Calcite	9,71	Calcite	8,00	Calcite	7,34

Résultats : Confrontation des simulations numériques et expérimentales

Solutions : Où situer les expériences dans les simulations numériques ?



Les compositions des solutions issues des expériences peuvent se replacer en fin de simulation au niveau des points correspondant à la précipitation de dolomite et de calcite.

Résultats : Confrontation des approches

Comparaison entre minéraux prédits par la simulation et les expériences :

Simulation numérique	Expériences
Hématite	Hématite
Kaolinite	Non observée
Quartz	Non observée
Dolomite	Non identifiée
	Autre phase magnésienne
Calcite	Calcite
Aragonite (si on retire la calcite de la simulation)	Aragonite
	Pyrite

Résultats : Confrontation des approches

- L'apparition de l'aragonite est due à une haute concentration en Mg qui diminue la cinétique de cristallisation de la calcite en faveur de l'aragonite.
- De même, la phase magnésienne non identifiée peut être supposée cinétiquement favorable devant la cristallisation de la dolomite.
- L'absence de kaolinite dans les expériences peut être due à la difficulté d'observer des minéraux de petite taille ou en faible quantité.
- Les sulfures initiaux se sont oxydés sous les rayonnement UV pour former la pyrite. Sans UV, aucun indice de cette évolution.

→ Les quantités de matière mesurées par les méthodes expérimentales sont minimales (taille des minéraux ou concentrations en éléments) → difficultés d'analyses → difficultés pour coupler les analyses issues de méthodes différentes.

Conclusions

- Les deux types de simulations présentent des résultats similaires même si certains minéraux prédits ne sont pas observés.
1. Les irradiations UVC permettent une libération plus importante des éléments contenus dans le verre vers la solution.
 2. L'augmentation de la pression partielle de CO_2 augmente la quantité de carbonate observé et peut jouer un rôle sur la concentration en certains éléments
 3. La présence de CO_2 dans l'atmosphère martienne en présence d'eau liquide auraient conduit à la formation de carbonates → Carbonates ont été dissous par la suite ou la pression partielle de CO_2 était plus faible que 10^{-6} bar.

En cours de réalisation :

Expériences en capsules d'or pour faire des pressions partielles de CO₂ plus fortes et des pressions partielles de SO₂ :

- Temps d'expérience : 3 mois.
- Température d'expérience : 20 °C et 50 °C (bain marie)
- Atmosphère contrôlée (O₂ < 1ppm) :
 - 100% N₂, 100% CO₂ et 100% SO₂
 - 99,9% N₂ avec 0.1% CO₂
 - 99% N₂ avec 1% CO₂
 - 50% CO₂ avec 50% SO₂

Augmentation de la base de données des simulations numériques

Merci de votre attention

