

Numéro d'ordre : 40172

Ecole doctorale Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement

## **THESE**

Présentée à

**l'Université Lille 1 Sciences et Technologies**

pour obtenir le grade de

**Docteur de l'Université**

Specialité : Molécules et Matière condensée

par

**Arnaud Metsue**

Modélisation des structures de coeurs des dislocations dans les  
minéraux du manteau terrestre à l'aide du modèle de  
Peierls-Nabarro

Soutenue publiquement le 6 janvier 2010

devant le jury composé de :

M. F. Louchet	Président
M. J. Ingrin	Rapporteur
M. L. Pizzagalli	Rapporteur
M. C. Denoual	Examineur
M. P. Cordier	Directeur de thèse
M. P. Carrez	Co-encadrant de thèse
M. D. Mainprice	Co-encadrant de thèse



## Remerciements

Cette thèse s'est déroulée au Laboratoire de Structure et Propriétés de l'État Solide de Villeneuve d'Ascq d'octobre 2006 à janvier 2010.

Je ne peux évidemment pas débiter cette page sans remercier de façon la plus chaleureuse M. Patrick Cordier pour avoir dirigé cette thèse. Tu m'as laissé développer mon sens critique et permis de travailler de façon autonome.

Un grand merci également à M. Philippe Carrez qui m'a montré ce qu'est la pratique du calcul scientifique. Grâce à toi, je sais maintenant ouvrir un terminal et manier le ./ sans problèmes. Je te remercie également pour ton amitié.

Je remercie également M. David Mainprice, M. François Louchet, M. Jannick Ingrin et M. Laurent Pizzagalli pour avoir examiné mon travail. Vous m'avez apporté de précieux conseils.

Un merci particulier à M. Christophe Denoual pour son accueil au CEA et pour m'avoir laissé m'amuser avec son modèle de Peierls-Nabarro-Galère-kin.

Mes choix d'après-thèse n'auraient pas été ce qu'ils sont sans l'écoute des expériences de M. Mathieu Roskosz et M. Sébastien Merkel. Vous m'avez montré qu'on pouvait très bien vivre à l'extérieur du Nord-Pas-De-Calais.

Un grand merci du fond du cœur à Jonathan, Greg (bravo pour ta petite fille), Julien, Carolines, Carole, Jessy, Elodie et à tous les autres avec qui j'ai passé de très bonnes soirées et de bons moments et qui ont contribué à assurer une bonne ambiance au sein du laboratoire.

Mes derniers remerciements vont à Audrey pour son incroyable patience avec son insupportable mari et à qui je dédie cette thèse.



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>1 Le modèle de Peierls-Nabarro</b>	<b>15</b>
1.1 Le modèle unidimensionnel . . . . .	19
1.1.1 Positionnement du problème . . . . .	19
1.1.2 L'énergie élastique . . . . .	20
1.1.3 L'énergie de désaccord . . . . .	23
1.1.4 L'équation de Peierls-Nabarro . . . . .	23
1.1.5 Résolution de l'équation de Peierls-Nabarro. . . . .	24
1.1.6 L'énergie et la contrainte de Peierls . . . . .	25
1.2 Détermination des structures de coeurs des dislocations et contraintes de Peierls pour les matériaux à cristalochimie complexe. . . . .	27
1.2.1 Calcul de la contrainte de Peierls . . . . .	30
1.3 Limites du modèle unidimensionnel. . . . .	30
1.4 Le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin . . . . .	35
1.4.1 Structure de coeur . . . . .	35
1.4.2 Détermination de la contrainte de Peierls dans le formalisme du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. . . . .	39
1.5 Conclusion . . . . .	42
<b>2 Calculs des énergies de fautes d'empilement généralisées</b>	<b>43</b>
2.1 Le calcul <i>ab initio</i> . . . . .	45
2.1.1 De l'approximation adiabatique à la méthode Hartree-Fock . . . . .	46
2.1.2 La théorie de la fonctionnelle de la densité . . . . .	49
2.1.3 Pratique du calcul <i>ab initio</i> . . . . .	52

2.1.4	Convergence des calculs avec le code VASP . . . . .	54
2.2	Le calcul par potentiels empiriques . . . . .	56
2.2.1	Les interactions à deux corps : le potentiel de Buckingham . . . . .	57
2.2.2	Les interactions à trois corps . . . . .	58
2.2.3	Polarisation . . . . .	58
2.2.4	Optimisation des structures . . . . .	59
2.2.5	Présentation du potentiel empirique utilisé . . . . .	60
2.3	Techniques de calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées . . . . .	62
<b>3</b>	<b>L'approche des analogues pour l'étude de la plasticité de la phase post-perovskite</b>	
	<i>MgSiO<sub>3</sub></i> . . . . .	<b>69</b>
3.1	Structure de la post-perovskite et systèmes de glissement potentiels. . . . .	75
3.2	Méthode . . . . .	77
3.2.1	Structures de coeur des dislocations et contraintes de Peierls. . . . .	77
3.2.2	Orientations préférentielles des cristaux : le modèle visco-plastique auto-cohérent (VPSC) . . . . .	79
3.3	Résultats . . . . .	80
3.3.1	Paramètres de maille et constantes élastiques . . . . .	80
3.3.2	Calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées . . . . .	82
3.3.3	Structure de coeurs des dislocations et contraintes de Peierls . . . . .	86
3.3.4	Orientations préférentielles des cristaux . . . . .	93
3.4	Discussion et comparaison avec la phase post-perovskite <i>MgSiO<sub>3</sub></i> . . . . .	97
3.4.1	Structures de coeurs de dislocations de <i>MgSiO<sub>3</sub></i> et de ses analogues basses pression. . . . .	97
3.4.2	Facilité des systèmes de glissement et anisotropie plastique . . . . .	98
3.4.3	Textures de déformation des analogues et comparaison avec l'expérience. . . . .	101
3.5	Conclusion . . . . .	103
<b>4</b>	<b>Dislocations et mécanismes de plasticité de la wadsleyite à 15GPa.</b>	<b>105</b>
4.1	Généralités sur la wadsleyite et déformation plastique. . . . .	108
4.2	Méthode . . . . .	109
4.3	Résultats . . . . .	112
4.3.1	Structure et élasticité . . . . .	112

4.3.2	Calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées. . . . .	113
4.3.3	Application du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin à la wadsleyite. . . . .	118
4.4	Discussion . . . . .	133
4.4.1	Comparaison entre structures de coeurs des dislocations calculées et observées expérimentalement. . . . .	133
4.4.2	Contraintes de Peierls et systèmes de glissement actifs . . . . .	138
4.5	Conclusion . . . . .	141
<b>5</b>	<b>Structures de coeurs des dislocations dans le diopside à 0 et 10GPa</b>	<b>143</b>
5.1	Structure et déformation plastique du diopside . . . . .	146
5.2	Résultats . . . . .	149
5.2.1	Méthode . . . . .	149
5.2.2	Paramètres de maille et constantes élastiques . . . . .	150
5.2.3	Choix des caractères des dislocations étudiés . . . . .	151
5.2.4	Fautes d'empilement généralisées . . . . .	157
5.2.5	Structures de coeur des dislocations et contraintes de Peierls . . . . .	159
5.3	Discussion . . . . .	171
5.3.1	Structures de coeurs et mobilité des dislocations [100] et [010] . . . . .	171
5.3.2	Glissement des dislocations de vecteur de Burgers $1/2[110]$ ? . . . . .	175
5.3.3	Le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001]. . . . .	178
5.4	Conclusion . . . . .	182
<b>6</b>	<b>Modèle de Peierls généralisé et dislocations dans <math>Mg_2SiO_4</math> forsterite</b>	<b>183</b>
6.1	Présentation et systèmes de glissement de la forsterite. . . . .	187
6.2	Application du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin aux dislocations dans la forsterite . . . . .	190
6.2.1	Méthode. . . . .	190
6.2.2	Paramètres de maille et constantes élastiques à 0GPa . . . . .	192
6.2.3	Calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées . . . . .	194
6.2.4	Application du modèle de Peierls généralisé . . . . .	198
6.2.5	Comportement de la dislocation vis [001](100) non-planaire sous l'action de différentes composantes du tenseur de contraintes à 0GPa. . . . .	212
6.2.6	Effet de la pression sur la dislocation vis [001] . . . . .	216

---

6.3	Discussion . . . . .	223
6.3.1	Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [100] à 0GPa. . . . .	223
6.3.2	Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [001] à 0 et 10GPa. . . . .	229
6.4	Conclusion . . . . .	237
	<b>Conclusion</b>	<b>239</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>247</b>

# Introduction



De nombreux phénomènes géologiques majeurs observés à la surface de la Terre, tels que le volcanisme, la répartition des séismes ou la formation de chaînes de montagnes, peuvent maintenant être expliqués dans le cadre de la théorie de la tectonique des plaques. Cette théorie, formulée à la fin des années 1960 par McKenzie & Parker (1967), propose un découpage de la surface de la Terre en douze plaques rigides en mouvement les unes par rapport aux autres dont les frontières, et parmi elles les dorsales et les zones de subduction, concentrent la majeure partie de l'activité géologique. La possibilité de déplacement des continents a été évoquée pour la première fois en 1912 par le météorologue allemand Alfred Wegener en observant la complémentarité entre la côte orientale de l'Amérique du Sud et la côte occidentale de l'Afrique. A cette époque, aucun argument ne permettait d'expliquer les mécanismes responsables de ces déplacements. Il a fallu attendre la fin de la Seconde Guerre Mondiale et l'observation sous-marine de la formation du plancher océanique aux dorsales au milieu de l'océan Atlantique pour admettre la mobilité constante des plaques tectoniques. Les déplacements en surface de ces plaques ne sont que la partie superficielle de grands mouvements de convection dans le manteau terrestre : une connaissance précise des propriétés rhéologiques, et donc des propriétés plastiques, des matériaux composant notre planète est essentielle pour une meilleure compréhension de ces mouvements de convection.

La Terre est constituée de deux grandes enveloppes qui sont le manteau et le noyau, elles mêmes subdivisés en plusieurs couches. Ceci a été mis en évidence grâce à l'étude des ondes sismiques qui se propagent à l'intérieur de la Terre. Les profils de vitesses des ondes sismiques présentent des changements brutaux situés à différentes profondeurs et caractérisent ainsi la structure en couches de notre planète. Ceci est attribué à un changement de masse volumique et de propriétés élastiques des matériaux composant la Terre. Les premières observations de Richard Oldham en 1906 et de Beno Gutenberg en 1912 ont démontré l'existence d'un noyau métallique situé à 2900km de profondeur. Cette structure binaire noyau-manteau fut ensuite affinée, grâce à des modèles sismologiques dont le plus connu est celui de Dziewonski & Anderson (1981). Ils ont montré que le manteau terrestre était subdivisé en trois parties : un manteau supérieur s'étendant jusqu'à 440km de profondeur, une zone de transition entre 440km et 660km et un manteau inférieur de 660km à 2900km. Le modèle alors proposé porte le nom de modèle PREM pour Preliminary Reference Earth Model. La stratification de la Terre établie à partir de ce modèle est présentée sur la figure (1).

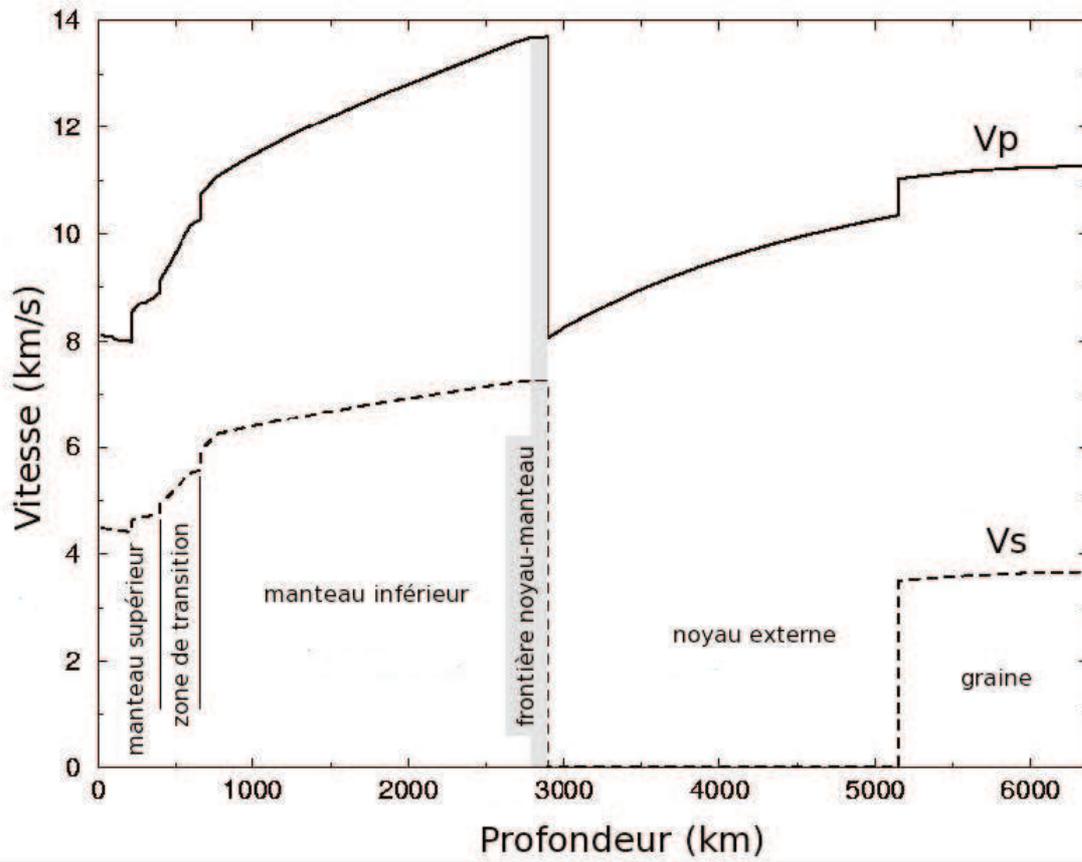


FIG 1 – Vitesses des ondes de compression  $V_p$  et de cisaillement  $V_s$  en fonction de la profondeur issues du modèle PREM (Dziewonski & Anderson (1981)).

Le développement de la tomographie sismique à la fin des années 1980 nous permet à l'heure actuelle de décrire la base du manteau. La tomographie sismique permet de bâtir un modèle tridimensionnel d'anomalies de vitesses d'ondes sismiques à partir d'un modèle sismologique radial comme le modèle PREM. Avec cette technique, Lay *et al.* (1998) ont observé une diminution de 1,5 à 3 % des vitesses des ondes sismiques à l'interface noyau-manteau. Ce saut de vitesse met en évidence la présence d'une couche, la couche D'', d'environ 300km d'épaisseur à 2600km de profondeur.

Les données sismiques mettent également en évidence une anisotropie spatiale des vitesses de propagation des ondes de cisaillement dans les différentes couches de la Terre. La variation radiale de la polarisation des ondes de cisaillement en fonction de la profondeur est illustrée sur la figure (2). Le manteau présente une forte anisotropie, de la croûte jusqu'à 1000km de profondeur et dans la couche D''. Le lecteur trouvera dans Mainprice *et al.* (2000) et Montagner & Guillot (2002) une revue détaillée de l'anisotropie sismique observée dans le manteau. L'origine de l'anisotropie sismique est complexe. Elle ne peut exister que si les minéraux traversés possèdent une anisotropie élastique significative. Toutefois, cette anisotropie ne peut s'exprimer à l'échelle de la roche si les orientations des grains sont parfaitement aléatoires. L'existence d'orientations préférentielles est donc nécessaire à l'expression de l'anisotropie sismique. Plusieurs mécanismes peuvent engendrer des orientations préférentielles. Parmi eux, la déformation plastique par glissement de dislocations est souvent évoquée. La nature des systèmes de glissements actifs et leurs activités respectives conditionneront alors l'anisotropie sismique.

La sismologie ne donne pas d'informations directes sur la composition chimique et minéralogique de la Terre. La composition chimique est contrainte par l'étude des météorites, des ophiolites et des xénolites. Les travaux menés par Ringwood (1962a,b) puis par Green & Ringwood (1963) conduisent à un manteau composé de silicates magnésiens. Ils proposèrent un modèle de minéralogie du manteau supérieur qui est constitué, par ordre d'abondance, d'olivines, de pyroxènes et de grenats. Ce modèle porte le nom de modèle pyrolitique. Qu'en est-il maintenant de la minéralogie dans le manteau profond? Tout d'abord, le manteau peut être chimiquement homogène en ce qui concerne les éléments majeurs (Si, O, Mg, Fe, Al, Ca) (Helffrich & Wood, 2001). Ceci implique l'hypothèse d'une zone de transition et d'un manteau inférieur de composition pyrolitique. Le développement des techniques haute pression permet à l'heure actuelle de couvrir toutes les conditions de pression et températures du manteau. Plusieurs revues des différentes techniques expérimentales de haute pression sont disponibles dans la littérature dont

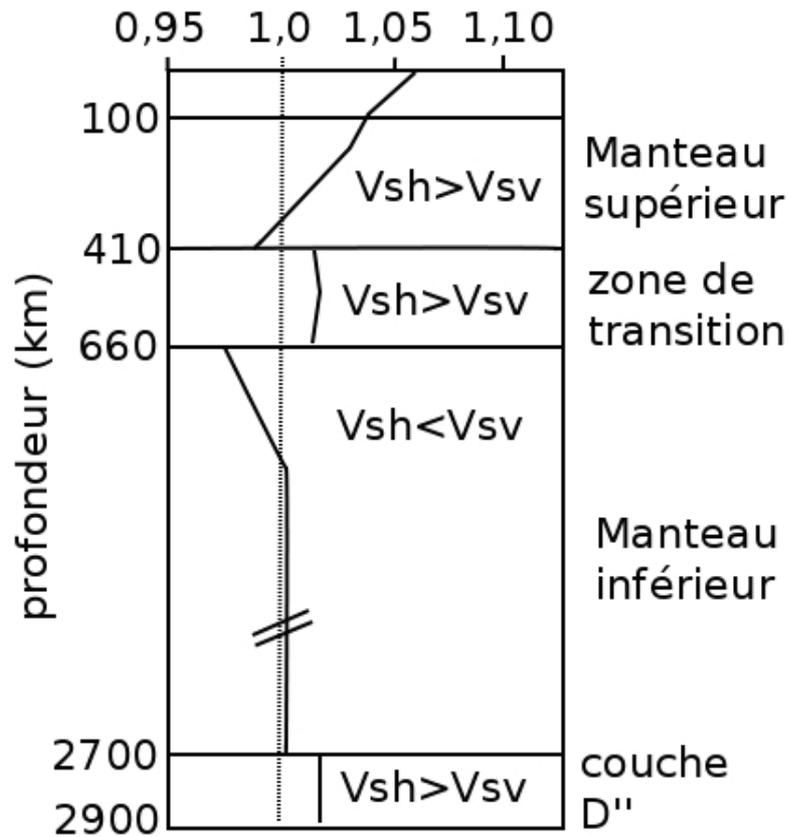


FIG 2 – Variation de la polarisation des ondes de cisaillement dans le manteau tirée du modèle SP6-F de Montagner & Kennett (1996)

(Mao & Hemley, 1998; Cordier *et al.*, 2005). Les presses multi-enclumes, qui peuvent atteindre des pressions de l'ordre de 30GPa, sont bien adaptées pour l'étude des matériaux du manteau supérieur et de la zone de transition. Grâce à ces presses, les diagrammes de phases des minéraux du manteau supérieur ont été établis à haute pression et haute température et on a ainsi mis en évidence les changements de phases entre l'olivine et la wadsleyite puis entre la wadsleyite et la ringwoodite aux conditions de pressions et de températures de la zone de transition. La wadsleyite est 8% plus dense que l'olivine et son module élastique  $K_s$  est 35% plus grand que ce même minéral. Ce changement de phase explique la la rupture de pente des vitesses des ondes sismiques à 410km de profondeur (Agee, 1998). De même, l'augmentation de densité et de module élastique entre la wadsleyite et la ringwoodite peut être une source du changement brutal des vitesses des ondes sismiques à 520km de profondeur (Agee, 1998). La cellule à enclume de diamants, quant à elle, est utilisée pour des pressions supérieures à 30 GPa. Une combinaison entre des expériences réalisées en cellule à enclume de diamants et de simulation numérique a mis en évidence l'existence d'une transformation de la phase perovskite  $(Mg, Fe)SiO_3$ , la phase la plus abondante dans le manteau inférieur, en une phase plus dense, nommée post-perovskite dans la couche D'' (Murakami *et al.*, 2004; Oganov & Ono, 2004). Un modèle minéralogique simplifié du manteau dans une composition pyrolitique ainsi que les transformations de phases impliquant les minéraux est présentée sur la figure (3).

Connaissant la nature des matériaux en présence, il est maintenant possible d'étudier leurs propriétés plastiques aux conditions de température et de pression du manteau avec les presses multi-enclumes ou les cellules à enclumes de diamants. Les expériences de déformation sur polycristaux permettent la détermination des orientations préférentielles des cristaux. Le lecteur peut se reporter à la revue de Wenk (2002) pour plus de détails sur la détermination expérimentale des textures de déformation des polycristaux ainsi que des exemples d'application. Dans le cas des monocristaux, l'orientation de la déformation permet de solliciter un ou plusieurs systèmes de glissement. On peut mesurer la déformation totale de l'échantillon orienté pour diverses vitesses de déformation et établir des lois rhéologiques pour chaque système de glissement activé. Les systèmes de glissement des minéraux du manteau supérieur ont ainsi été étudié à haute pression : l'olivine et les pyroxènes. Ce type d'étude peut être complétée par l'observation *post mortem* des dislocations au microscope électronique à transmission, lorsque les phases sont métastables aux conditions de pression et températures ambiantes (voir Cordier (2002)). Les dislocations sont des défauts cristallins et leurs mouvements collectifs sont responsables de la déformation

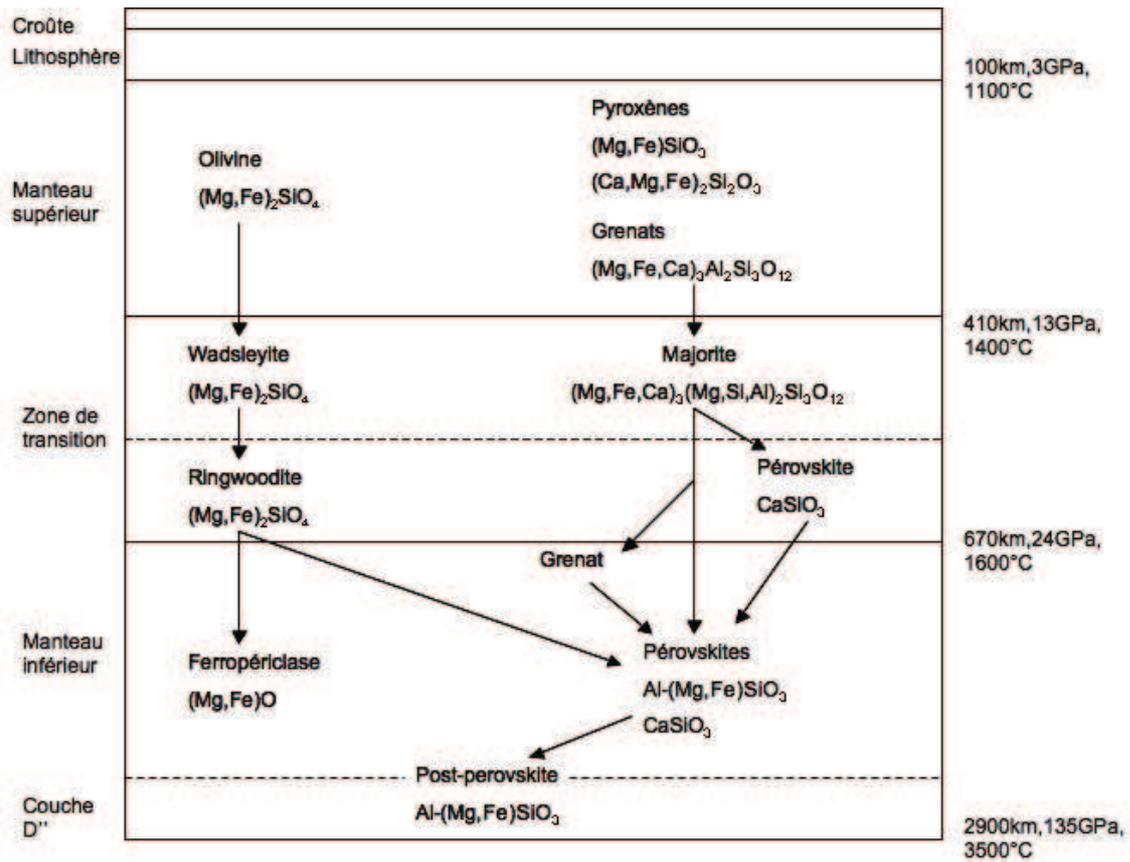


FIG 3 – Minéralogie simplifiée du manteau terrestre dans une composition pyrolytique. Les flèches représentent les transformations de phases mises en jeu. (Figure reproduite d'après Brunet *et al.* (2007))

plastique dans les mécanismes de déformation de type *fluage par dislocations*. Dans les silicates, les dislocations peuvent être soumises à une forte friction de réseau. Les dislocations doivent franchir des barrières d'énergie, les barrières de Peierls, pour se déplacer. La dislocation franchit ces barrières en formant des doubles décrochements dont la nucléation est thermiquement activé. Cette mobilité des dislocations est contrôlée par la structure de coeur du défaut (Cai *et al.*, 2004). La détermination des structures de coeurs des dislocations est alors importante pour décrire les mécanismes de plasticité des matériaux mantelliques.

Nous proposons de décrire en détails la structure de coeur des dislocations de plusieurs minéraux du manteau par une approche numérique. Nous utilisons le modèle de Peierls-Nabarro couplé à des calculs d'énergie de fautes d'empilement généralisées pour déterminer l'étalement du coeur de la dislocation ainsi que la contrainte nécessaire pour faire glisser le défaut à 0K : la contrainte de Peierls. L'étalement du coeur résulte de la compétition entre l'énergie élastique et l'énergie liée au cisaillement des liaisons atomiques du défaut. Nous utilisons une formulation unidimensionnelle et une généralisation à trois dimensions de ce modèle qui sont présentés dans le chapitre 1. Le chapitre 2 est consacré aux calculs des énergies de fautes d'empilement généralisées qui sont déterminées *ab initio* et avec des potentiels empiriques. Le chapitre 3 est un exemple d'application de la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro sur des analogues isostructuraux à la phase  $MgSiO_3$  post-perovskite. Nous comparerons les résultats obtenus sur les analogues avec ceux de  $MgSiO_3$  et nous conclurons sur l'approche des analogues isostructuraux pour l'étude de la plasticité de la phase post-perovskite. Nous appliquons le modèle de Peierls-Nabarro généralisé à la wadsleyite  $\beta - Mg_2SiO_4$  dans le chapitre 4. Nous mettons en évidence des structures de coeurs de dislocations complexes que nous confrontons avec les observations expérimentales en microscopie électronique en transmission. Le chapitre 5 traite des mécanismes de déformation à 0 et 10 GPa d'un clinopyroxène, le diopside. Les dislocations [100] et [001] de la forsterite, le pôle magnésien de l'olivine, sont étudiées en détail avec le modèle de Peierls-Nabarro généralisé à 0 et 10GPa dans le chapitre 6. Nous déterminons la réponse de la dislocation [001] à différentes du composantes du tenseur de contraintes. Nous terminons l'étude par un bilan et les perspectives associées à ce travail.



## Chapitre 1

# Le modèle de Peierls-Nabarro



La déformation plastique est un phénomène de transport impliquant le mouvement de défauts cristallins : défauts ponctuels, dislocations et joints de grains. La force motrice de la plasticité est la contrainte appliquée. Dans beaucoup de cas, la déformation est assurée par le mouvement des dislocations. Les dislocations sont des défauts cristallins linéaires qui sont bien décrits par l'élasticité linéaire sauf près du centre de la ligne, dans une région appelée le coeur de la dislocation. Cette partie du défaut contrôle sa mobilité et une connaissance précise de l'arrangement atomique dans le coeur est alors nécessaire (Cai *et al.*, 2004). Les progrès effectués en microscopie électronique en transmission à haute résolution, comme la correction des aberrations sphériques des lentilles utilisées, permettent de révéler avec assez de précision les coeurs de dislocation. Une image réalisée en microscopie électronique à transmission à haute résolution d'un coeur de dislocation est présentée sur la figure (1.1). Le contraste permet de déceler l'arrangement des rangées atomiques au coeur du défaut.

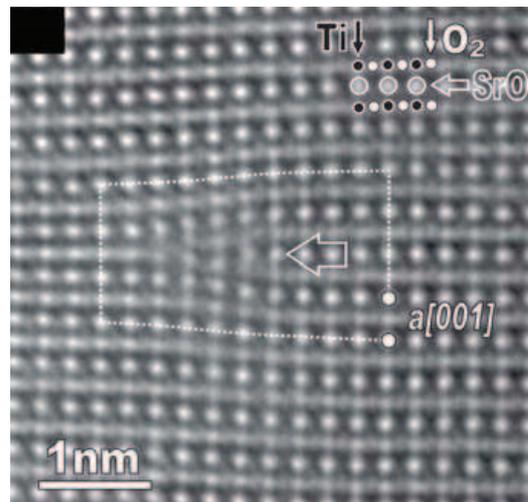


FIG 1.1 – Micrographie de la dislocation coin  $\langle 100 \rangle \{001\}$  dans  $SrTiO_3$  perovskite obtenue en microscopie électronique en transmission à haute résolution. (Image modifiée d'après Jia *et al.* (2005))

Une voie alternative à l'observation des dislocations en microscopie électronique est la détermination des structures de coeurs des dislocations par simulation numérique. Une première technique consiste à calculer la structure du défaut à l'aide d'un modèle atomique. Le lecteur pourra se reporter aux revues de (Woodward, 2005; Vitek & Yamaguchi, 1981; Bulatov & Cai, 2006) ainsi qu'aux nombreux exemples d'applications tels que (Duesbery & Vitek, 1998; Ito & Vitek, 2001; Woodward & Rao, 2002; Ventelon & Willaime, 2007; Gröger *et al.*, 2008b; Woodward *et al.*, 2008) pour les métaux et (Koizumi *et al.*, 2000; Pizzagalli *et al.*, 2003; Pizzagalli &

Beauchamp, 2004) pour le silicium pour un exposé complet de ces méthodes. Cette technique a été peu utilisée pour modéliser les dislocations dans les minéraux : les zeolites (Walker *et al.*, 2004) ou la forsterite (Walker *et al.*, 2005a,b; Carrez *et al.*, 2008). Ce type de calcul nécessite la construction de cellules de simulation possédant un nombre important d'atomes pour une bonne description du coeur de la dislocation.

Pour contourner les problèmes liés aux cellules de simulation, nous proposons de rechercher la structure de coeur de la dislocation avec le modèle de Peierls-Nabarro. Ce modèle est essentiellement basé sur un équilibre entre des forces élastiques agissant loin du coeur de la dislocation et des forces de désaccord contenues dans le plan de glissement de la dislocation. Ces forces de désaccord sont obtenues pour toutes les classes de matériaux à partir du calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées qui requiert de petites cellules de simulation. Le modèle de Peierls-Nabarro fut appliqué pour l'étude des dislocations dans différents types de matériaux, notamment les métaux : *Ni* (Szelestey *et al.*, 2003), *Pd* (von Sydow *et al.*, 1999), *Pd* et *Al* (Hartford *et al.*, 1998), les alliages : *TiAl* et *CuAu* (Mryasov *et al.*, 1998), le silicium (Joós *et al.*, 1994) et plus récemment les minéraux tel que le periclase *MgO* (Miranda & Scandolo, 2005; Carrez *et al.*, 2009), la ringwoodite (Carrez *et al.*, 2007b), la forsterite (Durinck *et al.*, 2007) et les perovskites Ferré *et al.* (2007); Ferré *et al.* (2009).

Comme nous l'avons rappelé précédemment, la déformation plastique est assurée, dans la plupart des cas, par le mouvement des dislocations. Ces dislocations se mettent à glisser dans leur plan de glissement lorsque la contrainte appliquée est supérieure ou égale à la friction qu'exerce le réseau cristallin contre le glissement des dislocations. Cette friction qu'exerce le réseau cristallin est représentée par la contrainte de Peierls  $\sigma_p$  qui en fait une mesure de la contrainte nécessaire pour franchir les barrières énergétiques franchies par la dislocation en mouvement à une température de 0K. Le calcul de cette contrainte est possible sur les structures de coeurs de dislocations déterminées par calcul direct mais également déterminées avec le modèle de Peierls-Nabarro.

Ce chapitre bibliographique se décomposera en trois parties. Dans un premier temps, nous aborderons la détermination de la structure de coeur des dislocations avec un modèle inspiré des idées originales de Peierls et Nabarro. Nous débuterons par la description du modèle unidimensionnel où nous donnerons une démonstration de l'équation de Peierls-Nabarro par minimisation de l'énergie totale d'une dislocation. Nous aborderons également la détermination de la contrainte de Peierls avec cette formulation. Dans la seconde partie, nous discuterons des limites et des améliorations de ce modèle unidimensionnel, notamment de sa généralisation à plusieurs dimensions.

Ce chapitre se terminera par la présentation du modèle de Peierls-Nabarro combiné aux éléments diffus de Galerkin. Cette méthode, proche d'une résolution par éléments finis, nous sera utile pour décrire des structures de coeurs de dislocations complexes, tels que des dislocations dissociées avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ou bien des dislocations étalées dans plusieurs plans de glissement.

## 1.1 Le modèle unidimensionnel

La théorie élastique des dislocations permet de décrire la distorsion engendrée par l'introduction du défaut dans le milieu qui le contient. Les champs de déformation et de contrainte divergent au centre du défaut et un autre niveau de description est nécessaire pour représenter le coeur de la dislocation. En 1940, Peierls (1940) décrit une dislocation planaire comme un équilibre entre des forces inélastiques agissant le long du plan de glissement du défaut et des forces élastiques contenues dans le reste du cristal. En 1946, Nabarro complète et corrige le modèle initial de Peierls (Nabarro, 1947). La description de la dislocation est alors la solution d'une équation : l'équation de Peierls-Nabarro dont la solution s'acquitte de la discontinuité des champs au coeur du défaut. Nous donnons ici une démonstration de cette équation basée sur la minimisation de l'énergie totale d'une dislocation contenue dans un cristal.

### 1.1.1 Positionnement du problème

Nous donnons la démonstration de l'équation de Peierls-Nabarro dans le cas d'une dislocation coin. La démonstration est similaire quel que soit le caractère de la dislocation. On associe un repère  $(xyz)$  à un cristal parfait. On place la ligne de la dislocation suivant l'axe  $z$  et le vecteur de Burgers  $b$  dans la direction  $x$  (figure (1.2)). Nous cisailons maintenant ce cristal d'une valeur  $b/2$  dans la direction du vecteur de Burgers, dans le plan  $(x0z)$ . On appelle  $f(x)$  le désaccord suivant l'axe  $x$  entre un atome  $n$  de la partie inférieure et son atome voisin dans la partie supérieure de part et d'autre du plan de cisaillement. Initialement, nous avons  $f(x) = +b/2$  lorsque  $x > 0$  et  $-b/2$  pour  $x < 0$ . Les atomes, de part et d'autre du plan de glissement, se déplacent d'une quantité  $u(x)$  pour raccorder les deux parties du cristal et pour former ainsi la dislocation. On obtient alors :

$$f(x) = 2u(x) - \frac{b}{2}; x < 0 \quad (1.1)$$

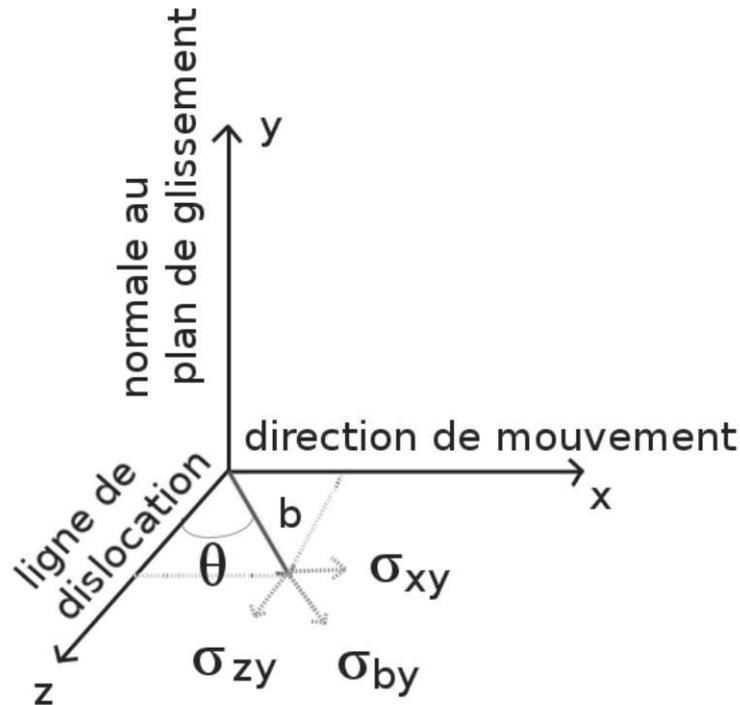


FIG 1.2 – Repère cartésien dans lequel la dislocation est reperée. La ligne de la dislocation est selon  $z$ , la normale au plan de glissement suivant  $y$  et la direction du mouvement de la dislocation suivant  $x$ . Le vecteur de Burgers  $b$  fait un angle  $\theta$  avec la ligne de dislocation.

$$f(x) = 2u(x) + \frac{b}{2}; x > 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{df(x)}{dx} = 2 \frac{du(x)}{dx} \quad (1.3)$$

Cette quantité  $u(x)$  varie de  $b/4$  en  $x = \pm\infty$  à 0 en  $x = 0$  : la fonction  $f(x)$  varie alors de 0 à  $b$ , le module du vecteur de Burgers. On néglige ici le déplacement perpendiculairement à la surface de glissement.

L'énergie totale de ce système est la somme de deux contributions :

- L'énergie élastique contenue dans le cristal due à la présence de la dislocation.
- Une contribution énergétique due au désaccord entre les deux demi-espaces élastiques de part et d'autre du plan de glissement et que nous appellerons énergie de désaccord.

### 1.1.2 L'énergie élastique

L'énergie élastique stockée dans les deux demi espaces élastiques de part et d'autre du plan de glissement est due à la présence de la dislocation qui déforme élastiquement les rangées atomiques. Dans le modèle de Peierls-Nabarro, la dislocation de vecteur de Burgers  $b$  est remplacée par une

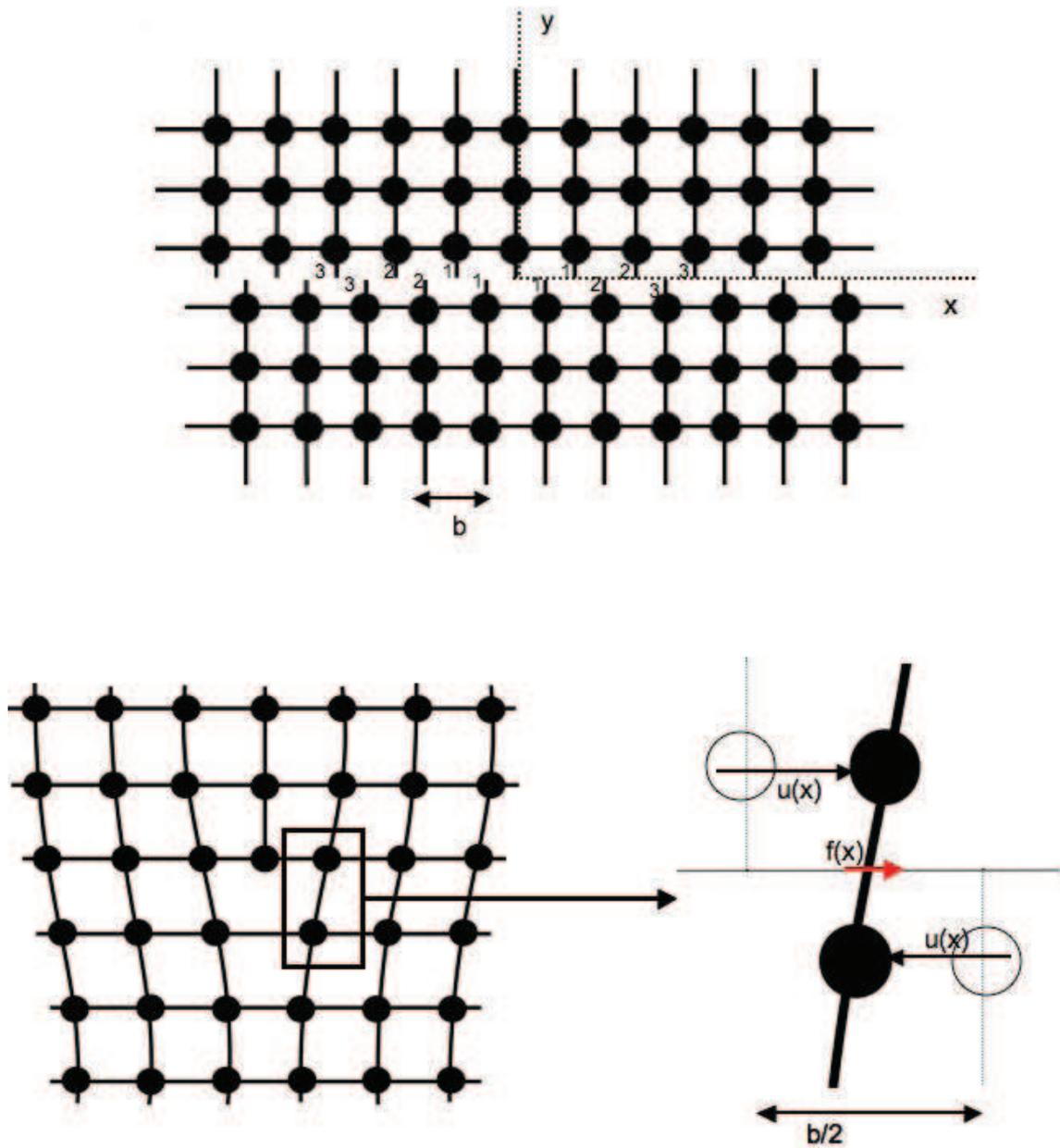


FIG 1.3 – Position du problème dans le cas d’une dislocation coin : au début (en haut) les plans atomiques d’un cristal parfait sont séparés d’une distance  $b/2$ . La relaxation élastique des positions atomiques conduit à la figure en bas à gauche : la formation d’une dislocation coin. La figure en bas à droite présente le déplacement  $u(x)$  et la quantité de cisaillement  $f(x)$ .

distribution de dislocation infinitésimale de vecteur de Burgers  $db$ . Ces dislocations infinitésimales sont définies comme le gradient local du désaccord  $f(x)$  et donnent, en un point  $x'$  (Eshelby, 1949) :

$$db(x') = \left( \frac{df(x)}{dx} \right)_{x=x'} dx' = \rho(x') dx' \quad (1.4)$$

où  $\rho(x)$  est aussi appelée la densité locale de dislocation. La somme de ces vecteurs de Burgers infinitésimaux doit être égale à  $b$ , ce qui entraîne la condition de normalisation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df}{dx'} dx' = b \quad (1.5)$$

Ces dislocations infinitésimales interagissent élastiquement entre elles. Ainsi, une dislocation infinitésimale située en  $x'$  produit une contrainte en tout point du cristal. La théorie élastique des dislocations dans un milieu isotrope donne l'expression de cette contrainte. Pour un point  $x$  situé sur le plan de glissement ( $y=0$ ), la contrainte induite par les dislocations infinitésimales situées en  $x'$  s'écrit pour une dislocation quelconque :

$$\sigma_{xy}(x, 0) = \frac{K}{2\pi} \int_0^b \frac{db(x')}{x - x'} \quad (1.6)$$

où  $K$  est le coefficient énergétique de la dislocation. En élasticité isotrope, ce coefficient est égal à :

$$K = \mu(\cos^2\theta + \frac{1}{1-\nu}\sin^2\theta) \quad (1.7)$$

avec  $\theta$ , l'angle entre la ligne et le vecteur de Burgers,  $\mu$  le module de cisaillement et  $\nu$ , le coefficient de Poisson. En élasticité anisotrope,  $K$  est une fonction complexe de constantes élastiques et de l'orientation de la ligne par rapport au vecteur de Burgers.

On donne le travail élémentaire par unité de surface pour créer la dislocation infinitésimale :

$$dW_{\text{élastique}} = \sigma_{by}.dl \quad (1.8)$$

Ici, le déplacement  $dl$  est le déplacement effectué par la rangée atomique pour passer de sa position dans le cristal parfait à sa position au voisinage de la dislocation ce qui correspond à la quantité  $u(x)$ . On obtient alors pour le travail élémentaire  $dW_{\text{élastique}}$  :

$$\begin{aligned}
dW_{\text{élastique}} &= \frac{K}{2\pi} \int_0^b \frac{db(x')}{x-x'} u(x) \\
&= \frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{df}{dx'} dx'}{x-x'} u(x)
\end{aligned} \tag{1.9}$$

On peut alors déterminer l'énergie élastique de l'ensemble du cristal :

$$U_{\text{élastique}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dW_{\text{élastique}} dx \tag{1.10}$$

$$= \frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{df}{dx'} dx'}{x-x'} u(x) dx \tag{1.11}$$

L'énergie élastique de la dislocation est finalement, en intégrant par parties la relation précédente et en utilisant la relation (1.3) :

$$U_{\text{élastique}} = -\frac{K}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df}{dx'} \frac{df}{dx} \ln|x-x'| dx dx' \tag{1.12}$$

### 1.1.3 L'énergie de désaccord

Contrairement à l'énergie élastique, l'énergie de désaccord ne peut pas être prédite par la théorie élastique des dislocations. Cette énergie doit mettre en évidence le coût du cisaillement des liaisons atomiques le long du plan de glissement de la dislocation. Dans le modèle initial de Peierls-Nabarro, cet accroissement d'énergie  $\gamma$  lié au cisaillement  $f(x)$  des liaisons est purement sinusoidal (modèle de Frenkel) :

$$\gamma(f(x)) = \frac{Kb}{2\pi d} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi f(x)}{b}\right)\right) \tag{1.13}$$

où  $K$  est le coefficient énergétique de la dislocation,  $b$  le vecteur de Burgers et  $d$  la distance interréticulaire. On peut maintenant définir l'énergie de désaccord  $U_{\text{désaccord}}$  sur l'ensemble du plan de glissement qui est la somme de toutes les contributions  $\gamma(f(x))$  et qui s'écrit :

$$U_{\text{désaccord}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x)) dx \tag{1.14}$$

### 1.1.4 L'équation de Peierls-Nabarro

L'énergie totale du système est la somme des deux contributions exposées précédemment.

$$U_{totale}[x, f(x), \frac{df}{dx}] = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x)) dx - \frac{K}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df}{dx} \frac{df}{dx'} \ln|x-x'| dx dx' \quad (1.15)$$

La minimisation de cette fonctionnelle donne la structure stable de la dislocation. Cependant, il faut tenir compte de la contrainte (1.5) en introduisant un multiplicateur de Lagrange  $\alpha$ . La fonctionnelle à minimiser devient :

$$F_{totale}[x, f(x), \frac{df}{dx}] = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x)) dx - \frac{K}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df}{dx} \frac{df}{dx'} \ln|x-x'| dx dx' + \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df}{dx} dx \quad (1.16)$$

On réduit alors ce problème à une fonctionnelle d'Euler-Lagrange, dont le minimum est l'équation de Peierls-Nabarro :

$$\frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df(x)}{dx} \frac{1}{x-x'} dx' = \frac{-d\gamma}{df} \quad (1.17)$$

L'étalement de la dislocation  $f(x)$  est solution de cette équation. A l'équilibre, les forces élastiques  $F^e(x) = \frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df(x)}{dx} \frac{1}{x-x'} dx'$  sont compensées par les forces de désaccord  $F_b(f(x)) = \frac{-d\gamma}{df}$

### 1.1.5 Résolution de l'équation de Peierls-Nabarro.

Dans le modèle initial de Peierls-Nabarro, l'énergie de désaccord  $\gamma$  est une fonction sinusoidale définie à l'équation (1.13) pour des matériaux cubiques simples, l'introduction de cette fonction dans l'équation (1.17) conduit à la solution analytique suivante pour l'étalement de la dislocation :

$$f(x) = \frac{b}{\pi} \arctan\left(\frac{x}{\zeta}\right) + \frac{b}{2} \quad (1.18)$$

où  $\zeta = \frac{Kb}{4\pi\tau_{max}}$  peut être vue comme la demi-largeur de la dislocation. Ce paramètre  $\zeta$  permettra de quantifier la largeur du coeur de la dislocation. On utilise également la densité locale de dislocations  $\rho(x)$  pour quantifier l'étalement du coeur de la dislocation :

$$\rho(x) = \frac{df(x)}{dx} = \frac{b}{\pi} \frac{\zeta^2}{x^2 + \zeta^2} \quad (1.19)$$

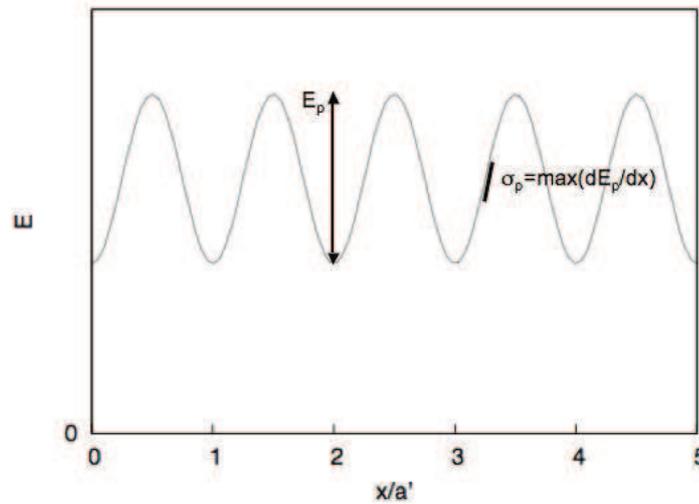


FIG 1.4 – Illustration de la variation de l'énergie de la dislocation en fonction de sa position  $x$  dans le cristal. Les définitions de l'énergie de Peierls  $E_p$  et de la contrainte de Peierls  $\sigma_p$  sont présentées.

### 1.1.6 L'énergie et la contrainte de Peierls

L'énergie de la dislocation, telle qu'elle a été définie dans l'équation (1.15), dépend de sa position  $x$  dans le cristal. Cette énergie a la même périodicité  $a'$  que le cristal dans la direction du mouvement de la ligne du défaut. Le mouvement de la dislocation s'effectue en franchissant des barrières d'énergie périodiques : l'énergie associée à ces barrières est l'énergie de Peierls  $E_p$  (cf. figure (1.4)). Peierls et Nabarro postulèrent que l'énergie élastique est constante au cours du déplacement de la dislocation. L'énergie de Peierls est alors uniquement due à la variation de l'énergie de désaccord de la dislocation. Leur modèle a été élaborée pour une distribution continue de plans atomiques. Or, ces plans atomiques se répartissent de manière discrète et il convient d'en tenir compte dans le terme  $U_{\text{désaccord}}$  (Hirth & Lothe, 1968).

$$U_{\text{désaccord}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x)) dx \rightarrow \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x_n)) \Delta x \quad (1.20)$$

$x_n$  doit correspondre à un déplacement réel de la dislocation et  $\Delta x$  à la distance entre deux plans. Si une dislocation est introduite à la position  $x'$ , les plans situés à une position  $na'$  dans la partie supérieure du cristal sont déplacés d'une quantité  $f(na' - x')$  par rapport aux plans situés dans la partie inférieure, d'où :

$$U_{\text{désaccord}}(x') = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \gamma(f(na' - x'))a' \quad (1.21)$$

Il existe une position  $x'$  pour laquelle cette énergie est maximale : on a alors atteint l'énergie de Peierls. On peut définir une contrainte à partir de la variation de l'énergie de désaccord sur la distance  $a'$ . La contrainte de Peierls  $\sigma_p$  est le maximum de cette quantité, c'est-à-dire la contrainte maximale pour franchir la barrière d'énergie périodique à 0K :

$$\sigma_p = \max\left(\frac{1}{b} \frac{dU_{\text{désaccord}}}{dx'}\right) = \max\left(\frac{1}{b} \frac{d(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \gamma(f(na' - x'))a')}{dx'}\right) \quad (1.22)$$

En utilisant les solutions analytiques (1.13) et (1.18) pour les fonctions  $\gamma$  et  $f$ , Cottrell (1953) a démontré la formule analytique suivante pour calculer la contrainte de Peierls à partir de l'équation (1.22) :

$$\sigma_p = 2Ke^{-\frac{4\pi\zeta}{b}} \quad (1.23)$$

où  $K$  est le coefficient énergétique de la dislocation et  $\zeta$ , la demi-largeur du coeur. Wang (1996), en changeant la façon de dénombrer les rangées atomiques, obtient la même formule que précédemment sans le facteur deux pré-exponentiel :

$$\sigma_p = Ke^{-\frac{4\pi\zeta}{b}} \quad (1.24)$$

Ces deux formulations de la contrainte de Peierls impliquent que les dislocations présentant des coeurs larges ressentiront moins la friction de réseau et seront plus mobiles.

En se basant sur la relation (1.22), Joós & Duesbery (1997) ont démontré les formules analytiques suivantes dans les cas où le coeur de la dislocation est très étalé dans sa vallée de Peierls ( $\zeta/a' \gg 1$ ) ou à l'inverse, très étroit ( $\zeta/a' \ll 1$ ) :

$$\sigma_p(\zeta/a' \gg 1) = \frac{Kb}{a'} e^{-\frac{2\pi\zeta}{a'}} \quad (1.25)$$

$$\sigma_p(\zeta/a' \ll 1) = \frac{3\sqrt{3}}{8} \tau_{max} \frac{a'}{\pi\zeta} \quad (1.26)$$

## 1.2 Détermination des structures de coeurs des dislocations et contraintes de Peierls pour les matériaux à cristallographie complexe.

Le modèle original développé par Peierls et Nabarro contraint l'énergie de désaccord à être purement sinusoidale (équation 1.13). Cette hypothèse est forte et ne permet pas de reproduire l'énergie d'excès engendrée par le cisaillement des liaisons atomiques dans la plupart des matériaux. Wang (1996) a calculé la contrainte de Peierls des dislocations coin en fonction du rapport distance interplanaire/module du vecteur de Burgers à partir de la formule (1.24) qui considère l'énergie de désaccord de la dislocation purement sinusoidale. Cette relation est appliquée à différents matériaux pour lesquels une comparaison est fournie vis-à-vis de contraintes de Peierls extrapolées à partir de données expérimentales. Si, dans le cas des dislocations coin, la figure de Wang (1996) (reproduite en 1.5) permet bien de reproduire une tendance générale, les écarts (au sein d'une même famille de matériaux, entre les vis et les coins,...) sont tels que cette approche perd toute capacité prédictive effective. Il est facile de voir dans cette carence la conséquence de l'hypothèse d'énergie de désaccord sinusoidale (que l'on pense aux cas où il existe une faute d'empilement stable). Cette limitation peut être dépassée en calculant les énergies de fautes d'empilement généralisées dans le plan cristallographique où glisse la dislocation. Ce calcul a été initialement proposé par Vitek (1968) afin d'identifier les fautes d'empilement stables dans les cristaux. Le plan de glissement est caractérisé par des vecteurs de base  $(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$ . La faute est obtenue en coupant le cristal dans ce plan et en déplaçant la partie supérieure par rapport à la partie inférieure d'un vecteur  $\vec{f}_V$  :

$$\vec{f}_V = x\vec{a}_1 + y\vec{a}_2; (0 \leq x \leq 1); (0 \leq y \leq 1) \quad (1.27)$$

L'énergie de cette faute d'empilement généralisée  $\gamma$  est alors :

$$\gamma(\vec{f}_V) = E(\vec{f}_V) - E_0 \quad (1.28)$$

où  $E(\vec{f}_V)$  est l'énergie du cristal cisailé du vecteur  $\vec{f}_V$  et  $E_0$  l'énergie du cristal parfait.

Christian et Vitek ont incorporé ces énergies de fautes d'empilement généralisées dans le modèle de Peierls-Nabarro (Christian & Vitek, 1970). Dans ce cas, le vecteur de faute  $\vec{f}_V$  du

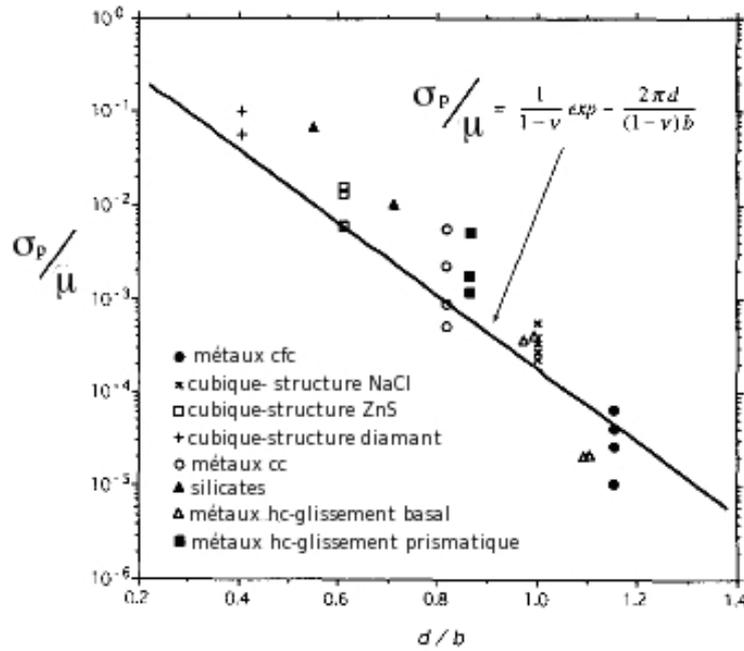


FIG 1.5 – Contraintes de Peierls normalisées par rapport au module de cisaillement  $\mu$  des dislocations coin ( $\nu=0,3$ ) en fonction du rapport distance interplanaire/module du vecteur de Burgers. Les points représentent les données expérimentales obtenues par différentes classes de matériaux. Image modifiée d'après Wang (1996).

calcul de Vitek correspond au désaccord entre les deux demi-espaces élastiques de part et d'autre du plan de glissement, c'est-à-dire, la fonction  $f$  définie dans la section (1.1.1) .

Dans le modèle unidimensionnel que nous décrivons, on ne s'intéresse qu'au cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers. Dans ce cas, il n'est pas nécessaire de déterminer une  $\gamma$ -*surface* mais une  $\gamma$ -*ligne* le long du vecteur de Burgers. Afin de simplifier nos calculs, nous ajusterons la fonction  $\gamma(f(x))$  sur une fonction mathématique. Nous développerons en série la solution du modèle de Frenkel (1.13) pour décrire la fonction  $\gamma$  :

$$\gamma(x) = \sum_i B_i \cos\left(\frac{2\pi i f(x)}{b}\right) \quad (1.29)$$

Ceci conduit à la force de désaccord  $F_b(f(x))$  suivante :

$$F_b(f(x)) = -\frac{d\gamma}{df} = \sum_i A_i \sin\left(\frac{2\pi i f(x)}{b}\right) \quad (1.30)$$

L'introduction de cette force de désaccord  $F_b(f(x))$  ne permet plus l'utilisation de la solution analytique  $f(x)$  de l'équation de Peierls-Nabarro (équation 1.18). Cette solution analytique ne met pas en évidence des structures de coeurs complexes ainsi que d'éventuelles dissociations

des dislocations avec des vecteurs de Burgers colinéaires séparés par une faute d'empilement. Plusieurs solutions ont été développées pour adapter la solution  $f(x)$  aux matériaux de basse symétrie (Kroupa & Lejček, 1972; Hartford *et al.*, 1998; Yan *et al.*, 2004).

Dans le cadre de nos simulations, nous utilisons la formulation proposée par Joós *et al.* (1994). La solution analytique (équation 1.18) de l'étalement de la dislocation  $f(x)$  est développée en série de  $N$  étalements de dislocations fractionnaires  $i$  :

$$f(x) = \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \arctan\left(\frac{x - x_i}{\zeta_i}\right) + \frac{b}{2} \quad (1.31)$$

où  $\alpha_i$ ,  $x_i$  et  $c_i$  sont des constantes variationnelles. La densité de dislocations  $\rho(x)$  est donnée par :

$$\rho(x) = \frac{df(x)}{dx} = \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{c_i}{(x - x_i)^2 + c_i^2} \quad (1.32)$$

La densité locale de dislocations  $\rho(x)$  doit satisfaire à la condition (1.5), ce qui implique la contrainte suivante sur les coefficients  $\alpha_i$  :

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1 \quad (1.33)$$

En substituant la densité locale de dislocations (1.32) dans le terme de gauche de l'équation de Peierls-Nabarro (1.17), on obtient la force liée à l'élasticité  $F^e(x)$  de la dislocation :

$$F^e(x) = \frac{Kb}{2\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{x - x_i}{(x - x_i)^2 + c_i^2} \quad (1.34)$$

Les constantes  $\alpha_i$ ,  $x_i$  et  $c_i$  sont déterminées par une minimisation par moindres carrées de la différence entre la force élastique  $F^e(x)$  et la force de désaccord  $F_b(x)$  calculée à partir des énergies de fautes d'empilement généralisées (équation 1.30). Une valeur de  $N = 3 * M$  avec  $M$  le nombre de dislocations partielles ( $M=1$  lorsque la dislocation est non-dissociée) assure une bonne description de la structure de coeur de la dislocation (Joós *et al.*, 1994; Carrez *et al.*, 2006).

### 1.2.1 Calcul de la contrainte de Peierls

La formule analytique (1.23) n'est plus applicable pour calculer la contrainte de Peierls si on utilise le concept des énergies de fautes d'empilement généralisées pour déterminer l'énergie de désaccord de la dislocation. Nous utiliserons donc la formulation initiale (équation 1.22) basée sur le maximum de la dérivée de la somme de l'énergie de fautes d'empilement généralisées sur l'étalement de la dislocation. Cette équation est dépendante du paramètre  $a'$ , la périodicité de la vallée de Peierls de la dislocation. On pourrait choisir la périodicité de la vallée comme le paramètre de maille dans la direction du mouvement de la ligne de dislocation. Ce cas fonctionne pour les matériaux polyatomiques de basse symétrie où seule une translation de réseau permet à la dislocation de retrouver sa même configuration stable (Friedel, 1964). Dans le cas d'un matériau à haute symétrie, il faut vérifier si la dislocation n'adopte pas sa configuration stable pour une position inférieure au paramètre de maille de la direction du mouvement.

Dans le cas des oxydes que nous allons étudier, il faudra faire attention à la périodicité de la vallée de Peierls choisie. Cette périodicité dépendra des atomes en présence mais également du groupe d'espace de nos cristaux.

### 1.3 Limites du modèle unidimensionnel.

L'approche développée jusqu'à présent jette les bases d'une description planaire des coeurs de dislocation avec un modèle de Peierls-Nabarro pour des caractères de dislocations indépendants. Cependant, ce modèle reste incomplet pour décrire des dislocations plus complexes. Plusieurs revues de ces carences sont disponibles dans la littérature, notamment les revues de Schoeck (2005) et Lu (2005). Ces auteurs ont relevé les points suivants :

- Tout d'abord, la détermination de la structure de coeur de la dislocation avec le modèle de Peierls-Nabarro peut entraîner des erreurs sur des dislocations présentant des coeurs étroits. Les structures de coeurs issues de ce modèle correspondent à une approximation sur le déplacement local des atomes. En effet, les énergies de fautes d'empilement généralisées sont calculées en imposant un cisaillement de la maille cristalline complète. Si on considère un cristal polyatomique présentant des rangées atomiques de natures chimiques différentes et que le déplacement local des atomes dans la dislocation n'affecte qu'une seule de ces rangées, l'énergie de désaccord de la dislocation, calculée à partir des énergies de fautes d'empilement généralisées, est irréaliste. Dans ce cas, on peut se poser la question de la

validité de la formule (1.26) qui permet de calculer la contrainte de Peierls dans le cas d'une dislocation présentant un coeur étroit.

- Le modèle unidimensionnel ne traite que chaque caractère de la dislocation vis, coin ou mixte séparément. Dans les cristaux, les dislocations peuvent présenter différents caractères en même temps. De plus, cette formulation du modèle ne permet pas de mettre en évidence les dissociations des dislocations avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires. Ces dissociations sont essentielles pour la plasticité des métaux cubiques à faces centrées où les dislocations de vecteurs de Burgers  $\frac{1}{2} \langle 101 \rangle$  se dissocient en deux dislocations partielles  $\frac{1}{6} \langle 211 \rangle$  (Hirth & Lothe, 1968).

Schoeck (1994) proposa une méthode pour traiter cet aspect. Il généralisa le modèle de Peierls-Nabarro planaire à deux dimensions. Cette généralisation permet de déterminer l'étalement des composantes vis et coin de la dislocation en même temps. Les interactions entre ces deux composantes peuvent être traitées en utilisant la formulation anisotrope de ce modèle. Une généralisation à deux dimensions permet également d'étudier les dissociations des dislocations avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires. Ici, le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées est étendu au plan de glissement de la dislocation, comme dans le calcul initial de Vitek (1968).

On utilise la figure (1.2) pour décrire la formulation de Schoeck du modèle de Peierls-Nabarro. On pose dans un repère (xyz), la ligne de la dislocation suivant  $z$  dans le plan ( $x0z$ ). La structure de la dislocation est connue par la détermination de  $f_x$  et  $f_z$ , les quantités de cisaillement dans les directions  $x$  et  $z$  du plan de glissement. La fonctionnelle de l'énergie (1.15) est maintenant donnée par :

$$E_{totale} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx dx'}{x - x'} \begin{bmatrix} f_x(x) \\ 0 \\ f_z(x) \end{bmatrix} \bar{\bar{K}} \begin{bmatrix} \frac{df_x(x)}{dx} \\ 0 \\ \frac{df_z(x)}{dx} \end{bmatrix} + \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f_x(x), f_z(x)) dx \quad (1.35)$$

et la condition de normalisation (1.5) devient :

$$b = \begin{bmatrix} b_x \\ 0 \\ b_z \end{bmatrix} = \int_{-\infty}^{+\infty} \begin{bmatrix} \frac{df_x}{dx} \\ 0 \\ \frac{df_z}{dx} \end{bmatrix} \quad (1.36)$$

$\bar{\bar{K}}$  est la matrice des coefficients énergétiques de la dislocation calculée en élasticité aniso-

trope. Elle est diagonale dans le cas d'un matériau isotrope. Le traitement anisotrope de la dislocation est considéré par l'introduction du terme non-diagonal  $K_{xz}$ , terme d'interaction entre les composantes vis et coin de la dislocation. Si on se place dans les conditions de l'équation (1.35), ce terme non-diagonal est du type (Steeds, 1973) :

$$K_{xz} = \frac{Kb^2 - K_{xx}b_x^2 - K_{zz}b_z^2}{2b_x b_z} \quad (1.37)$$

$K$  étant le coefficient énergétique de la dislocation,  $K_{xx}$  celui de la composante coin et  $K_{zz}$  celui de la composante vis. L'utilisation de ce modèle a permis l'étude des dissociations planaires des dislocations de vecteurs de Burgers  $[1\bar{1}0]$  dans  $Ni_3Al$  (Schoeck *et al.*, 1998) et  $[10\bar{1}]$  dans  $TiAl$  (Schoeck *et al.*, 1999).

L'expression de la contrainte de Peierls telle qu'elle fut définie dans l'équation (1.22) repose exclusivement sur une sommation de l'énergie de désaccord. L'énergie élastique reste constante ce qui signifie que le coeur de la dislocation ne peut évoluer au cours de son déplacement. Cet aspect est pris en compte dans le modèle de Schoeck (Schoeck, 1999b,c) Ici, on déplace le centre de la dislocation d'un incrément  $t$  dans la vallée de Peierls. Cela revient à modifier l'énergie de désaccord :

$$\begin{aligned} U_{\text{désaccord}}(x) &\rightarrow U_{\text{désaccord}}(x+t) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x))dx &\rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x+t))dx \end{aligned} \quad (1.38)$$

On minimise à nouveau l'énergie totale (1.35) avec cette modification. On peut déterminer ainsi la variation de l'énergie totale sur une vallée de Peierls en tenant compte de la variation de l'énergie élastique. De cette façon, Schoeck a déterminé les contraintes de Peierls de la dislocation  $1/2[110](111)$  dans l'aluminium (Schoeck, 2001c), de la dislocation  $[111](011)$  dans  $NiAl$  (Schoeck, 2001b) et de la dislocation  $1/2[110](111)$  dans le palladium (Schoeck, 2001a).

- Le modèle original a été développé pour une distribution continue de plans atomiques. Or, dans un cristal réel, les plans se répartissent de manière discrète. Bulatov et Kaxiras ont établi un modèle semi-discret pour tenir compte de la discrétisation du réseau (Bulatov & Kaxiras, 1997). Les énergies élastique et de désaccord de la dislocation sont totalement discrétisées avec l'espacement des plans atomiques. Dans un cristal où chaque plan atomique se situe à une position  $x_i$ , la fonctionnelle de l'énergie (1.15) s'écrit :

$$U_{totale}[\delta_i] = K \sum_{ij} \chi_{ij} \rho_i \rho_j + \sum_i \gamma(\delta_i) \Delta x \quad (1.39)$$

où  $\chi_{ij}$  est une fonction de la position  $x_i$  de la dislocation élémentaire  $i$  et  $\rho_i = (\delta_i - \delta_{i-1})/(x_i - x_{i-1})$ . Ici,  $\rho_i$  est la densité de dislocation et  $\delta_i$  la quantité de cisaillement au point  $i$ . La position de la dislocation dans le cristal est donnée par la position du centre de masse de la distribution de cisaillement  $\bar{x}_0$  :

$$\bar{x}_0 = \int x' \frac{\rho_0(x')}{b} dx' \quad (1.40)$$

La barrière de Peierls est calculée en déplaçant le centre de masse  $\bar{x}_0$  de la dislocation à une nouvelle position  $x'$  et en minimisant une nouvelle fois la fonctionnelle (1.39). La barrière de Peierls est identifiée comme la différence entre le maximum et le minimum des énergies calculées pour des positions du centre de masse  $x'$  comprises entre  $\bar{x}_0$  et  $\bar{x}_0 + a'$ ,  $a'$  étant la périodicité de la vallée de Peierls.

Dans le modèle de Bulatov et Kaxiras, la contrainte de Peierls est calculée en ajoutant un terme de contrainte externe  $\tau$  à la fonctionnelle de l'énergie (1.39) :

$$E_{contrainte} = -\tau \sum_i \frac{x_i^2 - x_{i-1}^2}{2} \rho_i \quad (1.41)$$

On fait varier la contrainte externe  $\tau$  et on minimise l'énergie totale. On détermine la structure de coeur sous l'action d'une contrainte externe. La contrainte de Peierls est la valeur de  $\tau$  pour laquelle la fonctionnelle de l'énergie totale ne converge plus. Les structures de coeurs et les contraintes de Peierls de la dislocation  $1/2[110](111)$  dans l'aluminium ont été déterminées avec ce modèle (Lu *et al.*, 2000).

On peut comparer les méthodes proposées par Schoeck et par Bulatov et Kaxiras permettant de calculer la contrainte de Peierls tenant compte de la relaxation élastique du coeur de la dislocation en recoupant les informations disponibles dans la littérature sur la dislocation  $1/2[110](111)$  de l'aluminium. Le coeur de la dislocation est planaire dans ces deux modèles. Les énergies de fautes d'empilement généralisées sont calculées de la même manière et *ab initio*. Dans le cas du modèle de Schoeck, la contrainte de Peierls de la composante vis de cette dislocation vaut  $1,43 \text{meV} \cdot \text{\AA}^{-3}$  (Schoeck, 2001c) et  $1,6 \text{meV} \cdot \text{\AA}^{-3}$  dans

- le modèle semi-discret de Lu *et al.* (2000). Ces deux méthodes donnent des contraintes de Peierls similaires sur la dislocation vis  $1/2[110](111)$  de l'aluminium.
- Enfin, le modèle initial ne tient compte que de l'étalement de la dislocation dans son plan de glissement. On ne peut alors décrire correctement l'étalement des dislocations vis, susceptibles de se décomposer dans plusieurs plans de glissement à la fois. Une telle décomposition entraîne des structures tridimensionnelles des dislocations qui présentent une forte friction de réseau et sont donc peu mobiles (Vitek *et al.*, 1970; Vitek & Yamaguchi, 1981; Duesbery & Vitek, 1998). La première tentative d'une modélisation de dislocation non-planaire est attribuable à Lejček & Kroupa (1976). On considère dans ce modèle un étalement de la dislocation dans deux ou trois plans en zone. On associe une fonctionnelle du type (1.15) à chaque plan où la dislocation est étalée. Un terme d'interaction est ajouté entre ces fonctionnelles. On minimise ce système de fonctionnelles en gardant le vecteur de Burgers total constant. Dans une autre approche développée par Ngan (1997), les parties de la dislocation dans les différents plans n'interagissent plus élastiquement. L'étalement est supposé symétrique dans les mêmes plans cristallographiques. Une avancée significative a été effectuée par Lu *et al.* (2002, 2003) en ajoutant une interaction élastique à la fonctionnelle (1.39) entre les parties de la dislocation dans chaque plan où elle est étalée. Ce terme d'interaction est discret et est calculé en projetant la densité de dislocation d'un plan sur les autres et vice-versa. Les structures de coeurs non-planaires des dislocations  $1/2[110](111)$  de l'argent et de l'aluminium (Lu *et al.*, 2002, 2003) ont été déterminées avec ce modèle.

Pour tenir compte des imperfections du modèle initial, nous proposons d'utiliser la formulation du modèle de Peierls-Nabarro proposée par Denoual (Denoual, 2004, 2007). Ce modèle permet d'étudier les dissociations des dislocations avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ainsi que les étalements non-planaires des dislocations. Il se base sur une discrétisation du réseau, comme dans le modèle semi-discret de Bulatov et Kaxiras. Il utilise les concepts de mécanique des milieux continus ainsi que des techniques d'éléments finis (les éléments diffus de Galerkin) pour résoudre l'équation de Peierls-Nabarro.

## 1.4 Le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin

### 1.4.1 Structure de coeur

Dans cette formulation, l'équation de Peierls-Nabarro est résolue à l'aide des éléments diffus de Galerkin sur un volume contenant la dislocation. Cette dernière est introduite de manière abrupte dans le cristal et peut relaxer dans un ou plusieurs plans de glissement. Nous utilisons le code *Cod2ex* dans le cadre de nos simulations avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Ce code a été développé par les ingénieurs du CEA-DAM. Il permet de décrire les structures de coeurs de dislocations et de calculer les contraintes de Peierls pour des cristaux de symétrie supérieure à la symétrie orthorhombique.

On introduit une dislocation dans un plan  $S$  contenu dans un volume élastique  $V$ . On définit les deux champs suivant :

- un champ  $u$ , qui est le champ de déplacement en tout point de  $V$ .
- $f$ , l'extension du coeur de la dislocation dans la surface  $S$ .

Lorsqu'une dislocation est introduite dans le volume  $V$ , le champ de déformation totale  $\bar{\epsilon}$  s'écrit :

$$\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}^e + \bar{\epsilon}^{in} = \nabla u \quad (1.42)$$

où  $\bar{\epsilon}^e$  est la composante élastique du champ de déformation et  $\bar{\epsilon}^{in}$ , la composante inélastique. Cette dernière est le désaccord engendré dans le plan de glissement par la dislocation. On peut donc écrire, pour la surface  $S$ , de normale  $n$  :

$$\bar{\epsilon}^{in} = \frac{1}{2}(f \otimes n + n \otimes f)\delta_S = \bar{\Pi}.f \quad (1.43)$$

$\delta_S$  est la fonction de Dirac associée à la surface  $S$ . En mécanique lagrangienne, le lagrangien d'un système est l'énergie cinétique à laquelle on soustrait l'énergie potentielle :

$$L = E_{cin} - E_{pot} \quad (1.44)$$

L'énergie cinétique est liée à la variation temporelle du champ de déplacement  $u$  :

$$E_{cin} = \frac{1}{2} \int_V d\dot{u}^2 dV \quad (1.45)$$

avec  $d$ , la densité du matériau. Dans ce modèle, l'énergie potentielle est la somme de l'énergie élastique et de l'énergie de désaccord. Ces deux énergies ont pour expressions :

$$\begin{aligned} E_{elastique} &= \frac{1}{2} \int_V \bar{\epsilon}^e : \bar{\bar{C}} : \bar{\epsilon}^e dV \\ &= \frac{1}{2} \int_V [\nabla u - \bar{\Pi}.f] : \bar{\bar{C}} : [\nabla u - \bar{\Pi}.f] \end{aligned} \quad (1.46)$$

$$E_{desaccord} = \int_S E^{isf}[f] dS \quad (1.47)$$

Ici,  $\bar{\bar{C}}$  est le tenseur des constantes élastiques et  $E^{isf}[f]$ , l'énergie de fautes d'empilement généralisées inélastique. Cette énergie est l'énergie de fautes d'empilement généralisées à laquelle on a retiré la composante élastique, contenue maintenant dans le terme  $E_{elastique}$ . Le lagrangien à minimiser est alors la fonctionnelle suivante :

$$-L(u, f) = \int_V \frac{1}{2} [\nabla u - \bar{\Pi}.f] : \bar{\bar{C}} : [\nabla u - \bar{\Pi}.f] - \frac{1}{2} d\dot{u}^2 dV + \int_S E^{isf}[f] dS \quad (1.48)$$

Dans le formalisme de ce modèle, le champ  $f$  évolue selon un mécanisme de relaxation visqueuse du type "Time-dependent Ginzburg-Landau", utilisé dans les techniques de champs de phase :

$$\dot{f} = \frac{1}{\zeta} \frac{\partial L}{\partial f} \quad (1.49)$$

avec  $\zeta$ , la viscosité du plan de glissement de la dislocation. Le champ  $u$  doit minimiser le lagrangien (1.48), c'est-à-dire :

$$\frac{\partial L}{\partial u} = 0 \quad (1.50)$$

Ces deux dernières expressions conduisent au système d'équations à résoudre :

$$-div[\bar{\bar{C}} : (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^{in})] + d\ddot{u} = 0 \quad (1.51)$$

$$\zeta \dot{f} + (\bar{\epsilon} - \bar{\epsilon}^{in}) : \bar{\bar{C}} : \bar{\Pi} - \nabla E^{isf} = 0 \quad (1.52)$$

La résolution de ce système ne peut être faite analytiquement. On utilise ici la technique des éléments diffus de Galerkin, proche d'une résolution par éléments finis. On décrit alors un maillage sur le volume  $V$  et la surface  $S$ . Les champs totaux  $u$  et  $f$  sont des combinaisons linéaires de ces champs calculés en chaque point  $i$  du maillage :

$$\begin{aligned} u &= \sum_{i=1}^n A_i u_i \\ f &= \sum_{i=1}^n B_i f_i \end{aligned} \quad (1.53)$$

Pratiquement, le maillage du volume  $V$  est calqué sur la structure cristalline. Cette dernière est reproduite par l'introduction des surfaces  $S$  où est calculée l'énergie de désaccord. Un exemple de construction de maillage est donné sur la figure (1.6) pour l'étude de la dislocation vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans le tantale (structure cubique centrée). Sur la maille cristalline, on dessine les plans où nous calculons les énergies de fautes d'empilement généralisées qui correspondent aux surfaces  $S$ . On reproduit ensuite cette géométrie sur une représentation nodale. Sur la figure (1.6), les noeuds verts concentrent l'énergie de désaccord et les noeuds violets, l'énergie élastique. La dislocation est introduite dans le volume  $V$  en créant une marche : le volume est cisailé du vecteur de Burgers de manière rigide et la relaxation, en accord avec le système d'équations (1.51), donne la structure de coeur de la dislocation. La vitesse de relaxation est contrôlée par un paramètre appelé la viscosité du plan de glissement  $\zeta$ . Ce paramètre est choisi entre  $10^4$  et  $10^7$  et assure la convergence des calculs (Denoual, 2007). On utilise également des conditions aux limites de solide infini dans nos simulations. La dislocation est considérée infinie dans la direction de sa ligne : l'épaisseur du maillage dans cette direction est limitée à un noeud. On impose également le champ de déplacement élastique de la dislocation aux bords de la boîte de simulation.

Cette formulation de l'équation de Peierls-Nabarro combiné avec les éléments diffus de Galerkin a été utilisée pour déterminer la structure de coeur de la dislocation coin  $1/2[110](111)$  dans l'aluminium (Denoual, 2004). Cet exemple d'application donne une bonne description de la structure de coeur, proche de la solution donnée par un modèle de Peierls-Nabarro classique (Hartford *et al.*, 1998) et d'un modèle généralisé à deux dimensions (Schoeck, 2001c)(figure (1.7)). De même, le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin permet de reproduire la structure de la dislocation vis  $1/2[111]$  dans les métaux cubiques centrés (Denoual, 2007). L'étalement non-planaire de cette dislocation vis dans le tantale a été reproduit avec ce modèle et donne la même structure

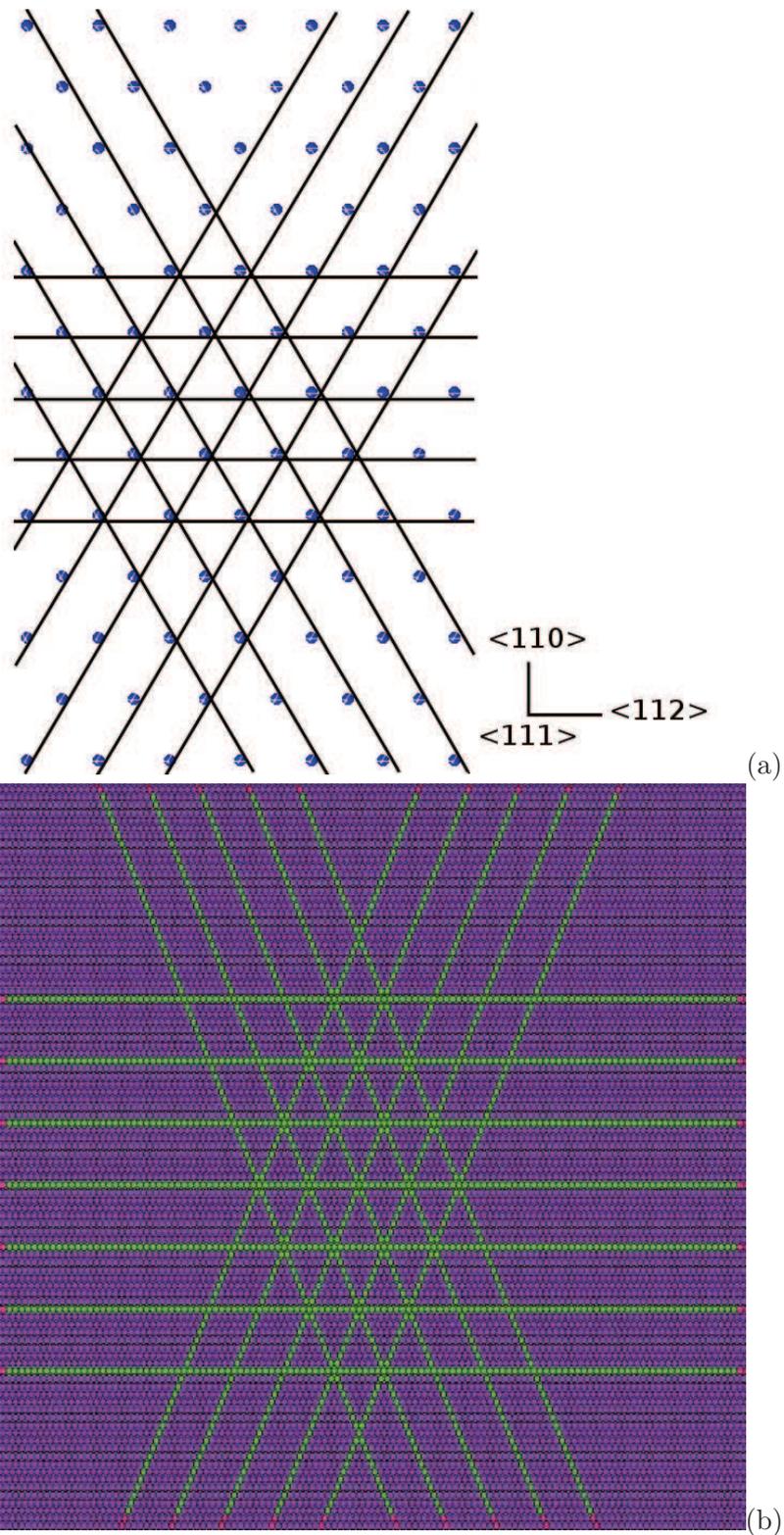


FIG 1.6 – Construction d'un maillage. On place les plans d'énergies de fautes d'empilement généralisées sur la structure cristalline (a). On reproduit ce motif sur une représentation nodale (b). Les surfaces  $S$  où sont calculées les énergies de fautes d'empilement sont mises en évidence. L'énergie élastique est calculée sur les autres noeuds.

que celle calculée par Ito & Vitek (2001) par simulation directe de la structure de coeur (figure (1.8)).

### 1.4.2 Détermination de la contrainte de Peierls dans le formalisme du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.

Nous présentons une méthode pour calculer la contrainte de Peierls dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. On définit un cercle autour de la ligne de la dislocation. En élasticité isotrope, la circulation du champ de contrainte engendrée par la dislocation est nulle sur ce cercle, quelle que soit la composante du champ de contraintes :

$$\frac{1}{2\pi} \oint_{\theta} \sigma_{ij} d\theta = 0 \quad (1.54)$$

Cette relation permettra de quantifier la contrainte de Peierls  $\sigma_p$  à partir de la déformation de la cellule de simulation. On déforme le volume  $V$  par petits incréments de temps  $t$ . A chaque instant, on assure la relaxation du coeur de la dislocation. Ainsi, on tiendra compte de la variation de l'énergie élastique sur le calcul de la contrainte de Peierls. La contrainte subie par le volume  $V$  est maintenant la somme de la contrainte engendrée par la dislocation et de la contrainte engendrée par la déformation extérieure. Ces contraintes s'exercent évidemment sur le cercle lié au volume  $V$  que nous avons défini. Pour de faibles déformations, nous sommes dans un régime élastique. Le champ de contrainte engendrée par la dislocation n'évolue pas : le cercle subit uniquement la contrainte due à la déformation extérieure. Lorsque la dislocation quitte son centre, la circulation du champ de contrainte n'est plus nulle et on observe une rupture de pente sur la courbe  $\sigma = f(t)$ . La contrainte totale créant cette discontinuité est la contrainte de Peierls. La figure (1.9) schématise le calcul de la contrainte de Peierls avec cette technique.

Le calcul de la contrainte de Peierls dans le formalisme du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin n'est possible que si le maillage que nous construisons possède des surfaces de glissement  $S$  non-parallèles au plan de glissement. Ces surfaces non-parallèles permettent de reproduire la périodicité du cristal. De cette façon, on introduit le paramètre  $a'$ , la périodicité de la vallée de Peierls. Lorsque la symétrie du cristal ne nous permet pas d'introduire des plans de glissements non-parallèles, les simulations effectuées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin seront limitées à la détermination de la structure de coeur de la dislocation.

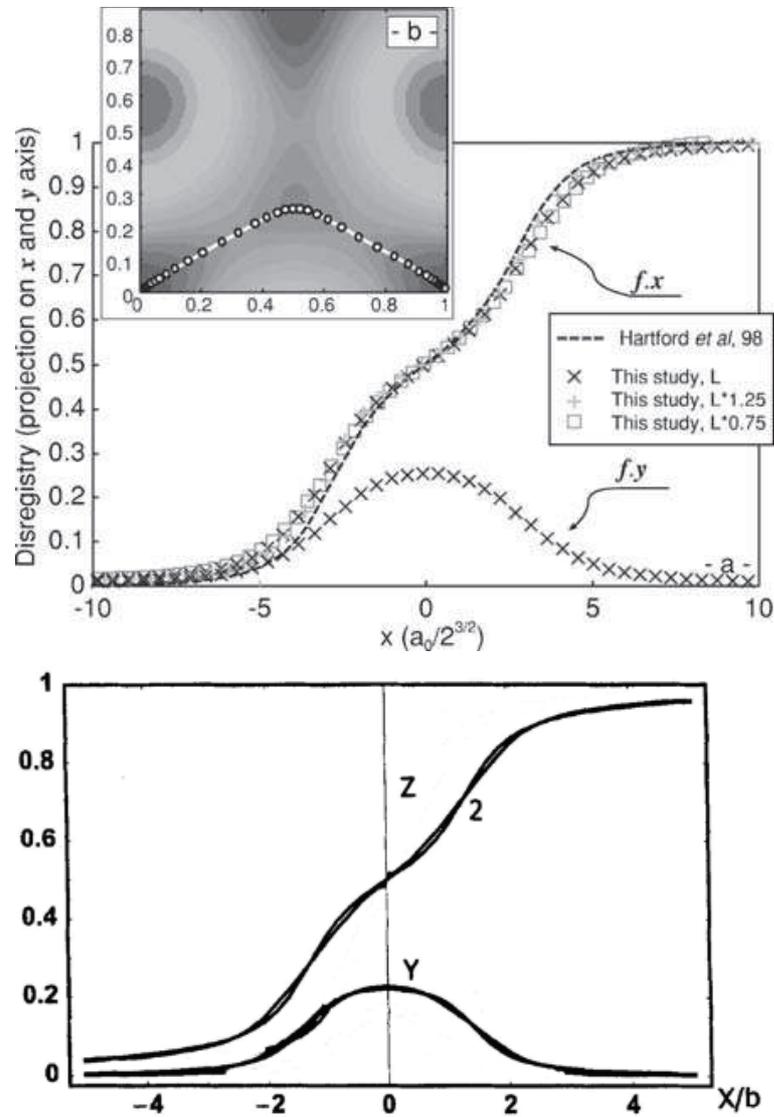


FIG 1.7 – Structure de coeur de la dislocation coin  $1/2[110](111)$  dans l'aluminium. En haut, le résultat obtenu par Denoual (2004). Sur cette figure, le paramètre  $L$  est la largeur de la boîte de simulation. On représente également la repartition du cisaillement sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (111). En bas, les fonctions de cisaillement vis (Y) et coin (Z) obtenues par Schoeck sur cette même dislocation avec le modèle de Peierls-Nabarro généralisé qu'il a développé (Schoeck, 2001c).

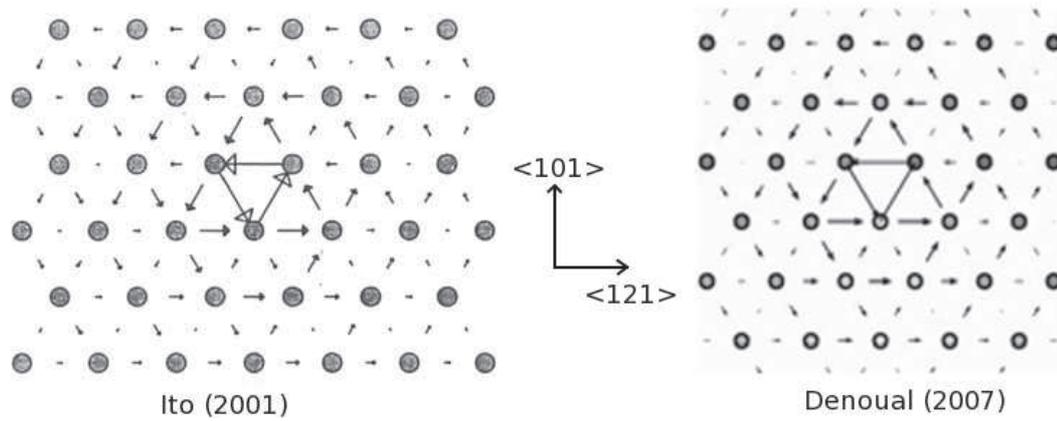


FIG 1.8 – Structure de coeur de la dislocation vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans le tantale obtenue par Ito & Vitek (2001) et par Denoual (2007). Les flèches représentent le déplacement relatif entre atomes voisins par rapport à leurs positions dans le cristal parfait.

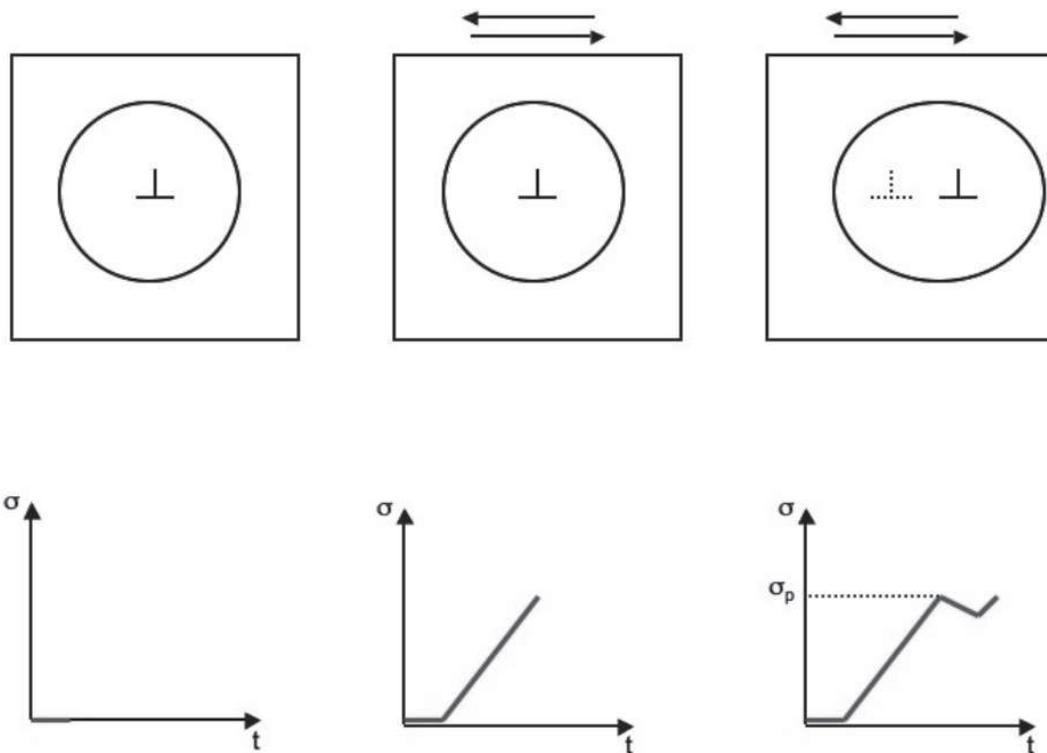


FIG 1.9 – Représentation schématique de la méthode de calcul de la contrainte de Peierls dans le formalisme du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Au départ (figure de gauche), la circulation du champ de contrainte total est nulle sur un cercle autour de la dislocation. On reste dans un régime élastique pour des déformations faibles sur la boîte de simulation, ce qui se traduit par un chargement linéaire sur le volume (Au centre). Enfin, le départ de la dislocation de son centre casse la linéarité de la courbe : la contrainte associée est la contrainte de Peierls.

## 1.5 Conclusion

Les améliorations successives apportées au modèle de Peierls-Nabarro permettent à présent de déterminer les structures de coeurs de dislocations complexes ainsi que leurs contraintes de Peierls. Nous avons vu que l'énergie de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  est le paramètre-clé pour l'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro. Cette énergie contrôle aussi bien la structure de coeur que la mobilité de la dislocation. Dans le chapitre suivant, nous détaillerons le calcul de cette énergie.

## Chapitre 2

# Calculs des énergies de fautes d'empilement généralisées



Dans ce chapitre, nous décrivons la méthode de calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées. Cette énergie est une énergie d'excès liée au cisaillement du cristal. Les deux premières sections seront donc consacrées au calcul de l'énergie proprement dite. Nous exposerons les techniques dites *ab initio* et celles liées à l'utilisation de potentiels empiriques ajustés sur les propriétés thermodynamiques des solides. Nous présenterons enfin les cellules de simulation nécessaires au calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées.

## 2.1 Le calcul *ab initio*

L'énergie  $E$  d'un édifice atomique non-relativiste<sup>1</sup> contenant  $N$  noyaux positionnés en  $R_\alpha$  et  $M$  électrons positionnés en  $r_i$  peut être calculée en résolvant l'équation de Schrödinger (2.1). Dans cette équation,  $H$  est l'opérateur de Hamilton et  $\psi(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1, R_2, \dots, R_N)$  la fonction d'onde totale associée à toutes les particules :

$$H\psi(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1, R_2, \dots, R_N) = E\psi(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1, R_2, \dots, R_N) \quad (2.1)$$

Si on néglige le couplage spin-orbite, l'hamiltonien  $H$  de ce système est la somme des opérateurs énergie cinétique  $T_e$  des électrons et  $T_n$  des noyaux ainsi que des opérateurs énergie d'interactions  $V_{e-e}$ ,  $V_{e-n}$ ,  $V_{n-n}$  entre chaque particule.

$$H = T_n + T_e + V_{n-n} + V_{e-e} + V_{e-n} \quad (2.2)$$

En unités atomiques, cet hamiltonien s'écrit :

$$H = - \sum_{\alpha} \frac{1}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} - \sum_j \frac{1}{2} \Delta_j + \sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\beta} Z_{\alpha}}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} + \sum_{i > j} \frac{1}{|r_i - r_j|} - \sum_{\alpha, j} \frac{Z_{\alpha}}{|R_{\alpha} - r_j|} \quad (2.3)$$

où  $M_{\alpha}$ ,  $\Delta_x$  et  $Z_{\alpha}$  sont respectivement la masse de l'atome  $\alpha$ , le laplacien par rapport aux coordonnées de position de la particule  $x$  et la charge de l'atome  $\alpha$ . La fonction d'onde totale  $\psi(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1, R_2, \dots, R_N)$  est solution de l'équation de Schrödinger. Cependant, dans un solide, les nombres de particules  $M$  et  $N$  sont trop importants et il est exclu de résoudre l'équation

<sup>1</sup>Les effets relativistes apparaissent quand les électrons se déplacent à des vitesses proche de celle de la lumière. Ces effets sont à prendre en compte pour les atomes lourds : on considère qu'ils ne sont plus négligeables pour les atomes dont le numéro atomique dépasse celui du krypton ( $Z=36$ )

(2.1) analytiquement. Dans la suite de cette section, nous présenterons les principales approximations permettant de résoudre cette équation et conduisant au calcul dit *ab initio* des édifices atomiques.

### 2.1.1 De l'approximation adiabatique à la méthode Hartree-Fock

Cette première approximation fut proposée par Born et Oppenheimer en 1927 et consiste à fixer la position des noyaux au regard du mouvement des électrons. En effet, de part leur différence de masses, les électrons se déplacent beaucoup plus vite que les noyaux. De cette façon, on peut séparer le mouvement des noyaux et des électrons, ce qui se traduit par une décomposition de l'hamiltonien total  $H$  et de la fonction d'onde  $\psi$  :

$$H = H_N + H_e \quad (2.4)$$

$$H_N = - \sum_{\alpha} \frac{1}{2M_{\alpha}} \Delta_{\alpha} \quad (2.5)$$

$$H_e = - \sum_j \frac{1}{2} \Delta_j + \sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\beta} Z_{\alpha}}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} + \sum_{i > j} \frac{1}{|r_i - r_j|} - \sum_{\alpha, j} \frac{Z_{\alpha}}{|R_{\alpha} - r_j|} \quad (2.6)$$

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1, R_2, \dots, R_N) = \varphi_e(r_1, r_2, \dots, r_M, R_1^0, R_2^0, \dots, R_N^0) \Phi_N(R_1, R_2, \dots, R_N) \quad (2.7)$$

La fonction d'onde totale  $\psi$  est maintenant un produit d'une fonction d'onde électronique  $\varphi_e$  où les noyaux sont situés sur leur site cristallographique  $R_{\alpha}^0$  et d'une fonction d'onde nucléaire  $\Phi_N$ . En appliquant cette fonction d'onde à l'équation (2.4), on obtient deux équations indépendantes :

$$H_N \Phi_N = E_N \Phi_N \quad (2.8)$$

$$H_e \varphi_e = E_e \varphi_e \quad (2.9)$$

L'énergie totale est la somme des contributions électroniques et nucléaires :

$$E = E_N + E_e \quad (2.10)$$

La résolution de l'équation (2.8) donne le mouvement des noyaux qui vibrent autour de leurs positions d'équilibres. L'énergie associée à ces vibrations a pour expression :

$$E_N = \sum_s \omega_s (n_s + \frac{1}{2}) \quad (2.11)$$

Cette énergie est quantifiée en niveaux d'énergie  $s$ . Chaque niveau est peuplée de  $n_s$  pseudo-particules appelées phonons qui caractérisent les états possibles de vibration du cristal. L'existence de ces phonons est à l'origine des propriétés thermiques des solides et permet de rendre compte de la capacité calorifique. Expérimentalement, ce spectre de phonons est déterminé par la diffusion inélastique des neutrons.

L'énergie électronique est maintenant donnée par la résolution de l'équation aux valeurs propres suivante, les positions des noyaux  $R_\alpha^0$  étant fixes :

$$E_e = \varphi_e^*(r_1, r_2, \dots, r_M) H_e \varphi_e(r_1, r_2, \dots, r_M) \quad (2.12)$$

où

$$H_e = -\sum_j \frac{1}{2} \Delta_j - \sum_{\alpha, j} \frac{Z_\alpha}{|R_\alpha^0 - r_j|} + \sum_{i>j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_{\alpha>\beta} \frac{Z_\beta Z_\alpha}{|R_\alpha^0 - R_\beta^0|} \quad (2.13)$$

$$= \sum_j (T_j + V_C(j)) + \sum_{i>j} V(i, j) + V_{n-n} \quad (2.14)$$

Cette énergie est composée de deux termes monoélectronique  $T_j$  et  $V_C(j)$  et d'un terme de couplage  $V(i, j)$  entre les électrons. Le terme d'interaction noyaux-noyaux est maintenant constant et n'apparaîtra plus dans la suite du calcul. Le terme de couplage  $V(i, j)$  ne permet pas une résolution simple de l'équation (2.12) et d'autres approximations sont alors nécessaires.

La première approximation est l'approximation de Hartree qui consiste à décomposer la fonction d'onde électronique totale  $\varphi_e(r_1, r_2, \dots, r_M)$  en un produit de fonctions d'ondes monoélectroniques associées à chaque particule :

$$\varphi_e(r_1, r_2, \dots, r_M) = \prod_{j=1}^M \varphi_j(r_j)$$

Avec cette fonction d'onde introduite dans l'équation de Schrödinger (2.12), l'électron  $i$  subit les interactions des autres électrons au travers du potentiel  $V_H$ , le potentiel de Hartree. Pour l'électron  $i$ , ce potentiel est donné par :

$$V_H = \sum_{i \neq j} \int \frac{|\varphi_j(r_j)|^2}{|r_i - r_j|} dr_j^3 \quad (2.15)$$

L'équation de Schrödinger (2.12) est ensuite résolue de manière auto-cohérente. La méthode de Hartree donne une valeur de l'énergie totale assez loin de la réalité. L'explication de ce décalage est l'unique dépendance spatiale de la fonction d'onde que l'on peut corriger en tenant compte du principe d'exclusion de Pauli : cette correction est apportée avec la méthode de Hartree-Fock. La fonction d'onde monoélectronique  $\psi_j$  est ici le produit d'une fonction d'onde spatiale, définie comme dans la méthode d'Hartree, et d'une fonction de spin  $\alpha_i(\xi_i)$ , où  $\xi_i$  est l'état de spin de l'électron  $i$

$$\psi_i(x_i) = \varphi_i(r_i)\alpha_i(\xi_i) \quad (2.16)$$

De cette façon, on peut écrire la fonction d'onde électronique totale sous la forme d'un déterminant appelé déterminant de Slater. Cette forme mathématique conserve l'antisymétrie sous l'effet d'une permutation de ses éléments, en accord avec le principe de Pauli :

$$\psi_e = \frac{1}{\sqrt{M!}} \begin{bmatrix} \psi_1(x_1) & \cdots & \cdots & \psi_M(x_1) \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ \psi_1(x_M) & \cdots & \cdots & \psi_M(x_M) \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

L'application de cette forme de fonction d'onde dans l'équation (2.12) donne l'énergie électronique du système :

$$E_e = \sum_j \int \psi_j^*(x_j)(T_j + V_C(j))\psi_j(x_j)d^3r_j + \sum_{i>j} \int \frac{\psi_i^*(x_i)\psi_j^*(x_j)\psi_i(x_i)\psi_j(x_j)}{|r_i - r_j|} d^3r_i d^3r_j \quad (2.18) \\ - \sum_{i>j} \int \frac{\psi_i^*(x_j)\psi_j^*(x_i)\psi_i(x_i)\psi_j(x_j)}{|r_i - r_j|} d^3r_i d^3r_j$$

Il apparaît un terme de Hartree  $E_H$  et un terme d'échange  $E_X$  purement quantique.

$$E_H = \sum_{i>j} \int \frac{\psi_i^*(x_i)\psi_j^*(x_j)\psi_i(x_i)\psi_j(x_j)}{|r_i - r_j|} d^3r_i d^3r_j \quad (2.19)$$

$$E_X = - \sum_{i>j} \int \frac{\psi_i^*(x_j)\psi_j^*(x_i)\psi_i(x_i)\psi_j(x_j)}{|r_i - r_j|} d^3r_i d^3r_j \quad (2.20)$$

L'énergie ainsi que la fonction d'onde totale  $\psi_e$  sont calculées de manière auto-cohérente, comme dans la méthode d'Hartree. La méthode de Hartree-Fock donne de manière assez précise la densité électronique et le volume du solide mais sous-estime les énergies de liaisons. La prise en compte d'un seul déterminant de Slater, qui ne décrit que les états fondamentaux, entraîne une différence entre l'énergie réelle du système et celle calculée avec la méthode de Hartree-Fock. Cette différence est appelée énergie de corrélation. Plusieurs méthodes existent pour tenir compte de cette énergie comme les méthodes des interactions de configuration ou dites de "coupled clusters". Ces techniques sont employées en chimie quantique pour l'étude de molécules mais sont coûteuses en temps de calcul. Dans le cas des solides, la théorie de la fonctionnelle de la densité permet de prendre en compte cette énergie de corrélation de manière plus pratique.

### 2.1.2 La théorie de la fonctionnelle de la densité

La théorie de la fonctionnelle de la densité est la méthode la plus couramment employée en physique du solide pour déterminer l'énergie d'un système quantique. Cette théorie se base sur les théorèmes de Hohenberg & Kohn (1964) :

**Théorème : 1** *La densité électronique  $\rho(r)$  détermine le potentiel dû aux noyaux.*

**Théorème : 2** *La densité électronique  $\rho(r)$  exacte fournit le minimum de l'énergie du solide.*

Ces théorèmes montrent que la fonction d'onde et l'énergie électronique sont des fonctionnelles de la densité électronique locale  $\rho(r)$ .

$$E = E[\rho] = T[\rho] + E_{e-n}[\rho] + E_H[\rho] + E_X[\rho] \quad (2.21)$$

Le terme le plus difficile à traiter est celui d'énergie cinétique  $T[\rho]$ . Cette énergie ne peut plus être calculée comme la somme des contributions de chaque électron. La méthode développée par Kohn & Sham (1965) permet de contourner ce problème.

### Les équations de Kohn et Sham

Dans cette méthode, on associe au système réel un système équivalent sans interactions. De cette façon, on introduit une énergie de corrélation qui correspond à la différence entre l'énergie cinétique du système réel et du système sans interaction. L'énergie totale s'écrit alors :

$$E[\rho] = T_s[\rho] + E_{e-n}[\rho] + E_H[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (2.22)$$

Dans cette équation,  $T_s[\rho]$  est l'énergie cinétique du système sans interactions et  $E_{XC}[\rho]$ , l'énergie d'échange et de corrélation. Tous les termes de cette équation sont parfaitement connus hormis le terme d'échange et de corrélation qui nécessite une approximation.

### L'approximation LDA

L'approximation LDA pour Local Density Approximation est l'approximation la plus simple pour le potentiel d'échange et de corrélation des équations de Kohn et Sham. Elle reprend les résultats obtenus pour un gaz d'électrons libres et donne l'expression suivante pour l'énergie d'échange et de corrélation :

$$E_{XC}[\rho] = \int \rho(r)(e_C + e_X)d^3r \quad (2.23)$$

La densité d'énergie d'échange  $e_X$  est calculée pour un gaz d'électrons libres :

$$e_X(\rho) = -\frac{3}{4/\pi}(3/\pi^2)^{\frac{1}{3}}\rho^{\frac{1}{3}} \quad (2.24)$$

On détermine l'expression de la densité d'énergie de corrélation  $e_C$  avec des méthodes Monte-Carlo. Les premiers résultats furent obtenus par Ceperley & Alder (1980) pour un gaz d'électrons libres de spins non-polarisés. Perdew & Wang (1992) ont ensuite généralisés les résultats en fonction de la polarisation de spins : cette approximation porte le nom de LSDA pour Local Spin Density Approximation.

### L'approximation GGA

L'approximation LDA mentionnée précédemment ne prend pas en compte la dépendance de la fonctionnelle d'échange avec la variation locale de la densité électronique. Cette dépendance

	LDA	GGA	Hartree-Fock	exp.
$E_{coh}(eV)$	11,817	10,045	7,27	10,4
$V_0(\text{\AA}^3)$	18,034	19,156	18,535	18,671

TABLE 2.1 – Comparaison entre le calcul de l'énergie de cohésion et du volume avec l'expérience pour MgO (structure NaCl) pour les approximations LDA, GGA et Hartree-Fock (données issues de Jaffe *et al.* (2000))

peut avoir un effet important sur l'énergie du solide. L'approximation LDA peut être corrigée en ajoutant un facteur  $F$  dépendant du gradient local de la densité électronique  $s$  :

$$E_{XC}[\rho] = \int \rho(r)F(s)(e_C + e_X)d^3r \quad (2.25)$$

avec :

$$s = \frac{|\nabla \rho|}{2(3\pi)^{\frac{1}{3}}\rho^{\frac{4}{3}}(r)} \quad (2.26)$$

Cette écriture pour l'énergie d'échange et de corrélation porte le nom d'approximation GGA et a été développée par Perdew *et al.* (Perdew *et al.*, 1992, 1996). D'autres formulations pour l'approximation GGA ont été écrites mais ne seront pas discutées dans ce manuscrit.

Le tableau (2.1) donne une comparaison entre les calculs réalisés avec l'approximation LDA, l'approximation GGA et la méthode Hartree-Fock avec les valeurs expérimentales de quelques propriétés physiques de MgO (structure NaCl). Comme on peut le constater, l'approximation LDA a tendance à surestimer les énergies de cohésion et à sous-estimer les volumes calculés. L'approximation GGA donne des énergies de cohésion plus proches des valeurs expérimentales tout en surestimant les volumes. On peut enfin noter que la méthode Hartree-Fock donne des volumes assez réalistes mais que l'énergie des solides est sous-estimée.

Dans le cadre de nos simulations, nous utilisons le package VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) développé par Kresse & Furthmüller (1996b,a). Les concepts de la théorie de la fonctionnelle de la densité y sont utilisés pour résoudre l'hamiltonien de Kohn et Sham monoélectronique. Nous utiliserons dans nos simulations l'approximation GGA pour décrire le potentiel d'échange et de corrélation. Cependant, la résolution de l'hamiltonien monoélectronique peut être facilitée par l'utilisation de la périodicité du cristal et des approximations sur les états électroniques de l'atome permettent de réduire le calcul.

### 2.1.3 Pratique du calcul *ab initio*

La résolution des équations de Kohn et Sham nécessite la connaissance de la densité électronique locale en tout point du cristal. Cependant, pour un solide, le nombre de particules est trop important et la fonction d'onde totale associée rend les équations de Kohn et Sham très coûteuses en temps de calcul. Des techniques furent alors développées pour réduire ce temps, notamment par l'utilisation des symétries et de la périodicité du cristal, ainsi que par des approximations sur les états électroniques du solide.

#### Utilisation de la symétrie et de la périodicité du cristal : le théorème de Bloch

Un cristal parfait est constitué d'un motif atomique se reproduisant dans toutes les directions de l'espace. La densité électronique, et donc la fonction d'onde totale, auront la même périodicité que le cristal (condition cyclique de Born-Von Karman). Bloch a alors formulé le théorème suivant :

**Théorème 1** *La fonction d'onde d'une particule soumise à un potentiel ayant la périodicité du réseau cristallin est du type :*

$$\psi = u(r)e^{ikr} \quad (2.27)$$

*La fonction d'onde totale est alors le produit d'une onde plane avec une fonction  $u(r)$  ayant la même périodicité que le cristal. Cette fonction peut s'écrire :*

$$u(r) = \sum_G C_G e^{iGr} \quad (2.28)$$

où  $G$  est un vecteur du réseau réciproque.

Le théorème de Bloch permet la réduction du calcul à la plus petite partie de l'espace réciproque : la première zone de Brillouin. La fonction  $u(r)$  doit être calculée de manière continue sur l'ensemble de cette zone. D'un point de vue pratique, il est impossible de calculer la fonction d'onde de cette façon et on ne calcule la fonction d'onde sur un nombre fini de points-k. Une méthode pratique fut développée par Monkhorst & Pack (1976) pour choisir un ensemble uniforme de points de calculs. Ces points ont pour coordonnées :

$$k = u_p \vec{b}_1 + u_q \vec{b}_2 + u_r \vec{b}_3 \quad (2.29)$$

où  $\vec{b}_1$ ,  $\vec{b}_2$  et  $\vec{b}_3$  sont les vecteurs de base dans l'espace réciproque. Les coefficients  $u_i$  sont données par la formule suivante :

$$u_i = \frac{2i - N_i - 1}{2N_i}, j = 1, 2, \dots, N_i \quad (2.30)$$

$N_i$  étant le nombre de points dans la direction  $u_i$ .

### Interactions électrons-ions

Nous venons de voir que nous pouvons limiter nos calculs à la première zone de Brillouin. Cependant, pour tenir compte de tous les états électroniques des atomes, une infinité d'ondes planes est nécessaire, notamment près du coeur où les variations de la fonction d'onde sont importantes. Pour contourner ce problème, on effectue une approximation dite du 'coeur gelé' où les états électroniques près du coeur sont fixes. Cette approximation est justifiée par le fait que les propriétés des solides dépendent en majeure partie des états des électrons de valence. Des méthodes existent pour tenir compte d'une fonction d'onde électronique totale comme la méthode PAW (Projector Augmented Wave), développée par Blöchl (1994). On peut alors décrire la fonction d'onde des atomes de coeur qui évolue très vite près du noyau. Une approximation de la méthode PAW consiste à remplacer le pseudo-potentiel déterminé par cette méthode par une fonction 'lisse' décrivant le potentiel ionique entre les électrons de valence et de coeur. On considère qu'au delà d'une valeur  $r_c$ , rayon de coupure, la fonction d'onde totale et la pseudo-fonction d'onde sont identiques. Une illustration de la construction d'un pseudo-potentiel est donnée en figure (2.1).

Enfin, au-delà de l'approximation des pseudo-potentiels, seules les ondes planes possédant un petit vecteur d'onde  $k$  contribuent de manière importante au calcul de l'énergie totale. On peut tronquer le nombre d'ondes planes avec la relation suivante :

$$\frac{1}{2}|\vec{k} + \vec{G}| < E_{coupure} \quad (2.31)$$

On choisit l'énergie de coupure  $E_{coupure}$  de telle sorte qu'une centaine d'ondes planes soit utilisée pour décrire un atome, ce nombre d'ondes planes donnant une description satisfaisante de l'atome.

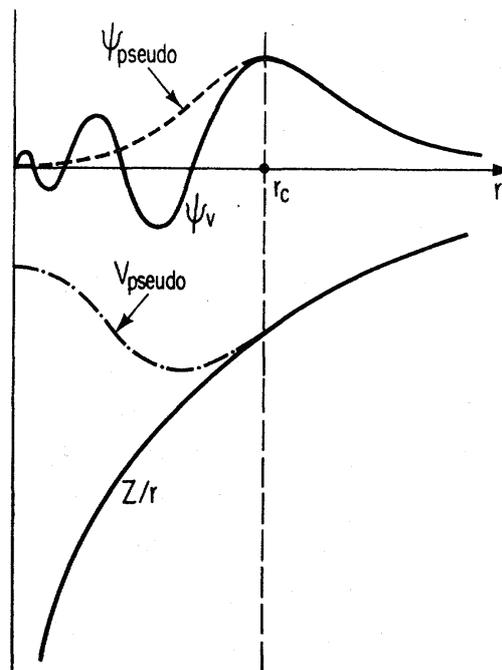


FIG 2.1 – Construction d'un pseudopotential. En dessous d'une valeur  $r_c$ , la pseudo-fonction d'onde et le potentiel ionique sont décrit par une fonction lisse. (Figure tirée de Payne *et al.* (1992))

#### 2.1.4 Convergence des calculs avec le code VASP

Avant d'effectuer les calculs *ab initio* avec le code VASP, nous devons choisir l'échantillonnage de la zone de Brillouin ainsi que l'énergie de coupure du pseudopotential qui nous assurera la convergence des calculs.

Nous avons testé l'influence de l'échantillonnage de la zone de Brillouin sur l'énergie du solide. La figure (2.2) montre l'évolution de l'énergie d'une maille de forsterite  $Mg_2SiO_4$  à 0GPa en fonction du nombre de points-k utilisés pour échantillonner la zone de Brillouin. Cette figure montre qu'une soixantaine de points-k assure la convergence des calculs quelque soit la valeur de l'énergie de coupure.

Nous utiliserons des pseudopotentials *UltraSoft* ou construits avec la méthode *PAW* dans nos simulations. Le tableau (2.2) présente les caractéristiques des pseudopotentials utilisés. Les données sont issues de la bibliothèque de potentiel fournie avec le code VASP

La documentation du code VASP préconise l'utilisation d'une énergie de coupure 1,5 fois plus élevée que l'énergie de coupure maximale des atomes. Dans le cas des oxydes que nous allons étudier, l'énergie de coupure est maximale pour l'atome d'oxygène et égale à 400eV. L'énergie de

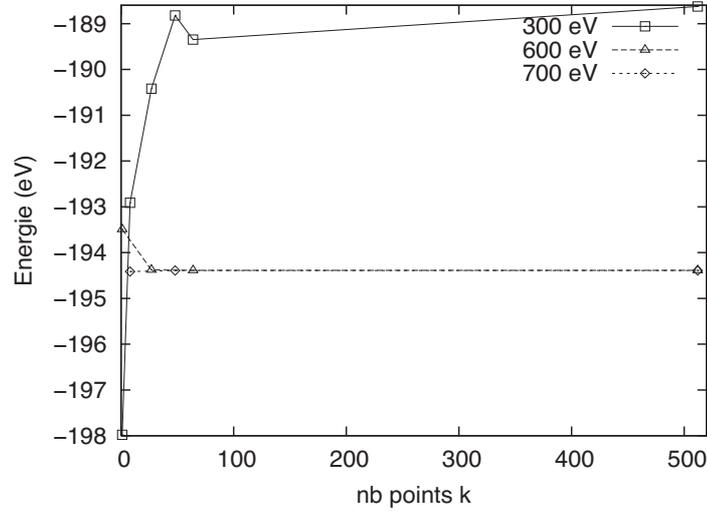


FIG 2.2 – Energie d’une maille de forsterite à 0GPa calculée *ab initio* en fonction du nombre de points-k utilisés pour échantillonner la zone de Brillouin pour différentes énergies de coupure sur les pseudopotentiels.

Elements	Configuration électronique fondamentale	configuration électronique du pseudopotentiel	Nombre d’électrons de valence considérés	Energie de coupure (eV)
Mg(PAW)	[Ne]3s <sup>2</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>0</sup>	2	210,083
Mg (US)	[Ne]3s <sup>2</sup>	p <sup>6</sup> s <sup>2</sup>	8	365,887
Ca (PAW)	[Ar]4s <sup>2</sup>	3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup> 4s <sup>2</sup>	10	290,424
O (PAW)	[Ar]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>4</sup>	6	400
O (US)	[Ar]2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>4</sup>	6	395,994
Ge (PAW)	[Ar]4s <sup>2</sup> 3d <sup>10</sup> 4p <sup>2</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>2</sup>	4	173,845
Ir (PAW)	[Xe]5s <sup>2</sup> 5p <sup>6</sup> 5d <sup>7</sup> 6s <sup>2</sup>	s <sup>1</sup> d <sup>8</sup>	9	210,865
Si (US)	[Ne]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>2</sup>	4	300,0
Si (PAW)	[Ne]2s <sup>2</sup> 2p <sup>2</sup>	s <sup>2</sup> p <sup>2</sup>	4	245,435

TAB 2.2 – Caractéristiques des pseudopotentiels utilisés provenant de la bibliothèque VASP.

coupure préconisée pour nos simulation sera alors égale à  $1,5 \times 400 = 600 \text{eV}$ . Nous avons vérifié la valeur de cette énergie de coupure à prendre. Nous avons calculé une nouvelle fois l'énergie d'une maille de forsterite à 0GPa pour différentes grilles de points-k mais en choisissant des énergies de coupure égales à 300, 600 et 700eV. Les résultats sont présentés sur la figure (2.2). Cette figure montre une convergence des calculs pour une énergie de coupure égale à 600 et 700eV. Nous choisirons  $E_{\text{coupure}}$  égale à 600eV, ce qui permet d'utiliser moins d'ondes planes que pour des calculs avec  $E_{\text{coupure}}$  égale à 700eV.

### Conclusion intermédiaire sur le calcul *ab initio*

Malgré les approximations présentés, les calculs *ab initio* nécessitent un temps de calcul non-négligeable pour des cellules de simulation de l'ordre d'une centaine d'atomes. Si on s'intéresse à une propriété thermodynamique précise, une alternative possible est le calcul par potentiels empiriques.

## 2.2 Le calcul par potentiels empiriques

Dans un potentiel empirique, la liaison atomique est modélisé par des fonctions mathématiques simples. Ainsi, le temps de calcul est réduit et permet d'utiliser de grandes cellules de simulations, pouvant dépasser le millier d'atomes. Comme pour le calcul *ab initio*, l'énergie totale  $U$  d'un édifice atomique peut être calculée comme la somme de toutes les interactions entre les  $N$  atomes le composant. On peut écrire cette énergie sous la forme d'une série :

$$U = \sum_{i=1}^N U_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U_{ij} + \frac{1}{6} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N U_{ijk} + \dots \quad (2.32)$$

Le premier terme est l'énergie propre de l'atome  $i$ . Le second terme représente l'énergie d'interactions entre deux atomes  $i$  et  $j$  etc.... D'une manière générale, cette série converge rapidement et permet de tronquer l'expression (2.32) au troisième ou au quatrième terme. L'origine de l'énergie sera prise comme l'énergie propre des atomes, le terme  $\sum_{i=1}^N U_i$  étant constant. Dans la suite de cette section, nous présentons les potentiels d'interactions entre deux et trois corps qui sont les termes significatifs dans le calcul de l'énergie totale du solide et que nous utiliserons lors de nos simulations. Beaucoup de potentiels ont été développés pour décrire les interactions dont les potentiels de Lennard-Jones ou de Morse pour les potentiels à deux corps ou les potentiels d'Axilrod-Teller ou d'Urey-Bradley pour les potentiels à trois corps. Dans le cas des silicates que

nous voulons étudier, nous utiliserons un potentiel de Buckingham pour décrire les interactions à deux corps et un potentiel à trois corps pour modéliser les répulsions entre liaisons  $Si - O$ .

Ces potentiels ont été implémentés dans le code GULP développé par Gale (1997) que nous utiliserons pour le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées par potentiels empiriques.

### 2.2.1 Les interactions à deux corps : le potentiel de Buckingham

Ce potentiel d'interaction doit prendre en compte les interactions coulombiennes à longue portée, la répulsion des nuages électroniques et l'attraction due aux forces de Van der Waals. Ceci s'exprime dans le potentiel suivant :

$$U_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + A \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) - \frac{C}{r_{ij}^6} \quad (2.33)$$

Dans cette équation,  $r_{ij}$  est la distance entre les atomes  $i$  et  $j$ . Les paramètres  $A$ ,  $\rho$  et  $C$  sont des constantes pour un type de liaison donnée. Ces constantes sont ajustés sur des valeurs expérimentales ou sur des calculs *ab initio* d'énergie de liaisons. En général, ces différentes constantes sont corrélées ce qui rend l'ajustement parfois difficile. Il a cependant été montré que la corrélation entre  $A$  et  $\rho$  pouvait être supprimée en calculant  $\rho$  séparément à partir de l'énergie d'ionisation des atomes (Urusov, 1995) :

$$\rho = \frac{1,85}{\sqrt{I_i} + \sqrt{I_j}} \quad (2.34)$$

où  $I_i$  et  $I_j$  sont les énergies d'ionisation des atomes  $i$  et  $j$ .

L'attraction de type Van der Waals  $U^{VdW}$  provient de l'interaction entre les moments dipolaires induits par les atomes. Elle peut se décomposer sous forme d'une série :

$$U_{ij}^{VdW} = -\frac{C}{r_{ij}^6} - \frac{D}{r_{ij}^8} - \frac{E}{r_{ij}^{10}} - \dots \quad (2.35)$$

Le premier terme est l'interaction dipole-dipole. Les termes suivants incluent les interactions dipole-quadrupole, quadrupole-quadrupole etc... Toutes ces interactions sont dues aux corrélations dynamiques entre les électrons mais seul le terme d'interaction dipole-dipole est significatif. Le

paramètre  $C$  peut alors être ajusté sur des données *ab initio* ou expérimentales mais peut également être calculé en utilisant les formules Slater-Kirkwood, ou de London, la plus couramment utilisée :

$$C = \frac{3}{2} \alpha_i \alpha_j \frac{I_i + I_j}{I_i I_j} \quad (2.36)$$

avec  $\alpha_i$  et  $\alpha_j$  sont les polarisabilités des atomes  $i$  et  $j$ .

### 2.2.2 Les interactions à trois corps

La plupart des potentiels utilisent des termes qui font intervenir plus de deux corps dans l'énergie totale décrite en (2.32) et il a été montré l'importance de prendre en compte des termes d'ordre supérieur dans l'étude des silicates (Sanders *et al.*, 1984; Vashishta *et al.*, 1990). Il s'agit ici de prendre en compte la répulsion entre deux liaisons atomiques  $Si-O$ . Cet effet peut prendre la forme suivante :

$$U_{ijk} = \frac{1}{2} k (\theta - \theta_0) \quad (2.37)$$

où  $k$  est une constante de force,  $\theta$  et  $\theta_0$  sont respectivement l'angle et l'angle théorique entre les atomes  $i$ ,  $j$  et  $k$ . Pour un tétraèdre,  $\theta_0$  vaut 109,47.

### 2.2.3 Polarisation

Une contribution importante à l'énergie totale d'un solide provient de la polarisation du cortège électronique avec son ion. La prise en compte de cette polarisation permet de décrire plus précisément les structures et l'élasticité des cristaux. Cet effet peut être modélisé en utilisant le "shell model" de Dick & Overhauser (1958). Dans ce cas, un atome est modélisé par un ion, constitué du noyau et des électrons de coeur, en interaction avec un "shell", particule sans masse et qui "imité" les électrons de valence. L'ion et le "shell" sont séparés d'une distance  $r_i$  et couplés par une constante de force élastique  $k_{sm}$ . La polarisabilité  $\alpha$  de l'ion de charge  $q$  est alors donnée par :

$$\alpha = \frac{q^2}{k_{sm}} \quad (2.38)$$

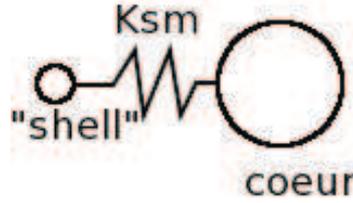


FIG 2.3 – Illustration du "shell model". Le coeur et les électrons de "valence" sont couplés par une constante de force  $K_{sm}$

et conduit à l'ajustement énergétique suivant :

$$U_i = \frac{1}{2} k_{sm} r_i^2 \quad (2.39)$$

Un raffinement de ce modèle, prenant en compte les interactions non-centrales entre l'ion et ses électrons de valence, s'appelle le "breathing shell model", développé par Schröder (1966).

L'utilisation de ce modèle est nécessaire avec les cristaux de haute symétrie tel que MgO (structure cubique) pour décrire correctement les propriétés élastiques et notamment la violation de la relation de Cauchy ( $C_{12} \neq C_{44}$ ).

#### 2.2.4 Optimisation des structures

Les paramètres du potentiel étant défini, il est maintenant possible de calculer l'énergie totale du solide. Cependant, les termes de l'expression (2.32) sont des termes de longue portée et peuvent poser problème pour une sommation sur un cristal infini. Dans ce cas, plusieurs techniques sont à notre disposition selon l'interaction considérée :

- La répulsion coulombienne  $\sum_{ij} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$ , est calculée en utilisant une sommation d'Ewald. Cette technique consiste à appliquer une transformation de Laplace qui sépare l'énergie coulombienne en deux sommes convergentes, une dans l'espace réel et l'autre dans l'espace réciproque.
- Pour les autres potentiels, de type Buckingham ou à trois corps, l'astuce consiste à tronquer le potentiel. Dans ce cas, on impose un rayon de coupure  $r_c$  à partir duquel les potentiels sont nuls. Il faut alors tester cette valeur  $r_c$  jusqu'à ce qu'elle n'entraîne qu'une très faible variation de l'énergie.

Enfin, la structure stable de l'édifice atomique est obtenue par minimisation de son énergie totale. Ceci peut être réalisé en utilisant des algorithmes de minimisation tels que l'algorithme

de gradients conjugués ou de Newton-Raphson.

Nous utilisons l'algorithme de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (Shanno, 1970) implémenté dans GULP pour relaxer nos structures calculées. Cet algorithme de minimisation est plus performant que l'algorithme de gradients conjugués ou de Newton-Raphson.

## 2.2.5 Présentation du potentiel empirique utilisé

Nous utiliserons un potentiel empirique nommé THB1 pour l'étude des polymorphes  $Mg_2SiO_4$  : la forsterite et de la wadsleyite ainsi que le diopside  $CaMgSi_2O_6$ . Ce potentiel est issu des travaux précurseurs de Sanders *et al.* (1984) et Lewis & Catlow (1985) sur les oxydes. Plusieurs applications de ce potentiel sont disponibles dans la littérature, notamment sur l'étude de défauts : les défauts ponctuels dans la forsterite et la wadsleyite (Wright & Catlow, 1994; Walker *et al.*, 2006) et le diopside (Gatzemeier & Wright, 2006), la diffusion de l'oxygène dans la forsterite (Walker *et al.*, 2003) ou encore les structures de coeur des dislocations à l'échelle atomique dans ce même minéral (Walker *et al.*, 2005b; Carrez *et al.*, 2008). Dans ce potentiel, on considère les interactions  $Si - O$ ,  $Mg - O$ ,  $Ca - O$  et  $O - O$  avec un potentiel de Buckingham. Un potentiel à trois corps  $Si - O - Si$  est ajouté pour conserver la structure des tétraèdres  $SiO_4$ . La charge des cations est égale à +2 pour le magnésium et le calcium et +4 pour le silicium. Par contre, nous utilisons un "shell model" pour décrire l'oxygène : le coeur de l'atome possède une charge égale à +0,85 qui est compensée par un shell de -2,85. Nous avons déterminé le rayon de coupure  $r_c$  à considérer en calculant l'énergie d'une maille cristalline de forsterite  $Mg_2SiO_4$  et de diopside  $CaMgSi_2O_6$ . La figure (2.4) montre le temps de calcul et l'énergie du solide en fonction du rayon de coupure utilisé. Nous voyons qu'il existe un minimum sur le temps de calcul en fonction du rayon de coupure alors que l'énergie du solide diminue. Nous choisirons le rayon de coupure entraînant le temps de calcul le plus faible, l'énergie ne variant quasiment plus après cette valeur (moins de  $0,01\text{eV}/\text{\AA}$ ). Nous choisissons une valeur de  $12\text{\AA}$  pour les polymorphes de  $Mg_2SiO_4$  et de  $14\text{\AA}$  pour le diopside. Les paramètres du potentiel sont donnés dans le tableau (2.3) et les équations correspondantes dans la section précédente.

Nous venons de voir comment calculer l'énergie d'un système atomique. Nous décrivons maintenant la méthode pour déterminer les énergies de fautes d'empilement généralisées à cette échelle.

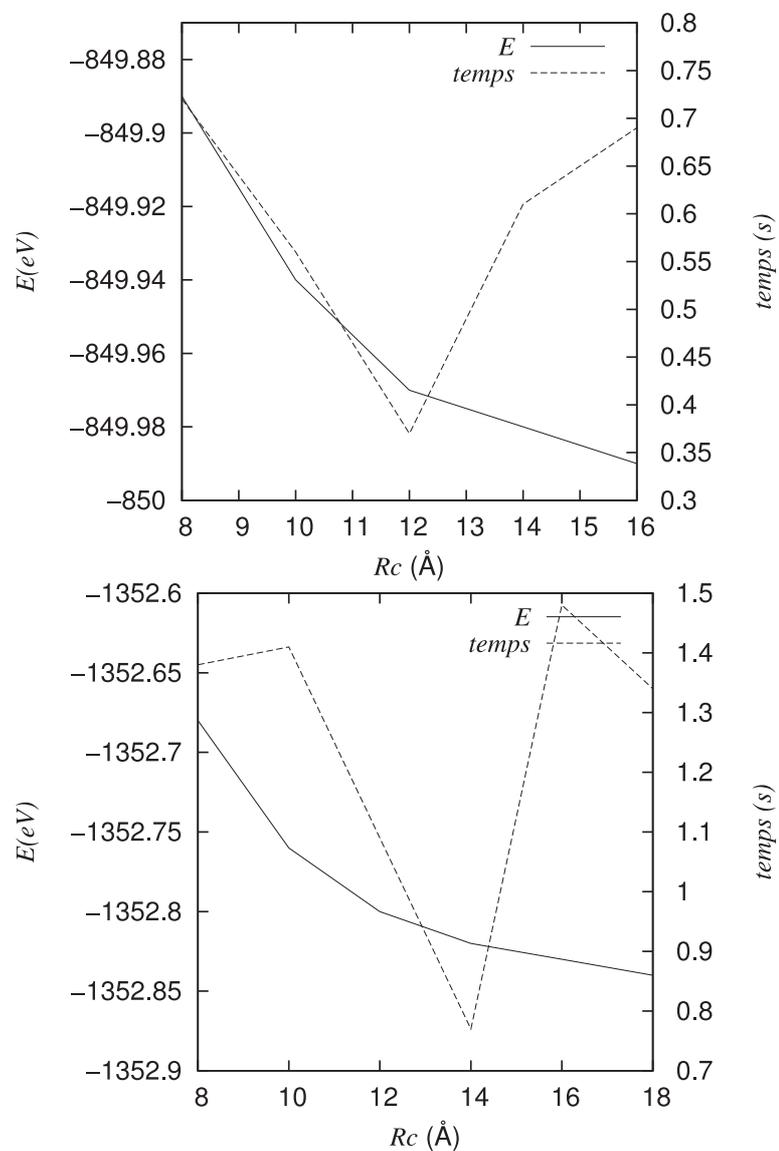


FIG 2.4 – Energie d'une maille (eV) de forsterite (en haut) et de diopside (en bas) et temps de calcul (s) en fonction du rayon de coupure utilisé. Les calculs ont été réalisés sur un processeur AMD Athlon 64Bits.

charges			
ions	core	shell	constante élastique core-shell (eV.Å <sup>-2</sup> )
Mg	2,0		
Ca	2,0		
Si	4,0		
O <sup>2-</sup>	0,84819	-2,84819	74,92038
Buckingham	A(eV)	$\rho$ (Å)	C(eV.Å <sup>-6</sup> )
Si-O <sup>2-</sup>	1283,90734	0,32052	10,66158
O <sup>2-</sup> -O <sup>2-</sup>	22764,0	0,149	27,88
Mg-O <sup>2-</sup>	1428,5	0,29453	0,0
Ca-O <sup>2-</sup>	1003,438	0,3391	0,0
3 corps	k(eV.rad <sup>-2</sup> )	$\theta$ (°)	
O <sup>2-</sup> -Si-O <sup>2-</sup>	2,09724	109,47	

TABLE 2.3 – Paramètres du potentiel THB1 utilisés dans nos simulations. Ces paramètres sont issus des travaux de Sanders *et al.* (1984) et Lewis & Catlow (1985). Les équations liées aux potentiels de Buckingham et à trois corps sont données dans le texte.

## 2.3 Techniques de calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées

Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 1, les énergies de fautes d'empilement généralisées sont des énergies d'excès liées au cisaillement plastique rigide du cristal et sont le point de départ pour l'application du modèle de Peierls-Nabarro. Deux méthodes seraient possibles. La première consiste à cisailier uniformément un cristal parfait dans la direction du cisaillement le long du plan de glissement. La seconde, à construire une supercellule formée de deux blocs glissant l'un sur l'autre le long d'un plan de glissement. Bulatov *et al.* (2006) ont montré que ces deux méthodes donnaient des résultats similaires sur les contraintes maximales qu'oppose le cristal au cisaillement plastique dans le cas des matériaux cubiques centrés. Cependant, même si ces deux méthodes donnent des contraintes maximales identiques, un cisaillement homogène ne permet pas de rendre compte de l'énergie de fautes d'empilement généralisées telle qu'elle a été définie au chapitre 1. En effet, l'énergie de fautes d'empilement généralisées doit refléter le désaccord entre plans atomiques le long du plan de glissement, ce qui n'est pas le cas du cisaillement homogène. Nous choisirons donc la méthode des blocs isolés glissant l'un sur l'autre. Cette

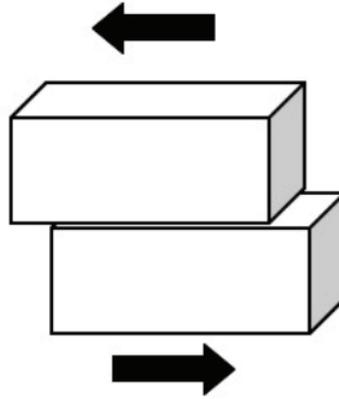


FIG 2.5 – Illustration de la méthode des deux blocs glissant l'un sur l'autre pour calculer les énergies de fautes d'empilement généralisées.

méthode est illustrée sur la figure (2.5). On applique les conditions aux limites périodiques dans les directions du plan de glissement. La supercellule est isolée dans la direction perpendiculaire à ce plan en ajoutant une couche de vide. L'épaisseur de vide nécessaire à isoler le défaut dépend de la technique choisie pour calculer l'énergie : une épaisseur de  $6 \text{ \AA}$  suffit dans le cas de calcul *ab initio* avec un rayon de coupure sur les énergies des ondes planes égale à 600eV (Durinck *et al.*, 2005b). Cette épaisseur de vide doit être supérieure au rayon de coupure des potentiels dans le cas du calcul avec des potentiels empiriques. Dans ce manuscrit, nous étudierons uniquement des oxydes dont les atomes possèdent deux (*Ca, Mg, O*) ou quatre (*Si, Ge, Ir*) électrons de valence. Nous choisissons un plan de coupure de tel sorte qu'il coupe le minimum de liaisons *atomes de valence 4- O*, très énergétiques (Durinck *et al.*, 2005a).

Pour illustrer ce qui vient d'être évoqué, on présente sur la figure (2.6) une supercellule utilisée pour le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées dans le cas de la forsterite.

Trois paramètres peuvent avoir un effet important sur la valeur de l'énergie de fautes d'empilement généralisées :

- Le premier paramètre est la relaxation des positions atomiques. Cai *et al.* (2002) ont montré l'importance de cette relaxation sur les valeurs de l'énergie. L'effet est plus important sur les énergies de fautes instables que sur les énergies de fautes stables. Une faute instable est caractérisée par un maximum global ou local de l'énergie alors qu'une faute stable est marquée par un minimum local. Les atomes en bords de boîte ne sont pas autorisés à relaxer pour éviter un déplacement des atomes dans la couche de vide. Nous choisissons la méthode décrite et testée dans Durinck (2005) pour calculer les énergies de fautes d'empilement

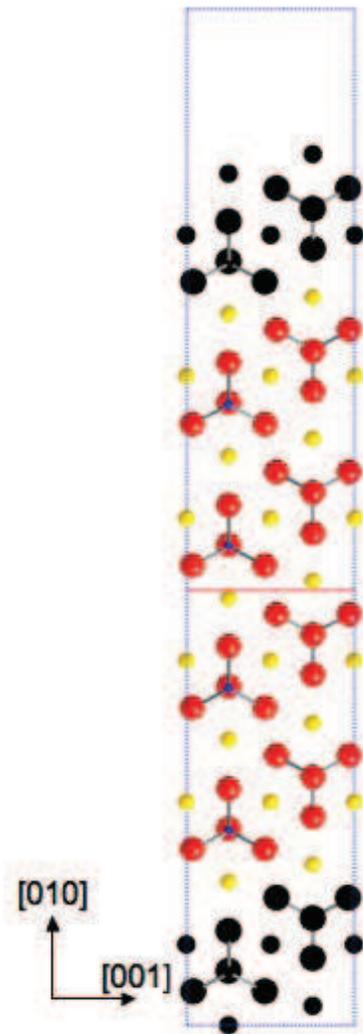


FIG 2.6 – Exemple d'une supercellule de simulation pour la forsterite. Les tétraèdres  $SiO_4$  et les atomes de Mg (en jaune) sont représentés. Les atomes noirs en bords de boîte ne sont pas autorisés à relaxer. Le plan de coupure (en rouge) ne coupe pas de liaison  $Si-O$

de la forsterite, de la wadsleyite et du diopside. La relaxation des positions atomiques des atomes de Si, Mg et Ca sera réalisée uniquement dans la direction perpendiculaire au plan de faute tandis que les atomes d'oxygène constituant les tétraèdres  $SiO_4$  sont libres. Pour l'étude des analogues de la phase post-perovskite  $MgSiO_3$ , tous les atomes sont autorisés à relaxer dans la direction perpendiculaire à la direction de cisaillement, dans et perpendiculairement au plan de faute. Nous avons pris ce choix particulier pour la relaxation des positions atomiques de façon à comparer directement les énergies de fautes d'empilement généralisées des analogues avec celles calculées par Carrez *et al.* (2007b) sur  $MgSiO_3$  post-perovskite.

- Le second paramètre est l'épaisseur de la cellule de simulation. Une cellule trop petite entraîne un accroissement de l'énergie de fautes car les atomes fixes en bord de boîte engendrent une contrainte ressentie par les atomes dans le plan de faute (Cai *et al.*, 2002). Une centaine d'atomes dans la boîte, ou 6 couches de tétraèdres dans notre cas, suffisent lors de calcul avec potentiel empirique (cf. figure (2.7)). Cet effet est moins marqué dans les calculs *ab initio* (figure (2.8)). Quelques dizaines d'atomes suffisent pour assurer la convergence du calcul.
- Enfin, la valeur de l'énergie dépend de la technique utilisée pour calculer l'énergie proprement dite. Les valeurs de l'énergie sont généralement plus importantes lors de calculs avec des potentiels empiriques que *ab initio*. Cet effet est présenté sur la figure (2.9) dans le cas de deux systèmes de glissement de la forsterite.

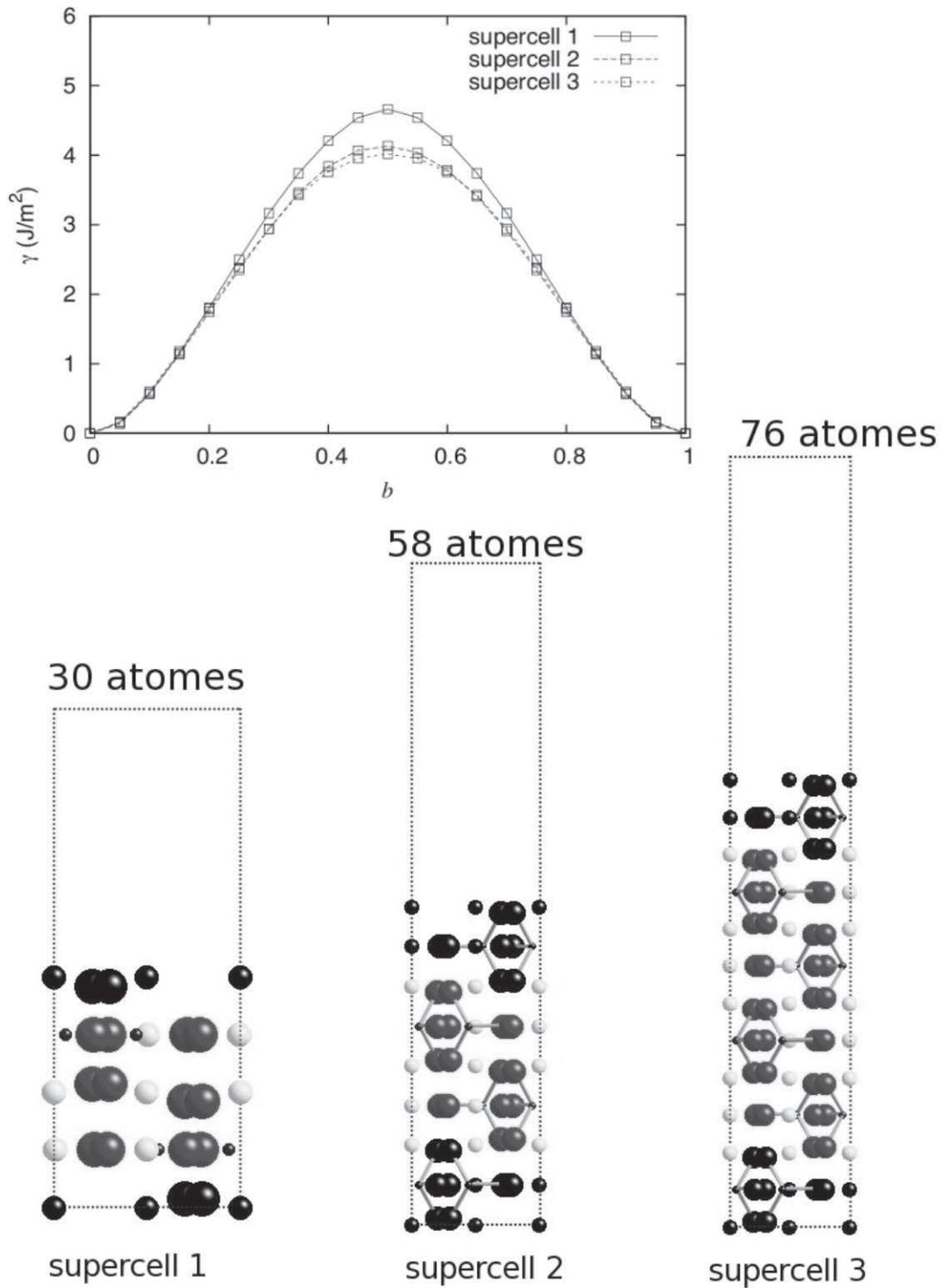


FIG 2.7 – Influence du nombre d'atomes dans la cellule sur l'énergie de fautes d'empilement généralisées calculées avec le potentiel empirique *THB1* pour le système [100](001) de la forsterite. Les atomes noirs sur la représentation de la supercellule ne sont pas autorisés à relaxer.

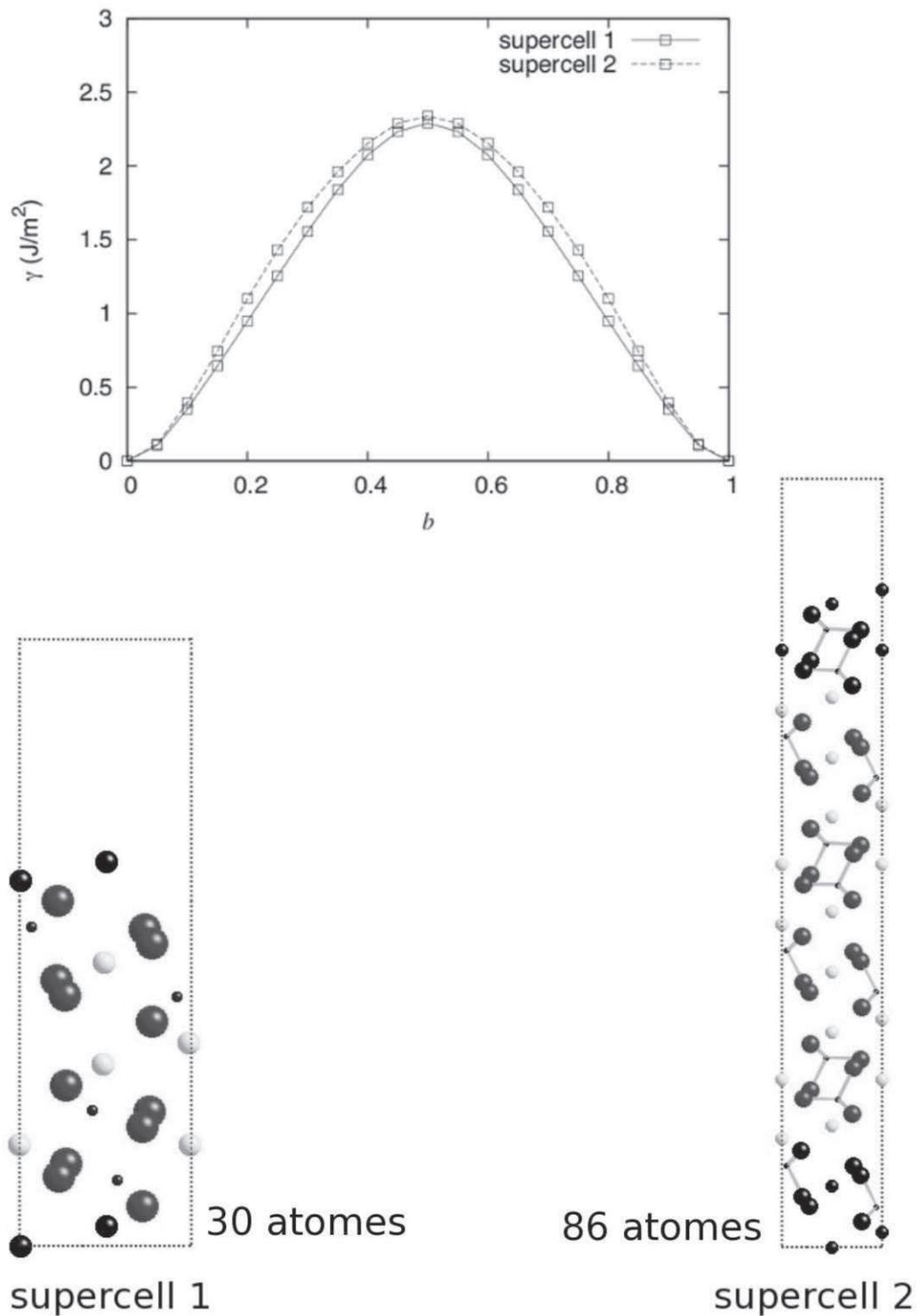


FIG 2.8 – Influence du nombre d'atomes dans la cellule sur l'énergie de fautes d'empilement généralisées calculées *ab initio* pour le système [100](010) de la forsterite. Les atomes noirs sur la représentation de la supercellule ne sont pas autorisés à relaxer.

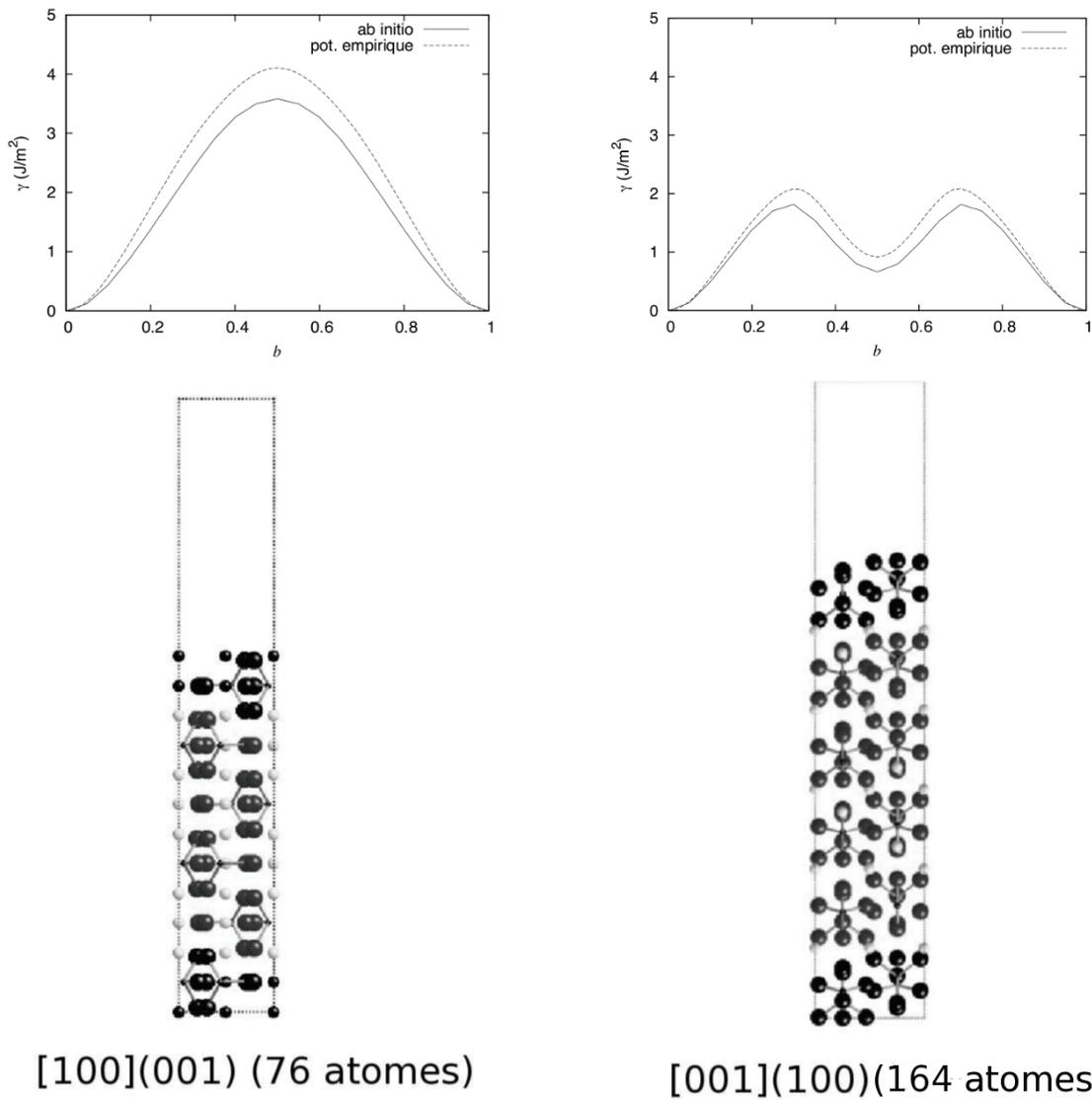


FIG 2.9 – Influence de la technique utilisée pour calculer les énergies de fautes d'empilement généralisées dans la forsterite. Les courbes représentent les énergies de fautes d'empilement généralisées pour les systèmes  $[100](001)$  (à gauche) et  $[001](100)$  (à droite). Sur les supercellules associées aux calculs des énergies de fautes, les atomes noirs ne sont pas autorisés à relaxer.

## Chapitre 3

# L'approche des analogues pour l'étude de la plasticité de la phase post-perovskite $MgSiO_3$

L'étude présentée dans ce chapitre a donné lieu à une publication dans *Physics of the Earth and Planetary Interiors* (Metsue *et al.*, 2009)



---

La couche D'', d'une épaisseur d'environ 300km au dessus de l'interface noyau-manteau, reste la partie la plus énigmatique du manteau terrestre. Les vitesses des ondes sismiques dans cette couche présentent des anomalies non décrites par le modèle PREM. La figure (3.1) montre les profils radiaux des vitesses des ondes  $V_P$  et  $V_S$  à l'aplomb de différents points du globe. La couche D'' présente des variations brutales des vitesses des ondes  $V_P$  et  $V_S$ , comme par exemple l'augmentation des vitesses des ondes de compression d'environ 2 à 3 % à l'aplomb de la Sibérie et du Pacifique. Ces observations sismologiques permettent de s'interroger sur la présence d'une transition de phase dans le manteau profond. Plusieurs tests, comme la décomposition de la perovskite  $MgSiO_3$  en oxydes simples  $MgO$  et  $SiO_2$  ou la transformation de la magnésio-wustite-structure NaCl en une structure type CsCl, ne sont pas concluants quant à l'explication de ces observations sismologiques (Sidorin *et al.*, 1999). En 2004, Murakami *et al.* mettent en évidence une transformation de phase de la perovskite  $MgSiO_3$ , le minéral majoritaire dans le manteau inférieur, en une phase 1,3 fois plus dense nommée post-perovskite (Murakami *et al.*, 2004). Cette transformation de la phase perovskite en post-perovskite a ensuite été confirmée expérimentalement et par des calculs *ab initio* (Oganov & Ono, 2004; Tsuchiya *et al.*, 2004). Les propriétés élastiques de cette nouvelle phase pourraient rendre compte des anomalies des vitesses des ondes sismiques observées à la base du manteau (Wookey *et al.*, 2005). La couche D'' présente également une anisotropie des vitesses de propagation des ondes de cisaillement qui peut être liée à la combinaison des propriétés élastiques et de l'orientation préférentielle des cristaux de post-perovskite déformés (Wookey & Kendall, 2007). La connaissance des propriétés plastiques de la phase post-perovskite  $MgSiO_3$  est alors nécessaire pour comprendre l'anisotropie sismique observée dans la couche D''.

Peu d'études ont été réalisées sur la plasticité de la post-perovskite  $MgSiO_3$ . Oganov *et al.* (2005) ont étudié la manière dont on pouvait passer de la structure perovskite à la structure post-perovskite par cisaillement. L'emploi d'un code de métadynamique a permis de surcroît d'identifier les mécanismes les plus faciles. Ces calculs ont mis en évidence le rôle privilégié des plans  $\{110\}$  de la post-perovskite. Faisant référence au critère de Legrand qui, dans les métaux hexagonaux, a été utilisé pour prédire les systèmes de glissement à partir d'énergies de fautes d'empilement, Oganov *et al.* ont proposé que les plans  $\{110\}$  pourraient être des plans de glissement faciles. Plus récemment, Carrez *et al.* (2007a,b) ont utilisé le modèle de Peierls-Nabarro, combiné à des calculs *ab initio* d'énergies de fautes d'empilement généralisées pour déterminer les structures de coeurs et les contraintes de Peierls de dix systèmes de glissement

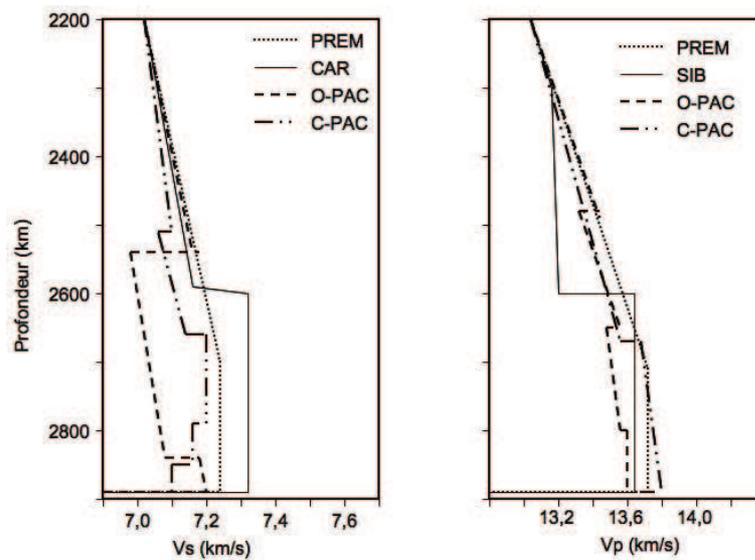


FIG 3.1 – Profils radiaux des vitesses des ondes de cisaillement (à gauche) et de compression (à droite) observées à la base du manteau. CAR, O-PAC, C-PAC et SIB sont respectivement les vitesses observées à l’aplomb des Caraïbes, à l’ouest de l’océan Pacifique, au centre de l’océan Pacifique et de la Sibérie (image reproduite d’après Lay & Garnero (2007)).

susceptibles d’être actifs sur la plasticité de la post-perovskite. Cette étude a montré la facilité du glissement des dislocations  $[001](010)$ . La seule étude expérimentale sur la déformation plastique de la post-perovskite  $MgSiO_3$  a été réalisée par Merkel *et al.* (2007) en cellule à enclumes de diamant entre 145 et 157GPa à 2000K. Les textures de déformation issues de cette étude ont montré une activité importante des plans de glissement (100) et (110).

Ce peu d’études expérimentales réalisées sur la plasticité de la post-perovskite  $MgSiO_3$  s’explique par les conditions de stabilité de cette phase. Comme le montre le diagramme de phase de la figure(3.2), la post-perovskite  $MgSiO_3$  est stable pour des températures et des pressions extrême ( $P \sim 120$ GPa,  $T \sim 2000$ K). De plus, cette phase n’est pas trempable et l’étude de la plasticité de la post-perovskite  $MgSiO_3$  ne peut être réalisée que *in situ*. Pour cette raison, les expérimentateurs se tournent vers l’utilisation d’analogues isostructuraux, stables à plus basse pression, pour étudier la plasticité de la phase post-perovskite.

Actuellement, les deux analogues utilisés pour déterminer les propriétés plastiques de la phase post-perovskite sont un germanate  $MgGeO_3$  (Merkel *et al.*, 2006) et un iridiote de calcium  $CaIrO_3$  (Miyajima *et al.*, 2006; Yamazaki *et al.*, 2006; Miyagi *et al.*, 2008; Niwa *et al.*, 2007; Walte *et al.*, 2007, 2009; Miyajima & Walte, 2009). Hirose *et al.* (2005) ont montré que le germanate  $MgGeO_3$  se transforme de la phase perovskite en post-perovskite à partir de 50GPa.

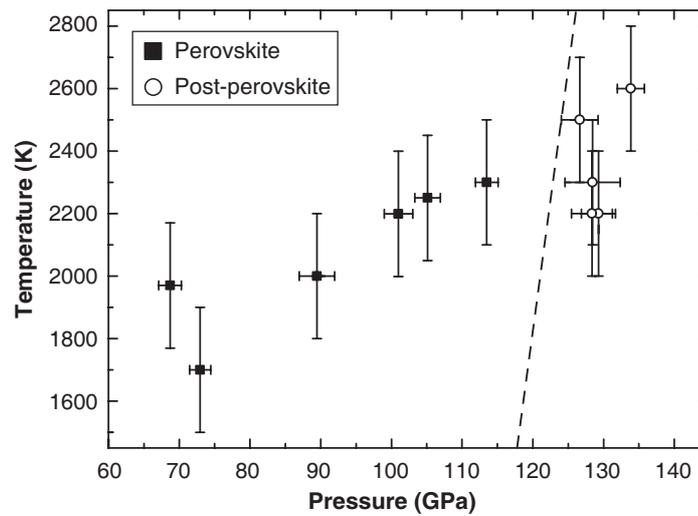


FIG 3.2 – Diagramme de phase de  $MgSiO_3$  aux conditions de pression-température du manteau inférieur et de la limite noyau-manteau (image reproduite d'après Murakami *et al.* (2004)).

Le diagramme de phase de ce germanate est donné sur la figure (3.3). Le diagramme de phase de l'iridiate de calcium  $CaIrO_3$  (figure (3.4)) montre que cette phase cristallise dans la structure post-perovskite aux conditions de pression et température ambiantes.

Cette approche des analogues est-elle pertinente pour étudier la plasticité des minéraux du manteau profond? Karato (1989), en étudiant les relations entre la plasticité et les structures cristallines pour les oxydes, conclut sur la validité de l'approche des analogues pour l'étude des minéraux du manteau profond. Cependant, cette approche des analogues n'est pas systématique. Par exemple, les plans de glissement favorables des cristaux cubiques-structure NaCl dépendent de la composition chimique : le plan de glissement (110) est le plan le plus facile pour LiF, NaF, NaCl ou NaBr alors que le plan (100) est observé pour PbS ou PbTe. Pour les métaux, Poirier & Price (1999) ont étudié le glissement basal et prismatique du fer et du titane, cristallisés dans une structure hexagonale compacte. Ces métaux sont considérés comme analogues de part leur rapport  $c/a$  similaire. Ils ont montré un changement de glissement prédominant en fonction du matériau : le glissement prédominant est basal pour le fer et prismatique pour le titane. L'approche des analogues est une problématique complexe en plasticité et il faut vérifier la pertinence de cette approche pour l'étude de la plasticité de la phase post-perovskite.

Dans ce chapitre, nous proposons d'évaluer l'approche des analogues pour étudier la plasticité de la phase post-perovskite  $MgSiO_3$ . Nous déterminerons les structures de coeur et les

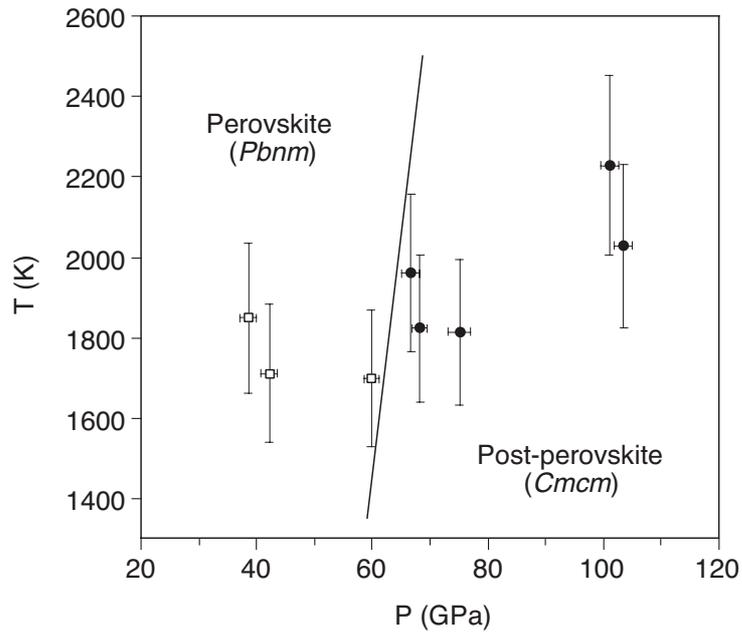


FIG 3.3 – Diagramme de phase de la post-perovskite  $MgGeO_3$ . (image reproduite d'après Hirose *et al.* (2005))

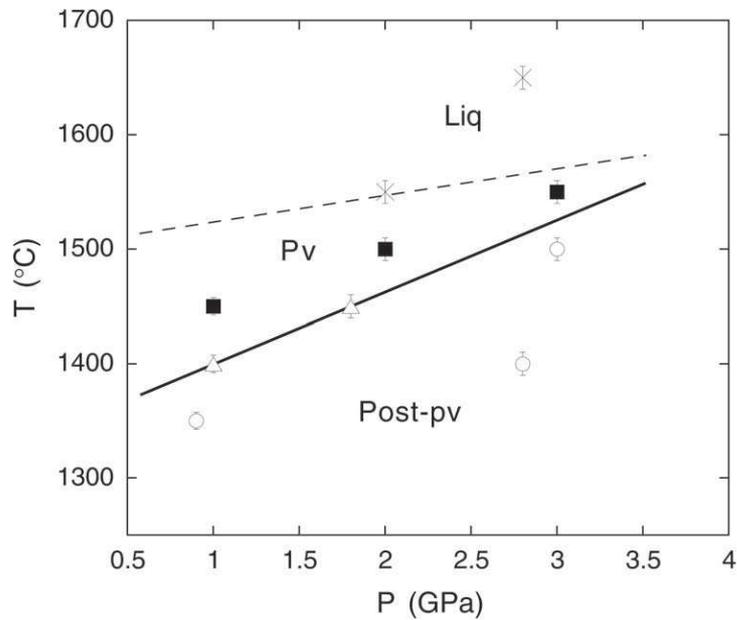


FIG 3.4 – Diagramme de phase de la post-perovskite  $CaIrO_3$ .  $Pv$  correspond à la phase perovskite. (image reproduite d'après Hirose & Fujita (2005))

contraintes de Peierls des dislocations dans  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  que nous comparerons aux résultats obtenus par Carrez *et al.* (2007a,b) sur la post-perovskite  $MgSiO_3$  à 120GPa. Nous utiliserons la même démarche que dans cette précédente étude sur la post-perovskite  $MgSiO_3$ . Nous utiliserons la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro, couplée à des calculs d'énergies de fautes d'empilement généralisées *ab initio*. Les calculs seront réalisées à 120 GPa pour le germanate, pour une comparaison directe avec les résultats sur le silicate, et à 0 GPa pour l'iridiate de calcium, pression où cette phase est stable. L'utilisation de cette méthode nous permettra de déterminer le, ou les, systèmes de glissement les plus facilement activés dans la phase post-perovskite. La comparaison entre contraintes de Peierls nous donnera également des informations sur l'anisotropie plastique de ces matériaux. Enfin, nous déterminerons les orientations préférentielles des cristaux de ces phases avec une modélisation visco-plastique auto-cohérente. Nous pourrons ainsi comparer les textures de déformation susceptibles d'être développées dans la phase post-perovskite.

### 3.1 Structure de la post-perovskite et systèmes de glissement potentiels.

La phase post-perovskite cristallise dans le système orthorhombique, dans le groupe d'espace  $Cmcm$ . La relation entre les paramètres de maille est la suivante :  $a < c < b$ . La structure de la post-perovskite est composée de couches d'octaèdres reliés par leurs arrêtes et orientées parallèlement au plan (010). La figure (3.5) montre trois projections de cette structure, suivant les directions cristallographiques [100], [010] et [001].

Peu d'études ont été réalisées et les systèmes de glissement impliqués dans la plasticité de la phase post-perovskite ne sont pas clairement identifiés. Cependant, plusieurs critères permettent de prédire le choix des systèmes de glissement dans un cristal :

- Les vecteurs de Burgers sont choisis parmi les plus courtes translations de réseau.
- Les plans de glissement sont les plans denses d'atomes.
- Le plan de glissement est le plan de dissociation des dislocations.
- Le système de glissement le plus facile correspond aux minimums des valeurs " $\frac{b}{d_{hkl}}$ " (critère de Chalmers-Martius) où  $b$  est le module du vecteur de Burgers et  $d_{hkl}$  la distance interréticulaire entre les plans de glissement.

Avec ces critères, nous pouvons choisir les translations de réseau  $a$ ,  $b$ ,  $c$  comme vecteurs de

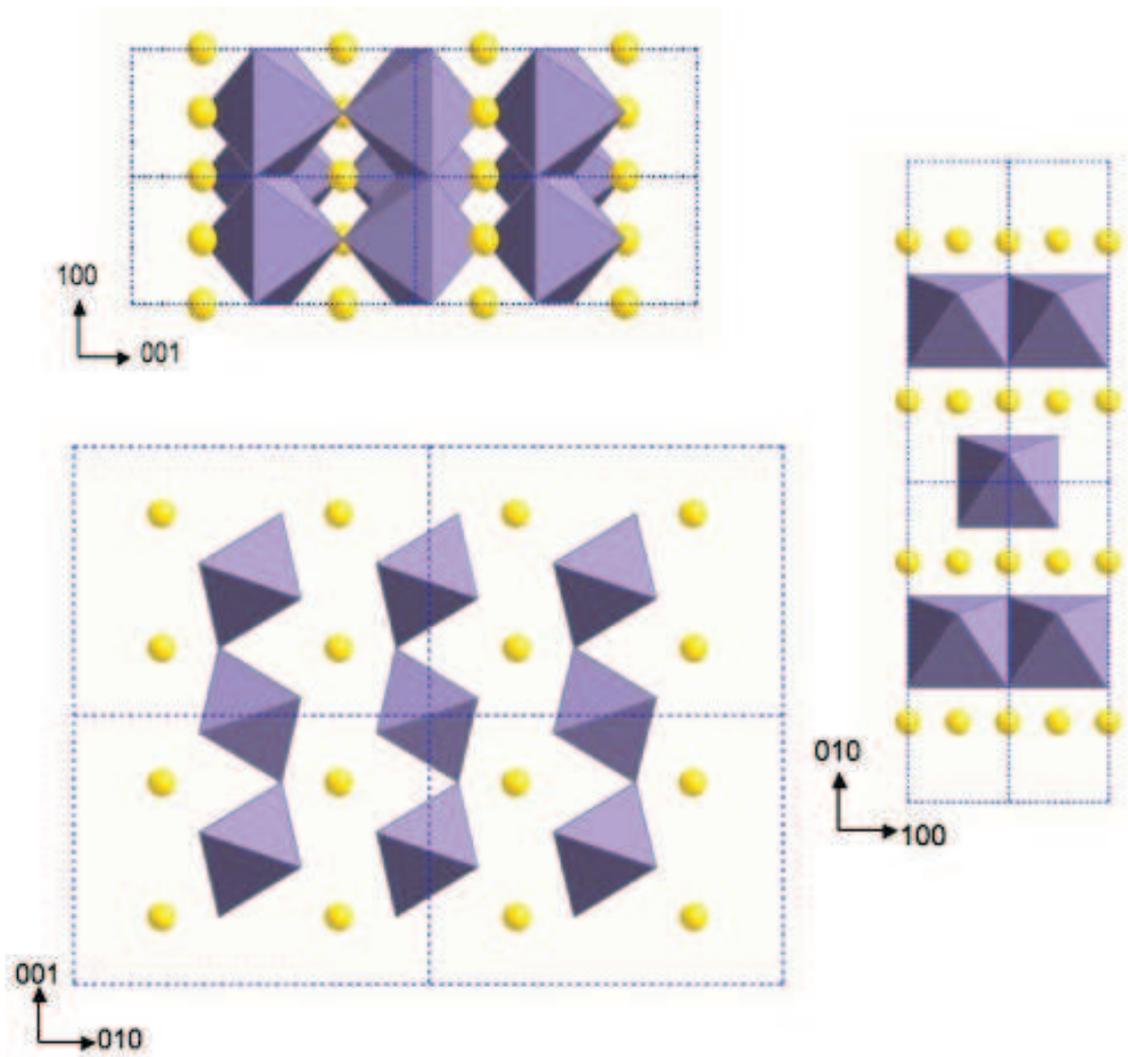


FIG 3.5 – Projection de 2\*2 mailles de la structure post-perovskite suivant les directions [100], [010] et [001]. Les octaèdres  $x - O_6$  ( $x=Mg, Ge$  ou  $Ir$ ) sont représentés en violet et les atomes de  $Mg$  (ou  $Ca$ ) en jaune.

Burgers potentiels des dislocations dans la post-perovskite. Nous ajoutons également la translation  $1/2[a + b]$  dû au groupe d'espace  $C$  de la post-perovskite. La règle de Chalmers-Martius implique que les distances interréticulaires  $d_{hkl}$  soient grandes. Pour un cristal orthorhombique, ces distances sont données par

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \quad (3.1)$$

Ces distances interréticulaires  $d_{hkl}$  seront les plus grandes pour les plans de plus faibles indices de Miller. Nous pouvons alors choisir les plans de glissement suivants : (100), (010), (001), (011) et (110). Le plan (101) ne sera pas utilisé dans cette étude car seules les dislocations de vecteurs de Burgers [010] peuvent glisser dans ce plan. La translation de réseau  $b$  est la plus grande et il est peu probable que le système de glissement [010](101) soit un système de glissement facile de la post-perovskite.

La combinaison des vecteurs de Burgers et des plans de glissement choisis conduit au dix systèmes de glissement suivants : [100](010), [100](001), [100]{011}, [010](100), [010](001), [001](100), [001](010), [001]{110},  $1/2[110](001)$ ,  $1/2[110]\{110\}$

Ces systèmes de glissement prévisibles pour la phase post-perovskite sont schématiquement représentés sur la figure (3.6).

## 3.2 Méthode

### 3.2.1 Structures de coeur des dislocations et contraintes de Peierls.

Nous déterminons les structures de coeurs et les contraintes de Peierls des dislocations vis et coin associées aux dix systèmes de glissement suivant : [100](010), [100](001), [100]{011}, [010](100), [010](001), [001](100), [001](010), [001]{110},  $1/2[110](001)$  et  $1/2[110]\{110\}$  de la phase post-perovskite  $MgGeO_3$  à 120GPa et  $CaIrO_3$  à 0GPa avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. De par la symétrie orthorhombique de la post-perovskite, on étudie les caractères mixtes  $\theta=17^\circ$  et  $73^\circ$  qui seront assimilées aux caractères vis et coin pour la dislocation  $1/2[110](001)$  (cf. figure (3.6)). Nous utilisons la résolution de l'équation de Peierls-Nabarro pour les matériaux à cristallographie complexe décrite dans le chapitre 1. Les données nécessaires à l'utilisation de ce modèle sont les paramètres de maille, les coefficients énergétiques  $K$  des dislocations calculées à partir des constantes élastiques et les énergies de fautes d'empilement généralisées pour chaque système de glissement étudié. Ces paramètres physiques sont calculés *ab initio* dans l'approxi-

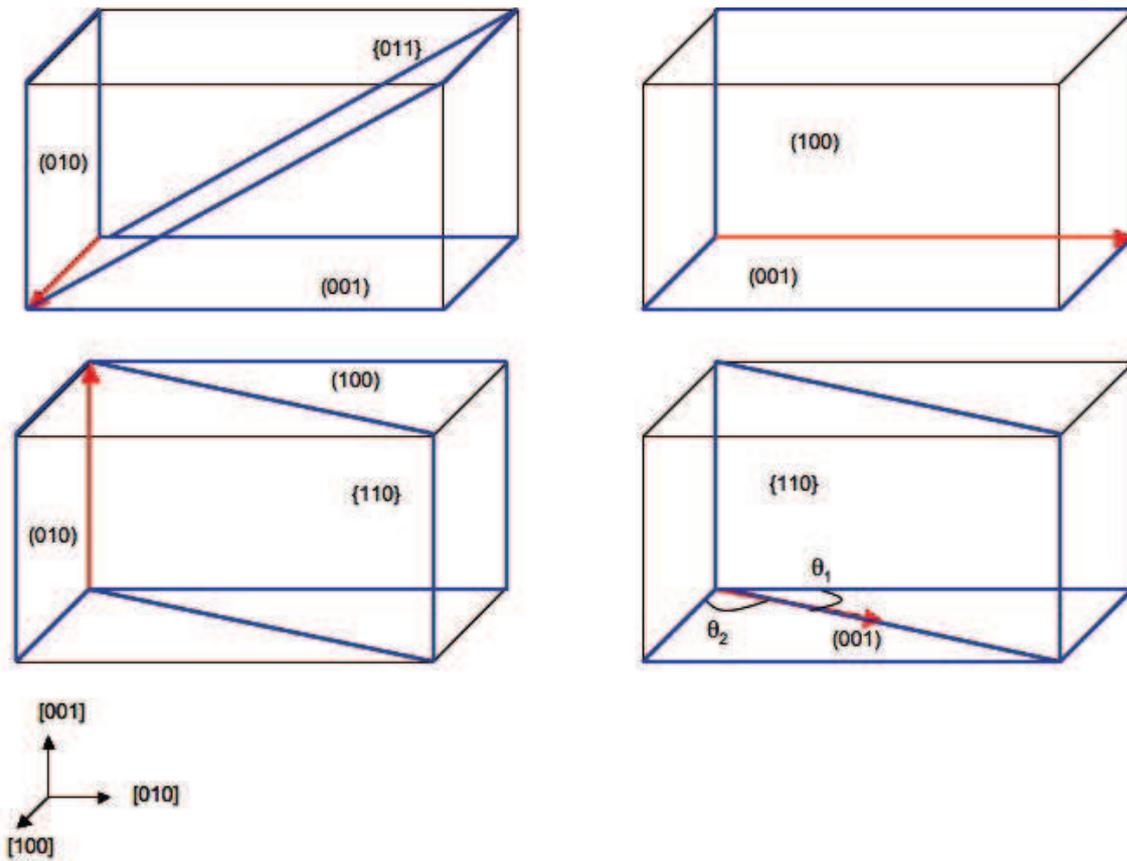


FIG 3.6 – Présentation des systèmes de glissement de la post-perovskite. Les vecteurs de Burgers sont représentés en rouge et les plans de glissement sont tracés en bleu. Sur la figure en bas à droite, on définit les angles  $\theta_1=17^\circ$  et  $\theta_2=73^\circ$  qui sont les angles des caractères étudiés pour la dislocation  $1/2[110](001)$

mation du gradient généralisé et avec des pseudopotentiels construits suivants la méthode PAW. Les paramètres des pseudopotentiels pour les atomes de Mg, Ge, Ca, Ir et O sont donnés dans le tableau (2.2).

### 3.2.2 Orientations préférentielles des cristaux : le modèle visco-plastique auto-cohérent (VPSC)

On détermine les orientations préférentielles des cristaux avec un modèle visco-plastique auto-cohérent (VPSC). Ce modèle, développé par Lebensohn & Tome (1993), permet de déterminer la contrainte et le taux de déformation à l'échelle microscopique à partir des quantités macroscopiques. Ce modèle a été utilisé pour prédire les orientations préférentielles des cristaux dans des minéraux : l'olivine (Tommasi *et al.*, 2000; Castelnau *et al.*, 2008; Wenk, 2002), la wadsleyite (Tommasi *et al.*, 2004) ou l'omphacite (Bascou *et al.*, 2002). On considère ici que la déformation est assurée par le glissement des dislocations : la recristallisation dynamique et les glissement des joints de grains ne sont pas pris en compte. Le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}^s$  d'un système de glissement  $s$  relié au tenseur local des contraintes déviatoriques  $S_{ij}$  est établi à partir d'une loi visco-plastique :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{\tau_r^s}{\tau_0^s} \right)^{n^s} = \dot{\gamma}_0 \left( \frac{r_{ij}^s S_{ij}^s}{\tau_0^s} \right)^{n^s} \quad (3.2)$$

Ici,  $\dot{\gamma}_0$  est un taux de déformation de référence, et  $n^s$ ,  $\tau_r^s$  et  $\tau_0^s$  sont respectivement l'exposant de contrainte, la contrainte projetée de cisaillement, et la contrainte critique projetée de cisaillement du système  $s$ , dont l'orientation est relative à la contrainte macroscopique exprimée dans son tenseur de Schmid  $r_{ij}^s$ . On utilise un exposant  $n=3$  et les contraintes critiques projetées de cisaillement sont les contraintes de Peierls que nous calculons, normalisées par rapport à la contrainte de Peierls du système de glissement le plus facile. On recherche un état microscopique  $(s, \dot{\epsilon})$  pour chaque grain, dont la moyenne détermine la réponse du polycristal  $(\bar{\Sigma}, \bar{D})$ . Les interactions entre un grain et ses voisins sont successivement remplacées par l'interaction entre une inclusion avec la même orientation cristalline et un milieu infini homogène équivalent, dont le comportement est la moyenne pondérée du comportement des autres grains. Ceci conduit à :

$$\dot{\epsilon}_{ij} - D_{ij} = -\alpha \tilde{M}_{ijkl} (s_{kl} - \bar{\Sigma}_{kl}) \quad (3.3)$$

où  $\tilde{M}$  est le tenseur des interactions et  $\alpha$  une constante utilisé pour paramétrer l'interaction entre les grains et le milieu homogène infini. Nous prenons cette dernière égale à 1, ce qui correspond au modèle tangent de Lebenshom et Tomé qui reproduit la plupart des caractéristiques des orientations préférentielles des cristaux (Lebensohn & Tome, 1993).

Dans les simulations que nous effectuons, un agrégat de 1000 grains, initialement sphériques et orientés aléatoirement, est déformé progressivement par un cisaillement simple et par une compression axiale. La déformation équivalente augmente de 0,025 à chaque incrément de temps  $dt$ . Cette déformation équivalente est définie par (Molinari *et al.*, 1987) :

$$\epsilon_{eq} = \int D_{eq}(t)dt \quad (3.4)$$

où le le taux de déformation équivalente de Von Mises est :

$$D_{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}D_{ij}D_{ij}} \quad (3.5)$$

### 3.3 Résultats

#### 3.3.1 Paramètres de maille et constantes élastiques

Nous calculons les paramètres de maille ainsi que les constantes élastiques *ab initio* (GGA-PW91) pour les deux phases étudiées. Les résultats, ainsi qu'une comparaison avec les données existantes, sont donnés dans les tableaux (3.1), (3.2) pour  $MgGeO_3$  à 120GPa et (3.3), (3.4) pour  $CaIrO_3$  à 0GPa. Les paramètres de maille calculés *ab initio* sont surestimées par rapport aux valeurs expérimentales aussi bien pour le germanate que pour l'iridiate de calcium : ceci vient du fait que nous utilisons l'approximation GGA qui tend à surestimer les paramètres de maille. Aucune comparaison n'est possible pour les constantes élastiques que nous avons calculé pour  $MgGeO_3$  : les constantes élastiques calculées pour ce minéral à cette pression sont les premières données. En revanche, les constantes élastiques calculées pour l'iridiate de calcium sont dans le même ordre de grandeur que celles calculées *ab initio* par Stolen & Tronnes (2007).

L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel nécessite l'introduction des coefficients énergétiques  $K$  des dislocations. Ceux ci sont calculés en élasticité anisotrope avec le logiciel *DisDi* à partir des constantes élastiques que nous avons déterminé. Les coefficients  $K$  pour les deux phases post-perovskite étudiées sont donnés dans le tableau (3.5).

	$a$ (Å)	$b$ (Å)	$c$ (Å)
<i>ab initio</i> (GGA-PW91) - cette étude	2,583	8,316	6,368
exp. (Kubo <i>et al.</i> , 2006)	2,557	8,238	6,308

TAB 3.1 – Paramètres de maille de la post-perovskite  $MgGeO_3$  à 120GPa.

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$
<i>ab initio</i> (GGA-PW91) - cette étude	1128	847	1072	219	151	345	468	376	536

TAB 3.2 – Constantes élastiques (en GPa) de la post-perovskite  $MgGeO_3$  à 120GPa

	$a$ (Å)	$b$ (Å)	$c$ (Å)
<i>ab initio</i> (GGA-PW91) - cette étude	3,214	9,869	7,332
<i>ab initio</i> (GGA-PBE) (Stolen & Tronnes, 2007)	3,222	9,849	7,350
exp. (Hirose & Fujita, 2005)	3,144	9,865	7,297

TAB 3.3 – Paramètres de maille de la post-perovskite  $CaIrO_3$  à 0GPa

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$
<i>ab initio</i> (GGA-PW91) - cette étude	371	226	362	58	44	50	90	65	114
<i>ab initio</i> (GGA-PBE) (Stolen & Tronnes, 2007)	326	207	355	59	46	61	86	70	122

TAB 3.4 – Constantes élastiques (en GPa) de la post-perovskite  $CaIrO_3$  à 0GPa

sys. de glissement	$MgGeO_3$		$CaIrO_3$	
	$K_{vis}$	$K_{coin}$	$K_{vis}$	$K_{coin}$
[100](010)	228	449	47	115
[100](001)	228	352	47	114
[100]{011}	228	393	47	113
[010](100)	275	391	54	90
[010](001)	275	313	54	92
[001](100)	182	344	51	113
[001](010)	182	352	51	117
[001]{110}	182	348	51	112
$1/2[110](001)$	306	282	81	60
$1/2[110]\{110\}$	259	396	60	92

TABLE 3.5 – Coefficients énergétiques  $K$  (en  $GPa$ ) utilisés dans la résolution de l'équation de Peierls-Nabarro. Dans le cas des dislocations  $1/2[110]\{110\}$ , les coefficients  $K_{vis}$  et  $K_{coin}$  correspondent aux valeurs de  $K$  pour les caractères mixtes  $\theta=17^\circ$  et  $73^\circ$ .

### 3.3.2 Calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées

Les énergies de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  pour les dix systèmes de glissement [100](010), [100](001), [100]{011}, [010](100), [010](001), [001](100), [001](010), [001]{110},  $1/2[110](001)$  et  $1/2[110]\{110\}$  sont calculées avec la méthode décrite dans le chapitre 2. Les supercellules utilisées sont présentées sur la figure (3.7).

Les figures (3.8) et (3.9) présentent les résultats des énergies de fautes d'empilement généralisées en fonction du vecteur de faute  $f$  pour  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$ . Globalement, les formes des courbes sont similaires pour un système de glissement entre les deux matériaux. La seule différence apparaît pour le système  $1/2[110]\{110\}$  qui présentent deux maxima locaux dans le cas du germanate et un maximum global dans le cas de l'iridiate de calcium. L'énergie de faute d'empilement du glissement selon la direction [100] présente un maximum global  $\gamma^{max}$  à 50% de cisaillement quel que soit le plan de glissement pour les deux matériaux. Parmi les glissements [100](0kl), cette valeur de  $\gamma^{max}$  est la plus petite pour le système [100](001) dans le germanate et pour [100](010) dans l'iridiate de calcium. Le glissement suivant [001] met en évidence la présence d'un minimum local d'énergie pour une valeur de 50% de cisaillement dans les deux matériaux et pour tous les plans (hk0). Le glissement [010] présente deux formes différentes en fonction du plan

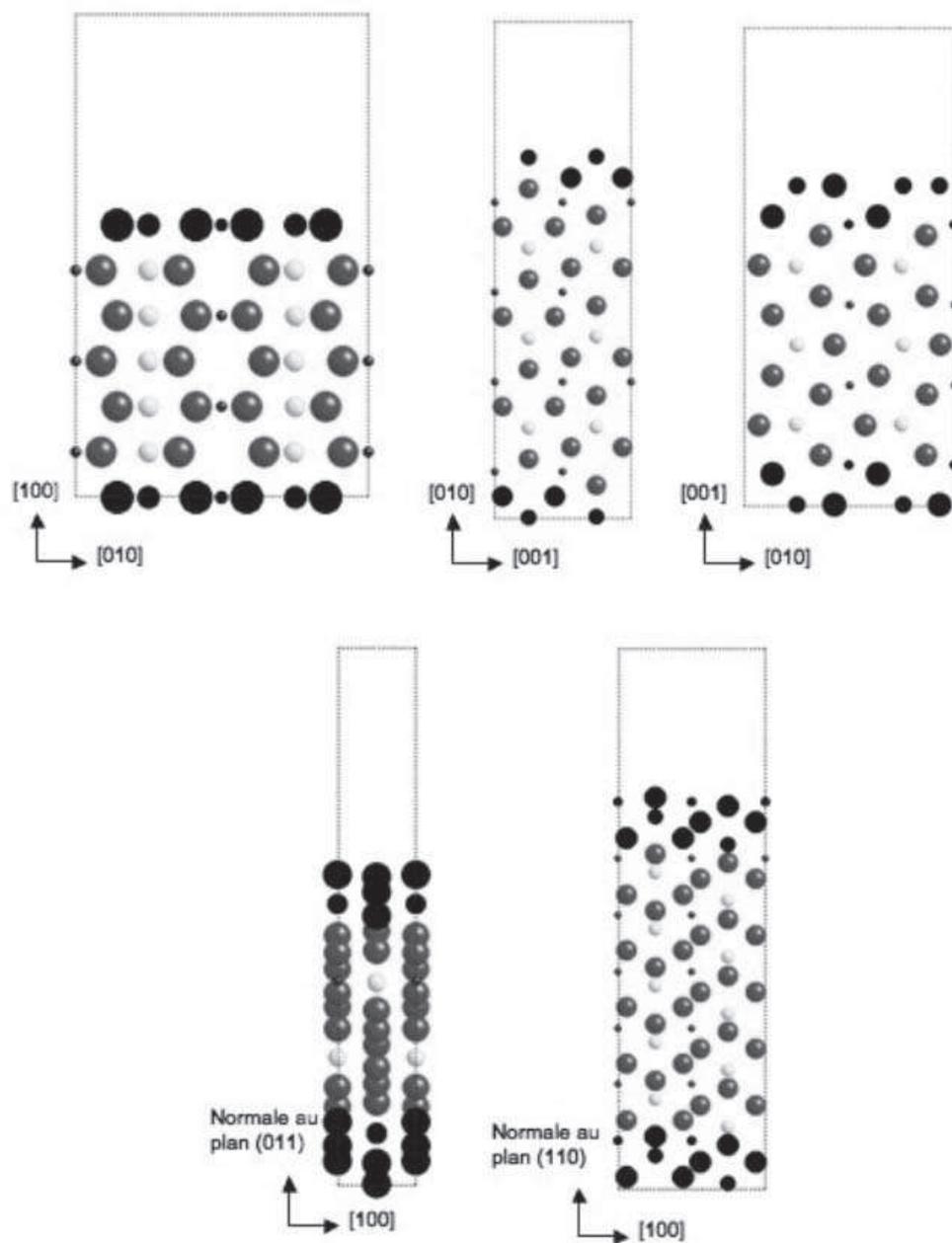


FIG 3.7 – Supercellules utilisées pour le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées. Les atomes noirs sont fixes au cours du calcul.

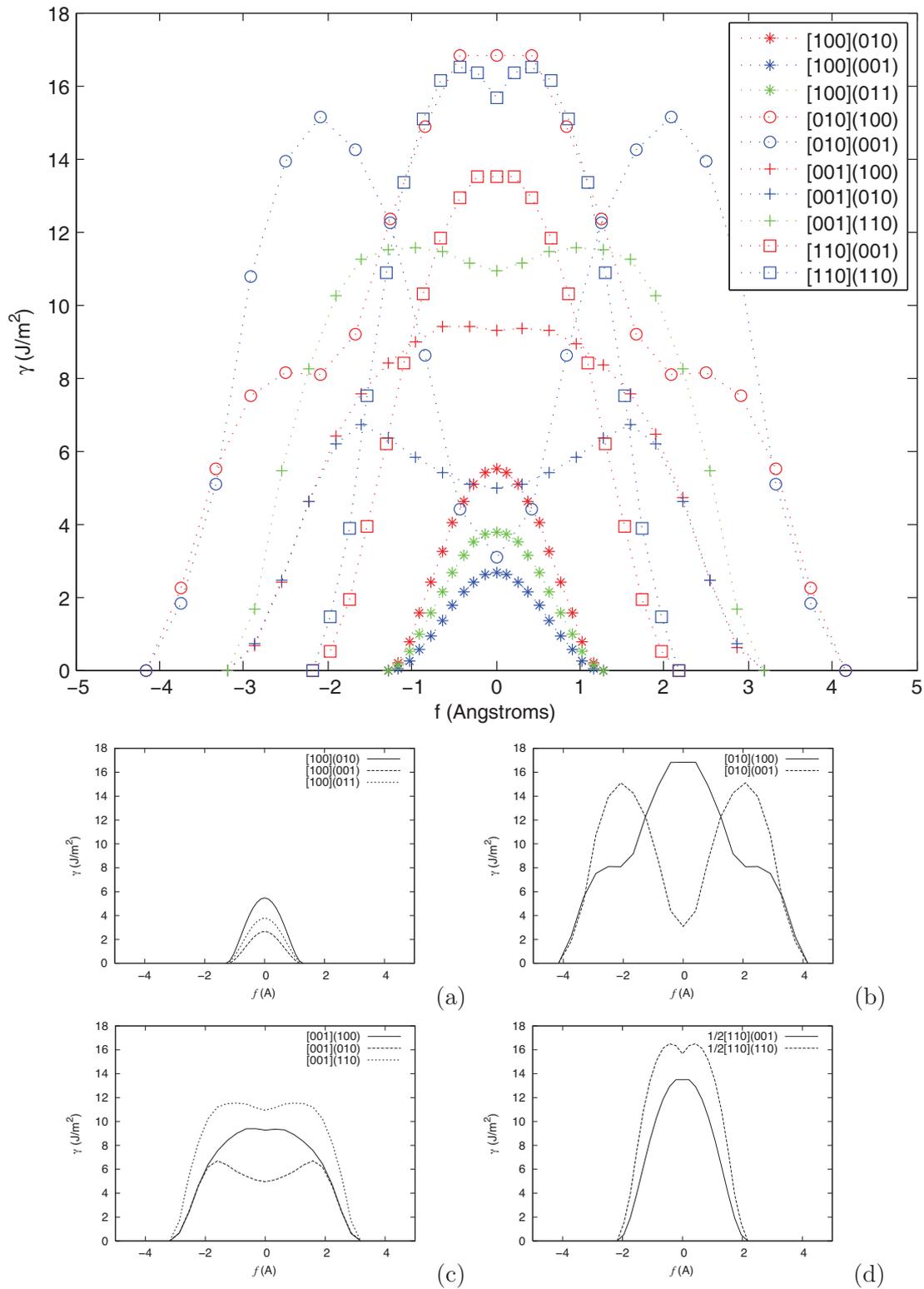


FIG 3.8 – Energies de fautes d'empilement généralisées pour les dix systèmes de glissement étudiés de  $MgGeO_3$  à 120GPa. Les courbes, non-lissées, sont tracées de telle façon à ce que le cisaillement de  $b/2$ ,  $b$  étant le module du vecteur de Burgers, correspondent à  $f=0$  dans le but de comparer les différents systèmes de glissement. Nous ajoutons également les courbes tracées pour chaque glissement pris individuellement : (a) :  $[100]$ , (b) :  $[010]$ , (c) :  $[001]$ , (d) :  $1/2[110]$ .

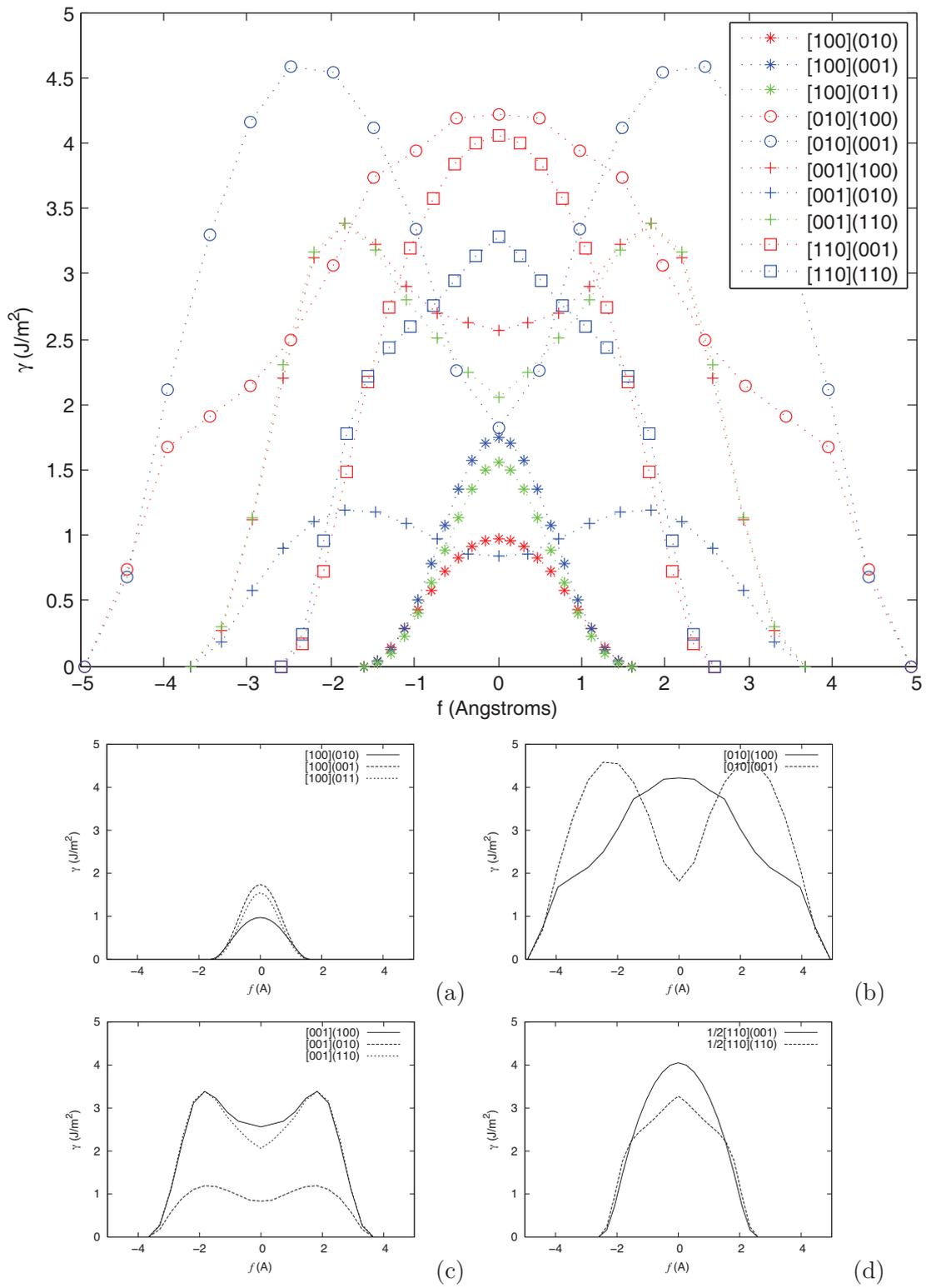


FIG 3.9 – Energies de fautes d'empilement généralisées pour les dix systèmes de glissement de  $\text{CaIrO}_3$  à 0GPa. Les courbes, non-lissées, sont tracées de telle façon à ce que le cisaillement de  $b/2$ ,  $b$  étant le module du vecteur de Burgers, correspondent à  $f=0$  dans le but de comparer les différents systèmes de glissement. Nous ajoutons également les courbes tracées pour chaque glissement pris individuellement : (a) : [100], (b) : [010], (c) : [001], (d) :  $1/2[110]$ .

de glissement pour les deux matériaux : le système  $[010](001)$  montre une faute d'empilement stable lorsque le cristal est cisailé de 50% dans la direction  $[010]$ ; le système  $[010](100)$  présente un maximum global à 50% de cisaillement et deux maxima locaux à 25 et 75% de cisaillement. Enfin, le système  $1/2[110](001)$  présente un maximum global à 50% de cisaillement pour les deux phases étudiées.

Les résultats des calculs des énergies de fautes d'empilement généralisées sont résumés dans le tableau (3.6).

Le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  permet d'obtenir des informations sur le cisaillement plastique rigide des systèmes de glissement des deux phases post-perovskites étudiées. La contrainte maximale qu'oppose le cristal au cisaillement plastique est donnée par :

$$\tau_{max} = \max\left(\frac{d\gamma}{df}\right) \quad (3.6)$$

Les valeurs de  $\tau_{max}$  sont résumées dans le tableau (3.6). Si on observe les valeurs de contraintes maximales normalisées par rapport aux modules de cisaillement  $\mu$ , le glissement  $[100](0kl)$  est le plus facile pour le germanate alors que c'est le glissement  $[001](010)$  dans le cas de l'iridiate de calcium.

### 3.3.3 Structure de coeurs des dislocations et contraintes de Peierls

Nous déterminons la structure de coeur des dislocations vis et coin des systèmes de glissement  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[100]\{011\}$ ,  $[010](100)$ ,  $[010](001)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001]\{110\}$ ,  $1/2[110](001)$  et  $1/2[110]\{110\}$  de  $MgGeO_3$  à 120GPa et  $CaIrO_3$  à 0GPa. Nous utilisons la résolution de l'équation de Peierls-Nabarro décrite dans le chapitre 1 pour des matériaux à cristallographie complexe. Nous utilisons les coefficients  $K$  du tableau (3.5) et les énergies de fautes d'empilement calculées précédemment. La contrainte de Peierls de ces dislocations est calculée comme le maximum de la dérivée de l'énergie de Peierls sur la largeur de sa vallée (cf. chapitre 1).

Les figures (3.10) et (3.11) montrent les étalements  $f$  et la densité locale de dislocations  $\rho$  pour les dislocations vis du germanate et de l'iridiate de calcium. Les résultats sont donnés dans les tableaux (3.7),(3.8) pour le germanate et (3.9),(3.10) pour l'iridiate de calcium.

systeme de glissement	$\gamma^{max}$ ( $j.m^{-2}$ )	EFE ( $j.m^{-2}$ )	$\tau^{max}$ (GPa)	$\mu$ (GPa)	$\tau^{max}/\mu$
<i>MgGeO<sub>3</sub></i>					
[100](010)	5,43	-	70,73	228	0,21
[100](011)	3,76	-	47,44	228	0,20
[100](001)	2,67	-	32,51	228	0,22
1/2[110](001)	13,61	-	107,12	306	0,51
1/2[110](110)	16,43	16,01	159,48	259	0,53
[001](100)	9,36	9,28	65,54	182	0,43
[001](110)	11,63	10,88	119,86	182	0,77
[001](010)	6,68	4,98	66,97	182	0,31
[010](100)	17,11	-	85,80	275	0,25
[010](001)	15,11	2,66	115,62	275	0,53
<i>CaIrO<sub>3</sub></i>					
[100](010)	0,97	-	10,22	47	0,20
[100](011)	1,55	-	16,10	47	0,34
[100](001)	1,74	-	18,04	47	0,41
1/2[110](001)	4,05	-	28,38	81	0,35
1/2[110](110)	3,27	-	30,10	60	0,47
[001](100)	3,4	2,56	29,88	50	0,68
[001](110)	3,4	2,06	30,4	50	0,67
[001](010)	1,19	0,83	11,05	50	0,19
[010](100)	4,21	-	22,41	54	0,45
[010](001)	4,58	1,82	28,68	54	0,49

TABLE 3.6 – Résumé des calculs d'énergie de fautes d'empilement généralisées pour les phases post-perovskites *MgGeO<sub>3</sub>* (120GPa) et *CaIrO<sub>3</sub>* (0GPa).  $\gamma^{max}$  est l'énergie maximale de faute d'empilement. EFE est l'énergie de fautes d'empilement stable pour 50% de cisaillement.  $\tau^{max}$  est la contrainte maximale qu'oppose le système de glissement au cisaillement plastique rigide.  $\mu$  est le module de cisaillement calculé en élasticité anisotrope.

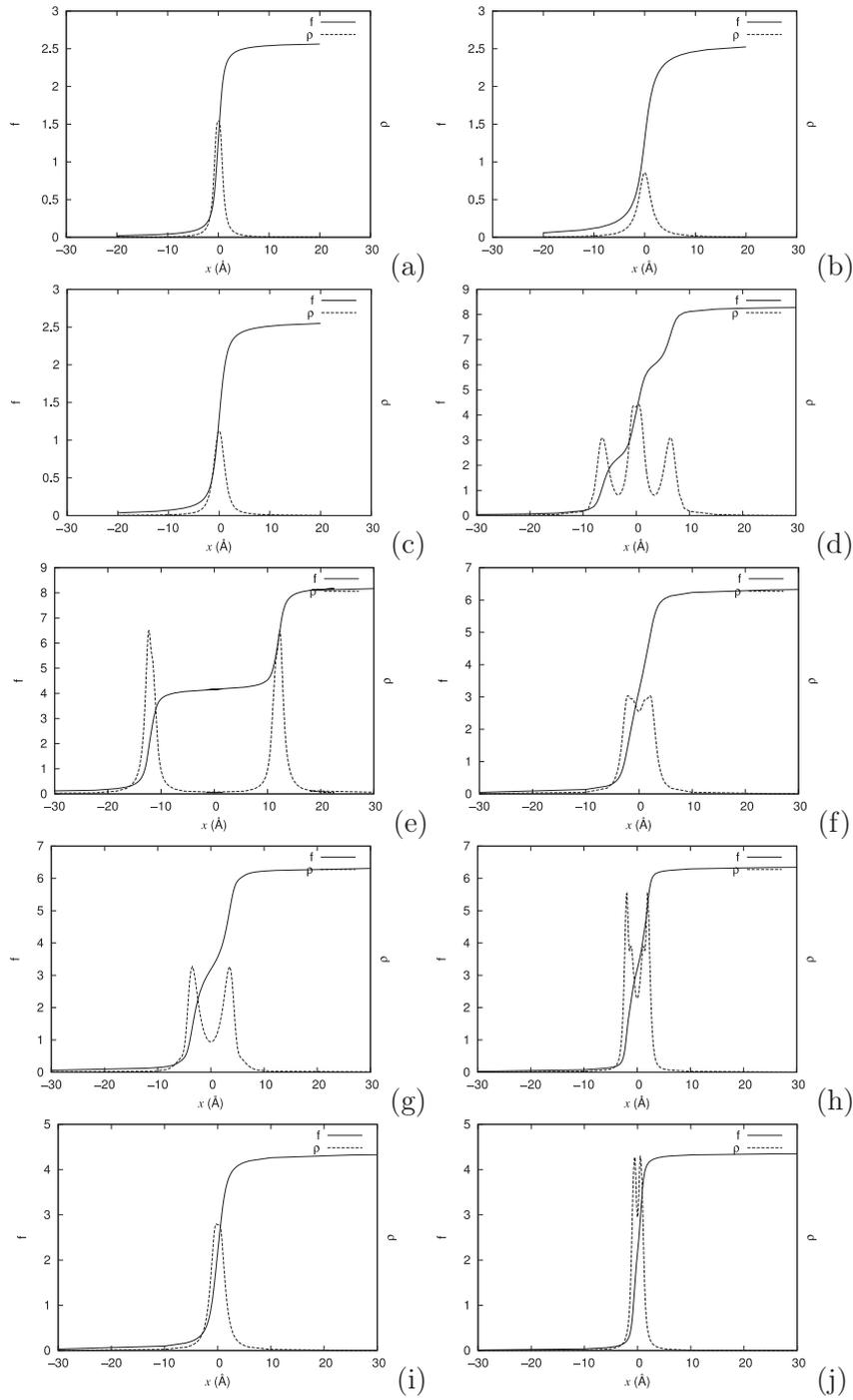


FIG 3.10 – Etalements  $f$  et densité locale de dislocations  $\rho$  des dislocations vis de la post-perovskite  $MgGeO_3$  à 120GPa : (a)  $[100](010)$ , (b)  $[100](001)$ , (c)  $[100](011)$ , (d)  $[010](100)$ , (e)  $[010](001)$ , (f)  $[001](100)$ , (g)  $[001](010)$ , (h)  $[001](110)$ , (i)  $1/2[110](001)$  et (j)  $1/2[110](110)$ . Les fonctions de cisaillement  $f$  varient de 0 au module du vecteur de Burgers et  $\rho$  est donnée dans une unité arbitraire.

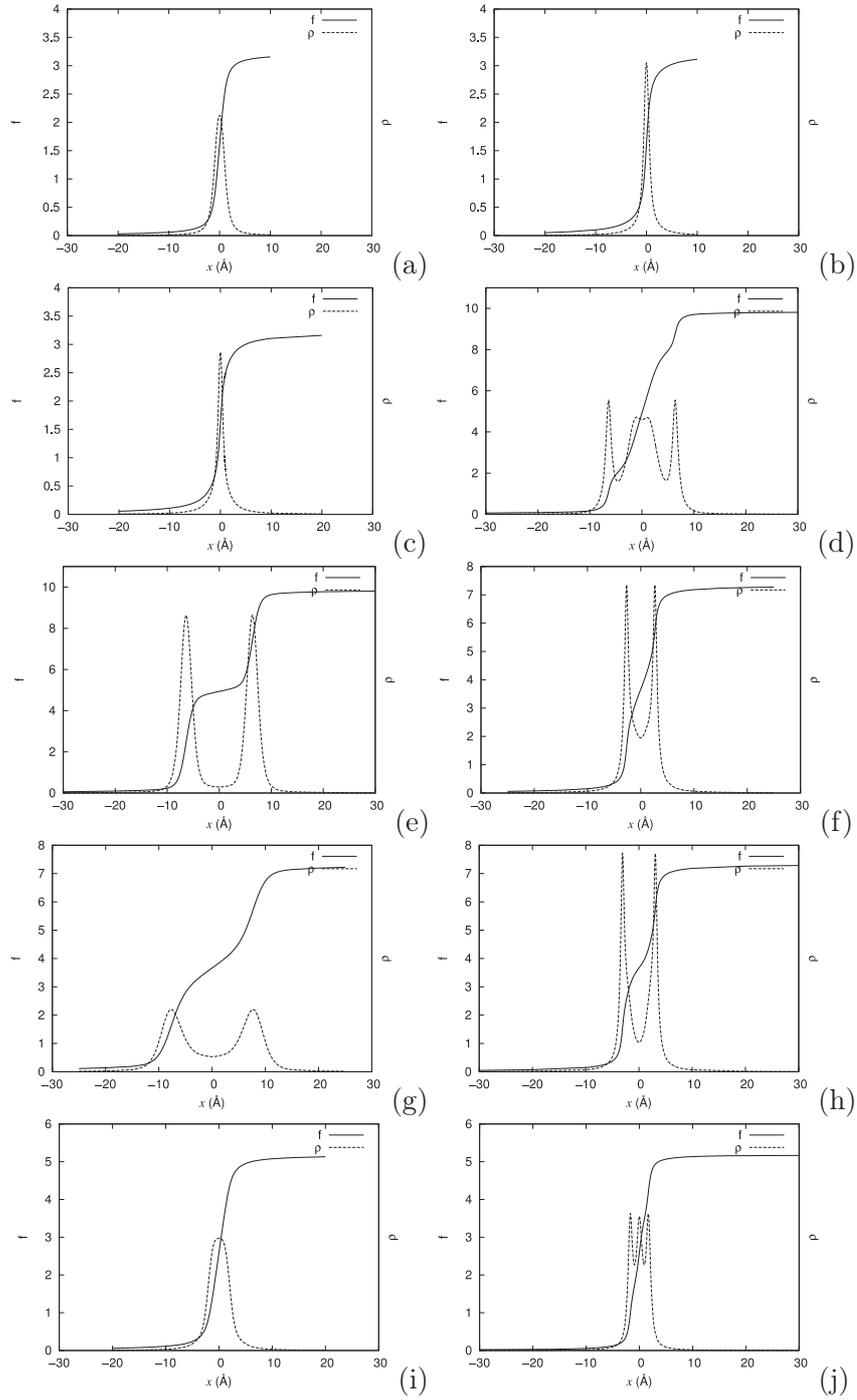


FIG 3.11 – Etalements  $f$  et densité locale de dislocations  $\rho$  des dislocations vis de la post-perovskite  $CaIrO_3$  à 0GPa : (a)  $[100](010)$ , (b)  $[100](001)$ , (c)  $[100](011)$ , (d)  $[010](100)$ , (e)  $[010](001)$ , (f)  $[001](100)$ , (g)  $[001](010)$ , (h)  $[001](110)$ , (i)  $1/2[110](001)$  et (j)  $1/2[110](110)$ . Les fonctions de cisaillement  $f$  varient de 0 au module du vecteur de Burgers et  $\rho$  est donnée dans une unité arbitraire.

	$b$ (Å)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$a'$ (Å)	$\Delta W$ (eV.Å <sup>-1</sup> )	$\sigma_p$ (GPa)
[100](010)	2,583	0,9	-	6,37	2,0	121,6
[100](001)	2,583	1,4	-	4,185	0,3	17,1
[100](011)	2,583	1,3	-	10,47	2,3	89,9
1/2[110](001)	4,353	1,4	-	1,29	0,05	4,9
1/2[110]110	4,353	0,5	1,2	6,37	6,2	266
[001](100)	6,37	1,5	3,7	8,32	3,5	48,9
[001](110)	6,37	0,5	4	4,36	1,4	45,9
[001](010)	6,37	0,8	7,5	2,58	0,6	2,1
[010](001)	8,32	1,1	24,5	1,29	0,1	5,8
[010](100)	8,32	$\zeta_1=1,7; \zeta_2=1,4$	6,5	6,37	5,3	68,5

TAB 3.7 – Résultats du modèle de Peierls pour les dislocations vis dans  $MgGeO_3$  à 120GPa.  $b$  est le module du vecteur de Burgers,  $\zeta$  est la demi-largeur du coeur de la dislocation,  $a'$  la périodicité du cristal dans le mouvement de la ligne,  $\Delta$  la distance de séparation entre deux dislocations partielles le cas échéant,  $\Delta W$  et  $\sigma_p$  sont l'énergie et la contrainte de Peierls. Pour la dislocation [010](100), les valeurs de  $\zeta$  sont présentés pour la densité locale de dislocation centrale ( $\zeta_1$ ) et la densité locale externe ( $\zeta_2$ ).

	$b$ (Å)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$a'$ (Å)	$\Delta W$ (eV.Å <sup>-1</sup> )	$\sigma_p$ (GPa)
[100](010)	2,58	1,9	-	2,58	0,05	4,4
[100](001)	2,58	2,2	-	1,29	$4 \cdot 10^{-4}$	0,01
[100](011)	2,58	1,7	-	3,21	0,01	0,8
1/2[110](001)	4,353	1,4	-	4,16	2,5	81,3
1/2[110]110	4,353	0,8	1,8	4,36	3,1	116,6
[001](100)	6,37	2,3	7,8	6,37	1,1	14,8
[001](110)	6,37	1	7,5	6,37	4,2	75,6
[001](010)	6,37	1,5	14,5	6,37	1,8	27,9
[010](001)	8,32	1,1	24,7	4,18	1,2	23,9
[010](100)	8,32	$\zeta_1=2,4; \zeta_2=1,8$	9,2	8,32	5,3	69,1

TAB 3.8 – Résultats du modèle de Peierls pour les dislocations coin dans  $MgGeO_3$  à 120GPa.  $b$  est le module du vecteur de Burgers,  $\zeta$  est la demi-largeur du coeur de la dislocation,  $a'$  la périodicité du cristal dans le mouvement de la ligne,  $\Delta$  la distance de séparation entre deux dislocations partielles le cas échéant,  $\Delta W$  et  $\sigma_p$  sont l'énergie et la contrainte de Peierls. Pour la dislocation [010](100), les valeurs de  $\zeta$  sont présentés pour la densité locale de dislocation centrale ( $\zeta_1$ ) et la densité locale externe ( $\zeta_2$ ).

	$b$ (Å)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$a'$ (Å)	$\Delta W$ (eV.Å <sup>-1</sup> )	$\sigma_p$ (GPa)
[100](010)	3,21	1,6	-	7,33	0,4	10,5
[100](001)	3,21	0,5	-	4,93	0,5	28
[100](011)	3,21	0,5	-	12,3	1,2	61,6
1/2[110](001)	5,19	2,1	-	4,93	0,8	17,3
1/2[110](110)	5,19	$\zeta_1=1,7; \zeta_2=1,4$	1,9	7,33	1,4	37,8
[001](100)	7,33	0,5	5,2	9,87	1,8	53
[001](110)	7,33	0,5	6,2	5,19	1,2	35,4
[001](010)	7,33	1,9	16,2	3,21	0,04	0,9
[010](001)	9,87	1,3	12,6	1,6	0,01	0,4
[010](100)	9,87	$\zeta_1=3,3; \zeta_2=0,8$	12,8	7,33	0,6	9

TABLE 3.9 – Résultats du modèle de Peierls pour les dislocations vis dans  $CaIrO_3$  à 0GPa.  $b$  est le module du vecteur de Burgers,  $\zeta$  est la demi-largeur du coeur de la dislocation,  $a'$  la périodicité du cristal dans le mouvement de la ligne,  $\Delta$  la distance de séparation entre deux dislocations partielles le cas échéant,  $\Delta W$  et  $\sigma_p$  sont l'énergie et la contrainte de Peierls. Pour les dislocations [010](100) et 1/2[110](110), les valeurs de  $\zeta$  sont présentés pour la densité locale de dislocation centrale ( $\zeta_1$ ) et la densité locale externe ( $\zeta_2$ ).

	$b$ (Å)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$a'$ (Å)	$\Delta W$ (eV.Å <sup>-1</sup> )	$\sigma_p$ (GPa)
[100](010)	3,21	4,1	-	3,21	$3 \cdot 10^{-3}$	0,2
[100](001)	3,21	1,5	-	1,6	$3 \cdot 10^{-3}$	0,3
[100](011)	3,21	1,3	-	3,21	$9 \cdot 10^{-2}$	4,4
1/2[110](001)	5,19	1,7	-	1,6	$3 \cdot 10^{-2}$	1,9
1/2[110](110)	5,19	$\zeta_1=1,8; \zeta_2=0,8$	5,3	5,19	0,4	13,7
[001](100)	7,33	1	11,8	7,33	0,6	13,8
[001](110)	7,33	1	13,7	7,33	0,9	12,3
[001](010)	7,33	4,6	38,8	7,33	0,01	0,1
[010](001)	9,87	2,1	20,2	4,93	0,6	6,8
[010](100)	9,87	$\zeta_1=11,6; \zeta_2=1,2$	22,2	9,87	1,5	10,9

TABLE 3.10 – Résultats du modèle de Peierls pour les dislocations coin dans  $CaIrO_3$  à 0GPa.  $b$  est le module du vecteur de Burgers,  $\zeta$  est la demi-largeur du coeur de la dislocation,  $a'$  la périodicité du cristal dans le mouvement de la ligne,  $\Delta$  la distance de séparation entre deux dislocations partielles le cas échéant,  $\Delta W$  et  $\sigma_p$  sont l'énergie et la contrainte de Peierls. Pour les dislocations [010](100) et 1/2[110](110), les valeurs de  $\zeta$  sont présentés pour la densité locale de dislocation centrale ( $\zeta_1$ ) et la densité locale externe ( $\zeta_2$ ).

### les dislocations de vecteur de Burgers [100]

Les profils de densité locale de dislocations des figures (3.10-a-b-c) et (3.11-a-b-c) pour les dislocations vis montrent un seul pic, quel que soit le plan de glissement (0kl) dans les deux analogues étudiés. Nous sommes en présence d'une dislocation vis non-dissociée pour toutes les dislocations [100](0kl), dans les deux matériaux. On vérifie également que les caractères coin de ces dislocations sont non-dissociés. Les étalements du coeur des dislocations sont compris entre 0,9 et 1,4Å et entre 1,7 et 2,2Å pour les dislocations vis et coin de  $MgGeO_3$ . Dans le cas de l'iridiate de calcium, les étalements sont compris entre 0,5 et 1,6Å et entre 1,3 et 4,1Å pour ces mêmes caractères.

Les contraintes de Peierls sont plus élevées pour les caractères vis que pour les caractères coin des dislocations [100](0kl) dans les deux matériaux. Parmi ces contraintes calculées pour les caractères vis des dislocations [100](0kl), la plus petite est pour le système de glissement [100](001) dans le cas du germanate et [100](010) dans le cas de l'iridiate de calcium.

### les dislocations de vecteur de Burgers [010]

Les dislocations [010](h0l) présentent différentes structures de coeurs en fonction du plan de glissement. Ces structures de coeurs sont similaires dans les deux phases étudiées.

Dans le plan (100), la densité locale de dislocations  $\rho$  pour le caractère vis présente trois pics distincts et déconvolués : la dislocation [010](100) se dissocie en trois dislocations partielles avec des vecteurs de Burgers colinéaires (cf. figures (3.10-d) et (3.11-d)). On vérifie également ce résultat pour le caractère coin des dislocations. Les contraintes de Peierls sont similaires entre le caractère vis et coin, et ce pour les deux matériaux : environ 70GPa pour le germanate et environ 10GPa pour l'iridiate de calcium.

Dans le plan (001), la dislocation se dissocie en deux dislocations partielles, pour les caractères vis et coin des deux matériaux (voir les figures (3.10-e) et (3.11-e) pour une illustration sur le caractère vis qui montre une densité locale de dislocation  $\rho$  distribuée en deux pics distincts). Les distances de séparation entre dislocations partielles est grande : environ 25Å dans le germanate et comprises entre 12 et 20Å dans  $CaIrO_3$ . Le caractère coin de ces dislocations dirige la mobilité des dislocations [010](001) car ce caractère présente une contrainte de Peierls plus élevée que pour le caractère vis : 23,9GPa contre 5,8GPa pour le germanate et 6,8GPa contre 0,4GPa pour l'iridiate de calcium.

### les dislocations de vecteur de Burgers [001]

Les dislocations [001](hk0) sont dissociées en deux dislocations partielles quel que soit le plan de glissement de la dislocation et ceci pour les deux phases étudiées (cf. figures (3.10-f-g-h) et (3.11-f-g-h)). Les distances de séparation entre dislocations partielles sont comprises entre 3,7 et 7,5Å et entre 7,5 et 14,5Å pour les caractères vis et coin du germanate et entre 5,2 et 16,2Å et entre 11,8 et 38,8Å pour ces mêmes caractères dans l'iridiate de calcium. Le calcul des contraintes de Peierls montrent que les caractères contrôlant la mobilité des dislocations [001](hk0) ne sont pas les mêmes en fonction du matériau. Les contraintes de Peierls du caractère vis sont toujours supérieures aux contraintes de Peierls du caractère coin pour le glissement [001] dans  $CaIrO_3$  et pour [001](100) dans  $MgGeO_3$ . Le caractère coin freine la mobilité de la dislocation dans les systèmes de glissement [001](010) et [001](110) du germanate.

### les dislocations de vecteur de Burgers $1/2[110]$

Les dislocations  $1/2[110]$  se dissocient en deux dislocations partielles dans le plan (110) pour les caractères vis et coin dans le germanate et en trois dislocations partielles pour l'iridiate de calcium. Ceci est visible sur les figures (3.10-i) et (3.11-i) et qui montrent une densité locale de dislocations distribuées en deux pics et trois pics pour  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$ . La mobilité de ces dislocations est dirigée par le caractère vis qui présente les contraintes de Peierls les plus élevées par rapport au caractère coin : 266GPa contre 117GPa pour le germanate et 38GPa contre 14GPa pour l'iridiate de calcium.

Dans le plan (001), les dislocations de vecteur de Burgers  $1/2[110]$  sont non-dissociées pour les caractères vis et coin de  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$ . Les figures (3.10-i) et (3.11-i) montrent un seul pic sur la densité locale de dislocation  $\rho$ . La mobilité de cette dislocation est contrôlée par le caractère coin dans le germanate ( $\sigma_p^{coin}=81\text{GPa}$  et  $\sigma_p^{vis}=5\text{GPa}$ ) en opposition avec l'iridiate de calcium où c'est le caractère vis qui dirige la mobilité de la dislocation ( $\sigma_p^{coin}=2\text{GPa}$  et  $\sigma_p^{vis}=17\text{GPa}$ ).

### 3.3.4 Orientations préférentielles des cristaux

Nous terminons l'étude de la plasticité des deux phases post-perovskite  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  par la détermination des orientations préférentielles des cristaux avec le modèle VPSC. Nous effectuons également la simulation pour la post-perovskite  $MgSiO_3$  pour une comparaison directe entre les orientations préférentielles des cristaux calculées pour la post-perovskite  $MgSiO_3$  et ses analogues. Ce modèle VPSC nécessite l'introduction de la dureté relative des systèmes

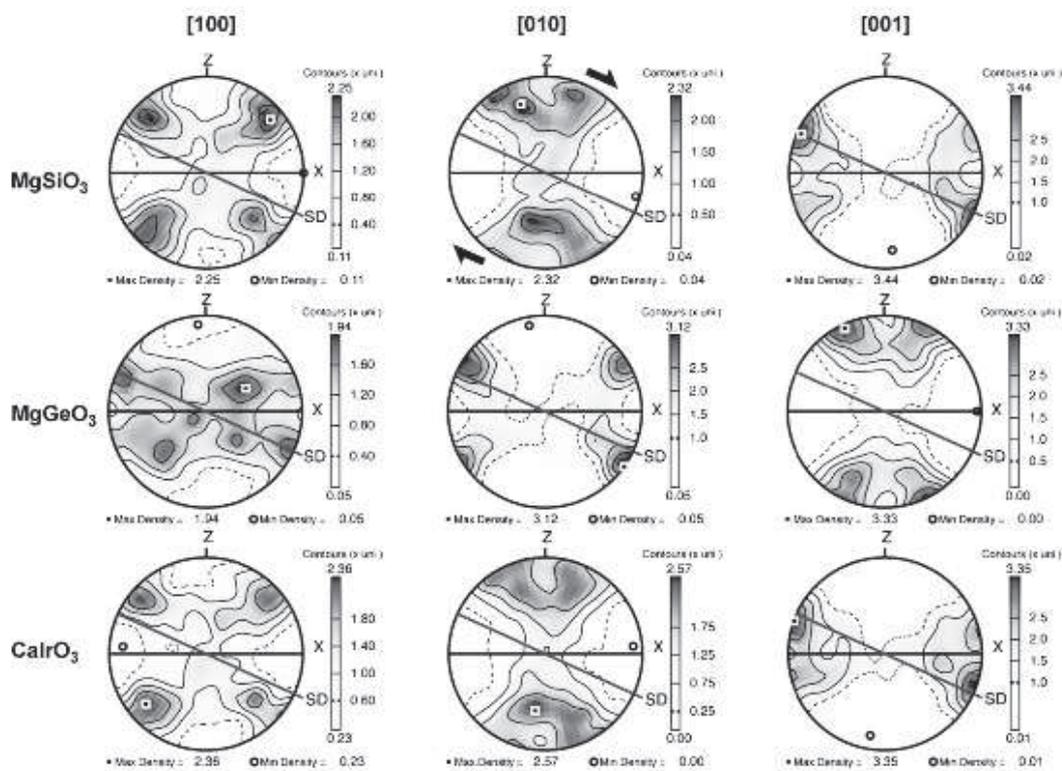


FIG 3.12 – Orientations préférentielles des cristaux de post-perovskite sous l'action d'un cisaillement simple. Le taux de déformation est égal à 1,73. Sur ces figures de pôles, SD est la direction du cisaillement et la ligne inclinée est le plan de cisaillement.

de glissement. Cette dureté relative est modélisée par la contrainte de Peierls des systèmes de glissement que nous avons calculé, normalisée par rapport à la contrainte de Peierls du système de glissement le plus facile. Pour la post-perovskite  $MgSiO_3$ , nous utilisons les contraintes de Peierls calculées par Carrez *et al.* (2007b). La dureté relative, le rapport  $\sigma_p/\sigma_p$  du système de glissement le plus facile, est donnée dans le tableau (3.11) pour tous les systèmes de glissement dans les trois phases post-perovskite étudiées.

Le calcul des orientations préférentielles des cristaux avec le modèle VPSC pour ces trois phases a été réalisé par David Mainprice au laboratoire Géosciences de Montpellier. La figure (3.12) montre les orientations préférentielles des cristaux déformés en cisaillement simple (le taux de déformation est égale à 1,73) pour ces trois phases obtenues avec ce modèle.

Les résultats issus de la modélisation VPSC pour  $MgSiO_3$  et  $CaIrO_3$  sont similaires avec les plus grandes densités sur la figure de pôle [001] (densité maximale : 3,44) près de la direction de cisaillement. Sur les figures de pôles [100] et [010], les densités les plus importantes apparaissent pour des angles éloignés de la direction de cisaillement : les systèmes de glissement dominants

	système de glissement	$\sigma_p$ (GPa) segment vis	$\sigma_p$ (GPa) segment coin	$\sigma_p^{max}$ (GPa)	$\sigma_p^{max}$ normalisée $/\sigma_p^{max}$ du sys. le plus facile
<i>MgSiO<sub>3</sub></i>	[001](010)	18,5	12,2	18,5	1
	[100](001)	47,3	0,3	47,3	2,6
	[001](110)	54,4	35,5	54,4	2,9
	1/2[110](001)	1,8	76,7	76,7	4,1
	[010](001)	0,1	75,8	75,8	4,1
	[100](010)	86,9	4,2	86,9	4,7
	[010](100)	95,5	57,3	95,5	5,2
	[001](100)	99,3	37,8	99,3	5,4
	[100](011)	125,7	9,3	125,7	6,8
	1/2[110](110)	154,6	46,2	154,6	8,4
<i>MgGeO<sub>3</sub></i>	[100](001)	17,1	0,01	17,1	1
	[010](001)	5,8	23,9	23,9	1,4
	[001](010)	20,1	27,9	27,9	1,6
	[001](100)	48,9	14,8	48,9	2,8
	[010](100)	68,5	69,1	69,1	4,0
	[001](110)	45,9	75,6	75,6	4,4
	1/2[110](001)	4,9	81,3	81,3	4,7
	[100](011)	89,9	0,8	89,9	5,2
	[100](010)	121,6	4,4	121,6	7,1
	1/2[110](110)	266,0	116,6	266,0	15,5
<i>CaIrO<sub>3</sub></i>	[001](010)	0,9	0,1	0,9	1
	[010](001)	0,4	6,8	6,8	7,5
	[100](010)	10,5	0,2	10,5	11,6
	[010](100)	9	10,9	10,9	12,1
	1/2[110](001)	17,3	1,9	17,3	19,2
	[100](001)	28	0,3	28	31,1
	[001](110)	35,4	12,3	35,4	39,3
	1/2[110](110)	37,8	13,7	37,8	42
	[001](100)	53	13,8	53	58,9
	[100](011)	61,6	4,4	61,6	68,4

TAB 3.11 – Résumé des contraintes de Peierls des caractères vis et coin des dislocations dans *MgSiO<sub>3</sub>* à 120GPa, *MgGeO<sub>3</sub>* à 120GPa et *CaIrO<sub>3</sub>* à 0GPa. Les données pour le silicate sont issues de Carrez *et al.* (2007b).  $\sigma_p^{max}$  est le maximum entre la contrainte de Peierls calculée pour le caractère vis et pour le caractère coin d'une dislocation.

la déformation pour le silicate et l'irradiate de calcium sont donc  $[001](010)$  et  $[001](100)$ . Dans le cas du germanate, les plus grandes densités apparaissent sur la figure de pôle  $[001]$  loin de la direction de cisaillement et sur la figure de pôle  $[010]$ , dans la direction du cisaillement. Ce résultat suggère que la déformation du germanate serait assurée par le système  $[010](001)$ .

## 3.4 Discussion et comparaison avec la phase post-perovskite $MgSiO_3$

### 3.4.1 Structures de coeurs de dislocations de $MgSiO_3$ et de ses analogues basses pression.

Nous avons déterminé les structures de coeurs des dislocations vis et coin associées aux dix systèmes de glissement susceptibles de participer à la déformation plastique des phases post-perovskite  $MgGeO_3$  et  $MgSiO_3$  :  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[100]\{011\}$ ,  $[010](100)$ ,  $[010](001)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001]\{110\}$ ,  $1/2[110](001)$ ,  $1/2[110]\{110\}$  avec la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro. Ce même modèle a été utilisé par Carrez *et al.* (2007b) pour déterminer les structures de coeurs de ces même dislocations dans la post-perovskite  $MgSiO_3$  à 120GPa. Nous pouvons alors comparer directement les structures de coeurs des dislocations de la post-perovskite  $MgSiO_3$  avec celles de ses analogues isostructuraux stables à plus basse pression.

Les structures de coeurs des dislocations  $[100](0kl)$  que nous avons déterminé dans  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  sont non-dissociées. Cette structure de coeur est similaire à celle déterminée dans  $MgSiO_3$ . Cette structure non-dissociée pour les dislocations  $[100](0kl)$  dans les trois phases est due à la forme des courbes des énergies de fautes d'empilement généralisées en fonction du cisaillement du glissement  $[100](0kl)$  qui montre un maximum global unique (cf. figures (3.8) et (3.9)). Expérimentalement, les dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$  sont les seules caractérisées en microscopie électronique en transmission sur l'iridiate de calcium (Miyajima *et al.*, 2006; Miyajima & Walte, 2009). Les clichés obtenus ne montrent pas de dissociation de cette dislocation, en accord avec nos calculs de structures de coeurs.

Les dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  présentent deux types de structures de coeurs en fonction de leur plan de glissement pour  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$ . Les dislocations se dissocient en deux dislocations partielles dans le plan (001) et en trois dislocations partielles dans le plan (100). Ces dissociations de dislocations sont une conséquence des formes des courbes  $\gamma = f(f)$  des figures (3.8) et (3.9) qui montrent un minimum local à 50% de cisaillement pour le système  $[010](001)$  et trois maxima, à 25, 50 et 75% de cisaillement, pour le système  $[010](100)$ . Ces résultats pour le glissement  $[010]$  sont en accord avec les résultats mis en évidence sur la post-perovskite  $MgSiO_3$ . Dans ce matériau, les dislocations  $[010](001)$  et  $[010](100)$  apparaissent également dissociées en deux et trois dislocations partielles.

Nous avons mis en évidence une dissociation des dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  en deux dislocations partielles dans les plans (hk0) pour les deux phases post-perovskite que

nous avons étudié. Une fois de plus, cette dissociation est expliquée par la forme des courbes  $\gamma = f(f)$  des figures (3.8) et (3.9) qui mettent en évidence une faute d'empilement stable pour un cisaillement de 50% dans la direction [001]. Cette faute d'empilement sépare les deux dislocations partielles. Dans  $MgSiO_3$ , Carrez *et al.* (2007b) ont également mis en évidence une dissociation de ces dislocations [001](hk0) en deux dislocations partielles.

Enfin, les dislocations de vecteur de Burgers  $1/2[110]$  présentent des structures de coeur différentes en fonction du plan de glissement et du matériau : la dislocation est non-dissociée lorsqu'elle est introduite dans le plan (001) et dissociée en deux ou trois dislocations partielles dans le plan (110) pour le germanate et l'iridiate de calcium. La forme des courbes des énergies de fautes d'empilement généralisées de ces systèmes de glissement justifient ce résultat (cf. figures (3.8) et (3.9)). Les résultats sur  $MgSiO_3$  montrent une dislocation  $1/2[110]$  qui ne se dissocie pas quel que soit son plan de glissement, en opposition avec le résultat de la dislocation  $1/2[110](110)$  dans les analogues.

Hormis ce dernier cas, les structures de coeurs des dislocations sont similaires dans les trois phases post-perovskite  $MgSiO_3$ ,  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  : la cristallographie n'a pas d'influence majeure sur la structure de coeur des dislocations dans la phase post-perovskite.

### 3.4.2 Facilité des systèmes de glissement et anisotropie plastique

Les calculs de contraintes de Peierls que nous avons effectué sur les dislocations nous renseignent sur la facilité des systèmes de glissement de la post-perovskite. Nous avons résumé les contraintes de Peierls que nous avons calculé pour  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  dans le tableau (3.11). Nous y avons ajouté les résultats obtenus par Carrez *et al.* (2007b) sur la post-perovskite  $MgSiO_3$ . La mobilité d'une boucle de dislocation est contrôlée par son caractère le plus lent, c'est-à-dire le caractère présentant la contrainte de Peierls la plus élevée pour un système de glissement. Cette contrainte est appelée  $\sigma_p^{max}$ . En comparant cette valeur de  $\sigma_p^{max}$  obtenue pour chaque système de glissement, nous pouvons mettre en évidence le système de glissement le plus facile : le système de glissement le plus facile présente la valeur de  $\sigma_p^{max}$  la moins élevée. De cette façon, nous montrons que le système de glissement [001](010) est le plus facile pour  $MgSiO_3$  et  $CaIrO_3$ . Pour le germanate, le système de glissement [100](001) présente la valeur de  $\sigma_p^{max}$  la moins élevée.

La normalisation des contraintes de Peierls  $\sigma_p^{max}$  par rapport à la valeur obtenue pour le système de glissement le plus facile met en évidence l'apparition d'une anisotropie plastique

différente en fonction du matériau. D'après les valeurs du tableau (3.11), le second système de glissement le plus facile dans  $MgSiO_3$  post-perovskite, le système  $[100](001)$  est 2,6 fois plus dur que le glissement  $[001](010)$ . Pour le germanate, le second système de glissement le plus facile ( $[010](001)$ ) est 1,4 fois plus dur que  $[100](001)$  et pour l'iridiate de calcium, ce second système de glissement ( $[010](001)$ ) est 7,5 fois plus dur que  $[001](010)$ . Les systèmes les plus durs de ces trois phases sont respectivement 8,4, 15,5 et 68,4 fois plus durs que le système de glissement le plus facile pour  $MgSiO_3$ ,  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$ . Ces résultats semblent montrer que l'iridiate de calcium est plus anisotrope d'un point de vue plastique que les post-perovskites magnésiennes.

On peut représenter le degré d'anisotropie plastique de ces phases à l'aide de la loi de Schmid et Boas. Cette loi permet de calculer la contrainte critique d'écoulement plastique en fonction de la contrainte appliquée et du facteur de Schmid pour chaque système de glissement. Nous considérons un monocristal de post-perovskite que nous sollicitons avec différentes orientations par rapport aux axes cristallographiques  $[100]$ ,  $[010]$  et  $[001]$ . Pour chaque orientation de la sollicitation, nous calculons le produit du facteur de Schmid par la contrainte de Peierls  $\sigma_p^{max}$ , assimilée à la contrainte critique appliquée et projetée, des dix systèmes de glissement que nous avons étudiés. Nous obtenons ainsi une contrainte d'écoulement plastique critique pour chaque système de glissement et pour chaque orientation de la sollicitation. On reporte le système de glissement présentant la contrainte d'écoulement plastique critique la plus faible en fonction de l'orientation de la sollicitation sur la figure (3.13) pour les trois phases étudiées.

Comme on peut le constater, plusieurs systèmes de glissement apparaissent pour le silicate et le germanate, alors qu'un système de glissement est prépondérant dans le cas de l'iridiate de calcium. Ici, nous avons donc deux matériaux plus isotropes plastiquement,  $MgSiO_3$  et  $MgGeO_3$  par rapport à  $CaIrO_3$ .

Cette différence d'anisotropie plastique est une conséquence directe des énergies de liaisons inter-atomiques. Nous avons calculé les énergies des liaisons intervenant dans nos trois matériaux en cisillant notre cristal dans la direction  $[100]$  dans le plan  $(010)$  pour différents niveaux du plan de cisaillement. Nous choisissons d'utiliser ce plan  $(010)$  de part la structure en couches de la post-perovskite. De cette façon, on sélectionne la liaison atomique que nous coupons. La supercellule  $[100](010)$  est cisillée de 0 à  $b$ , le module du vecteur de Burgers et les positions atomiques ne sont pas relaxées. On considère la liaison coupée pour un cisaillement égale à 50% et la valeur d'énergie associée à ce cisaillement est l'énergie de la liaison. La figure (3.14) présente les énergies des liaisons  $Ca - O$ ,  $Mg - O$ ,  $Si - O$ ,  $Ge - O$  et  $Ir - O$  dans ces matériaux. Comme

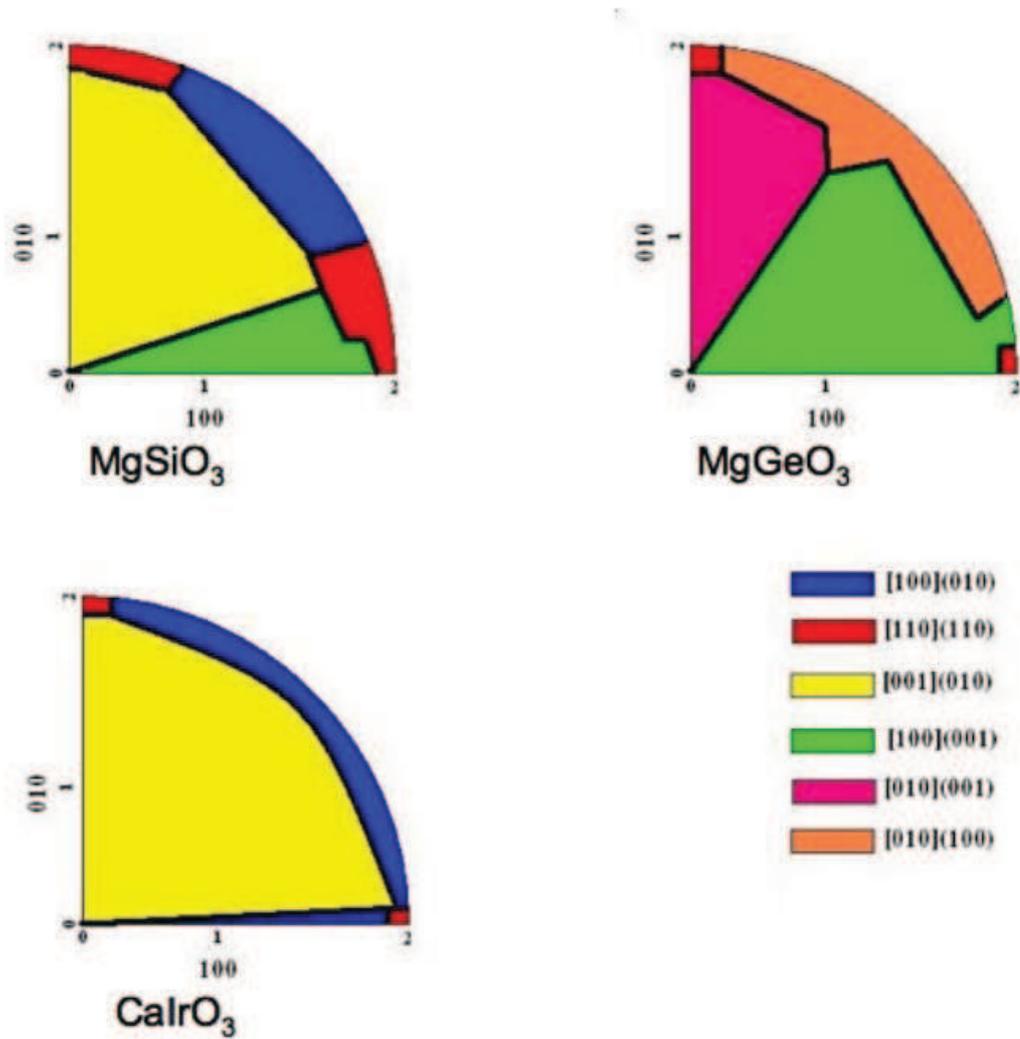


FIG 3.13 – Systèmes de glissement présentant la plus faible contrainte d'écoulement plastique critique en fonction de l'orientation de la sollicitation appliquée pour les phases post-perovskites  $MgSiO_3$ ,  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  monocristallines.

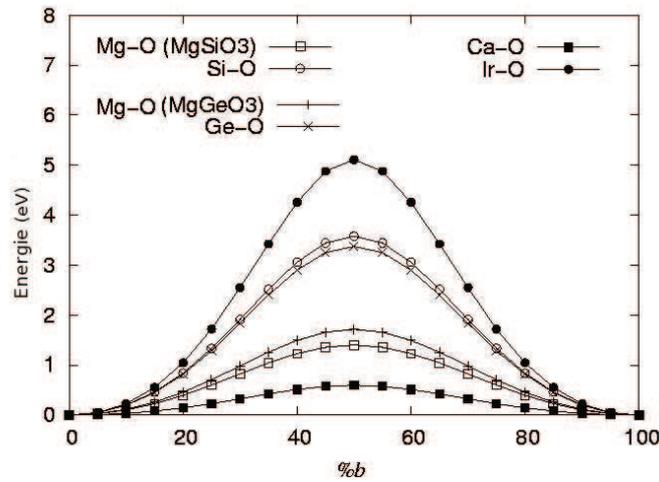


FIG 3.14 – Energies de fautes d’empilement généralisées du système  $[100](010)$  trois phases post-perovskite étudiées. Les positions atomiques ne sont pas relaxées. Pour chaque matériau, deux niveaux de coupure ont été choisis de façon à ne cisailer que les liaisons  $x-O$  ( $x = Mg, Ca$ ) ou  $y-O$  ( $y = Ir, Si, Ge$ ).

on peut le voir, la différence d’énergie entre les liaisons  $Ir-O$  et  $Ca-O$  est plus importante que la différence entre  $Mg-O$  et  $Si-O$  dans le silicate et  $Mg-O$  et  $Ge-O$  dans le germanate. La selectivité des liaisons coupées entraîne l’anisotropie plastique observée.

### 3.4.3 Textures de déformation des analogues et comparaison avec l’expérience.

Les orientations préférentielles des cristaux ont été déterminées avec un modèle VPSC pour  $MgSiO_3$ ,  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  post-perovskite.

Nous avons montré que les orientations préférentielles des cristaux entre  $CaIrO_3$  et  $MgSiO_3$  sont très similaires. Elles montrent que la déformation de ces deux phases est dominée par l’activation des systèmes de glissement  $[001](010)$  et  $[001](100)$ . Les textures de déformation de l’iridiate de calcium ont été obtenue expérimentalement par plusieurs auteurs. Les expériences de déformation sur polycristaux menées par Yamazaki *et al.* (2006), Walte *et al.* (2007) et Niwa *et al.* (2007) mettent en évidence des orientations préférentielles des cristaux dominées par le système de glissement  $[100](010)$ . Nous donnons sur la figure (3.15) les textures obtenues expérimentalement par Yamazaki *et al.* (2006). De par son petit module de vecteur de Burgers et la structure en couches d’octaèdres parallèles au plan (010), le système de glissement  $[100](010)$  est intuitivement

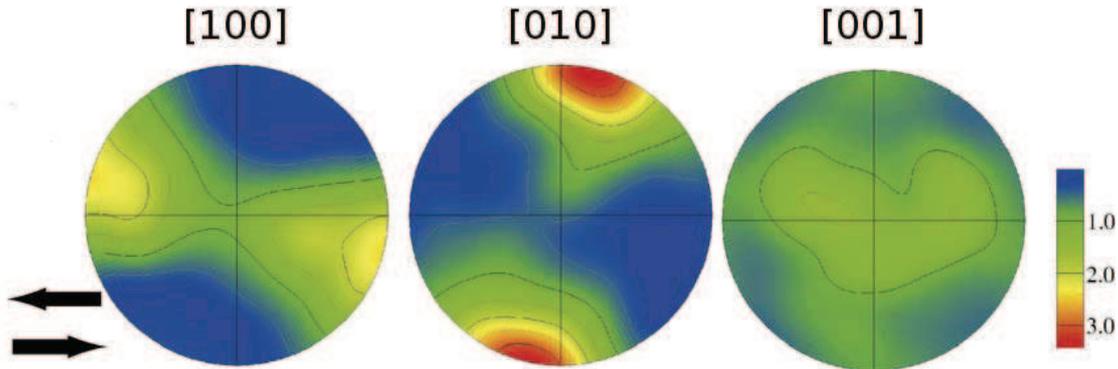


FIG 3.15 – Figures de pôle montrant les orientations préférentielles des cristaux de la post-perovskite  $CaIrO_3$  déformée en cisaillement à 0GPa par Yamazaki *et al.* (2006). Les densités maximales sur la figure de pôle [100] sont proches de la direction de cisaillement. Sur la figure de pôle [010], les densités maximales apparaissent pour les directions perpendiculaires à la direction de cisaillement : ces deux figures de pôle suggèrent le système de glissement  $[100](010)$  comme le système de glissement prédominant.

l'un des plus actifs dans la plasticité de la post-perovskite. Dans notre étude, nous montrons que le système  $[001](010)$  est le plus facile. La dislocation  $[001](010)$  se dissocie en deux dislocations partielles dans le plan (010), ce qui rend cette dislocation plus mobile que la dislocation  $[100](010)$  non-dissociée. Cependant, le modèle de Peierls-Nabarro que nous utilisons ici est unidimensionnel et ne permet que la détermination de structures de coeurs planaires pour les dislocations. Ce modèle ne prend pas en compte d'éventuelles dissociations de dislocations avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ou bien des étalements du coeur non-limités au plan de glissement de la dislocation. Ces dissociations et ces structures non-planaires pour les coeurs de dislocations ont une grande influence sur leur mobilité. Nous pouvons nous demander ici si de telles structures de coeurs sont possibles pour les dislocations  $[100](010)$  et  $[001](010)$  de  $CaIrO_3$  post-perovskite et rendrait compte des observations expérimentales sur la prédominance du système de glissement  $[100](010)$  dans les mécanismes de déformation.

Les orientations préférentielles des cristaux calculées pour  $MgGeO_3$  avec le modèle VPSC supposent une activité importante du système de glissement  $[010](001)$ . La seule étude expérimentale sur la plasticité de  $MgGeO_3$  post-perovskite a été réalisée par Merkel *et al.* (2006) en cellules à enclumes diamant. De la poudre d'orthopyroxène  $MgGeO_3$  a été transformée en post-perovskite à  $P=104$ GPa et  $T=1600$ K et a ensuite été déformée plastiquement en compression à 130GPa. Les textures obtenues suggèrent une activité importante des plans  $\{110\}$ , (112) et (100) dans la plasticité de la post-perovskite  $MgGeO_3$  (cf. figure (3.16)). Nos simulations ne repro-

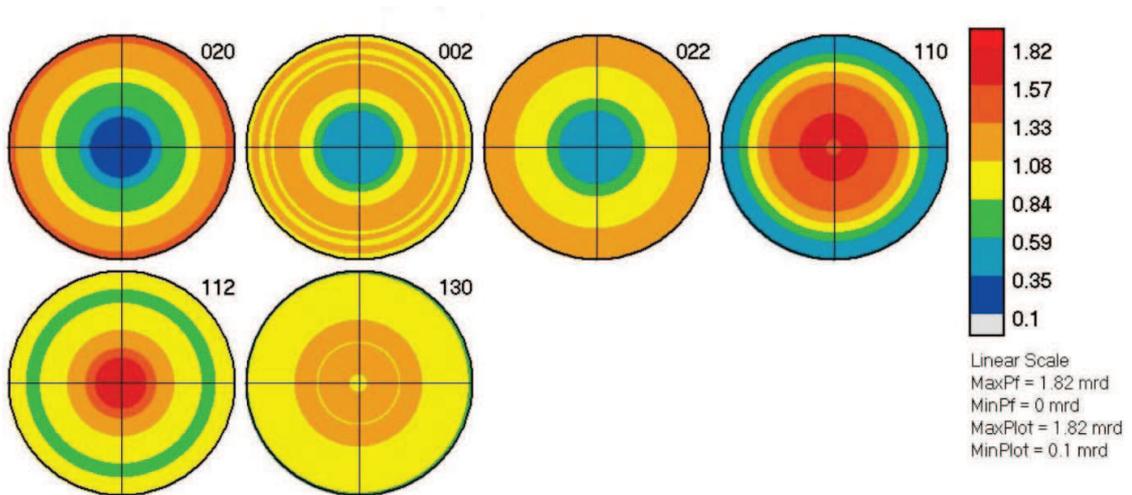


FIG 3.16 – Figures de pôle montrant les orientations préférentielles des cristaux de la post-perovskite  $MgGeO_3$  déformée en compression à 130GPa par Merkel (communication personnelle). Le centre des figures correspond à la direction de compression. Les densités maximales sur les figures de pôle (110) et (112) montrent que ces deux plans participent activement à la déformation plastique.

duisent pas les textures obtenues par Merkel *et al.*. Cependant, il est possible que ces textures obtenues ne soient pas dues uniquement à la déformation plastique et qu'elles portent également la signature de la transformation de phases entre l'orthopyroxène et la post-perovskite  $MgGeO_3$  (Niwa *et al.*, 2007).

### 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons déterminé les structures de coeur des dislocations et les contraintes de Peierls de  $MgGeO_3$  à 120GPa et  $CaIrO_3$  à 0GPa, deux analogues de la phase post-perovskite  $MgSiO_3$ . Nous avons comparé les résultats obtenus sur les analogues avec ceux obtenus par Carrez *et al.* (2007b) sur la post-perovskite  $MgSiO_3$  à 120GPa. Les principaux résultats sont :

- Les trois phases post-perovskite  $MgSiO_3$ ,  $MgGeO_3$  et  $CaIrO_3$  possèdent des structures de coeur de dislocation quasi-similaires. Par contre, des différences apparaissent sur la mobilité des dislocations entre ces trois phases. Le système de glissement  $[001](010)$  de  $MgSiO_3$  et  $CaIrO_3$  présentent les contraintes de Peierls les plus basses. Dans le cas du germanate, le système de glissement  $[100](001)$  est le plus facile.
- L'anisotropie plastique du monocristal de  $MgGeO_3$  est proche de celle de  $MgSiO_3$ . L'irradiate de calcium est plus anisotrope plastiquement que ces deux autres phases. Ceci est lié

à la différence entre les énergies de liaisons impliquées dans ces phases.

- Les orientations préférentielles des cristaux calculées avec un modèle VPSC de  $MgSiO_3$  et de  $CaIrO_3$  sont très proches, dominées par les systèmes de glissement  $[001](010)$  et  $[001](100)$ . Ces résultats sont différents de ceux obtenus pour le germanate qui montrent une prépondérance du système de glissement  $[010](001)$  dans les mécanismes de plasticité.  $CaIrO_3$  apparaît être l'analogie le plus susceptible de rendre compte des textures de déformation de  $MgSiO_3$  post-perovskite.

Nous mettons ici en évidence l'importance de la cristallographie sur la plasticité. Cet aspect apparaît aussi important que la structure cristalline, comme il était mentionné dans Poirier & Price (1999) sur l'étude des métaux cristallisés dans la structure hexagonale compacte. L'utilisation de matériaux analogues pour étudier la plasticité d'une phase est à regarder avec précaution.

## Chapitre 4

# Dislocations et mécanismes de plasticité de la wadsleyite à 15GPa.

L'étude présentée dans ce chapitre a donné lieu à une publication acceptée dans *Acta Materialia*.



Le modèle PREM de Dziewonski et Anderson montre un changement brutal des vitesses des ondes sismiques  $V_p$  et  $V_s$  à des profondeurs voisines de 410km et 520km. Cette couche est la partie supérieure de la zone de transition où règnent des pressions de 13 à 18GPa et des températures de 1400 ° C à 1500 ° C. Cette zone de transition est importante pour la dynamique du manteau : elle bloque temporairement les plaques lithosphériques en subduction avant de pénétrer dans le manteau inférieur (Brunet *et al.*, 2007; Morgan & Shearer, 1993). La wadsleyite est le minéral majoritaire dans cette partie du manteau et est le résultat d'une transformation de phase de l'olivine  $\alpha - (Mg_x, Fe_{1-x})_2SiO_4$ . La wadsleyite est 8% plus dense que l'olivine (Agee, 1998) : ce changement de densité, combiné aux propriétés élastiques de cette nouvelle phase est à l'origine du changement des vitesses des ondes sismiques observé à 410km de profondeur. La connaissance des propriétés plastiques de la wadsleyite est nécessaire pour comprendre la rhéologie et l'anisotropie sismique de la zone de transition.

La wadsleyite n'est pas stable aux conditions de pressions et températures ambiantes. Elle a été synthétisée pour la première fois par Ringwood & Major (1966). De par ses conditions de stabilité, les études expérimentales sur la plasticité de la wadsleyite ne peuvent être conduites que dans des presses multi-enclumes reproduisant les conditions de pressions et température de la zone de transition. Les premières expériences de déformation de la wadsleyite ont été menées à partir d'olivine transformée dans le champ de stabilité de la wadsleyite (Dupas *et al.*, 1994; Sharp *et al.*, 1994; Dupas-Bruzek *et al.*, 1998). Les systèmes de glissement ont été identifiés en microscopie électronique en transmission dans ces études. Une étude plus récente réalisée par Thurel *et al.* (Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a,b) en microscopie électronique en transmission a permis l'identification des principales dislocations et systèmes de glissement de ce minéral :  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[100]\{011\}$ ,  $[010]\{101\}$ ,  $[010](001)$ ,  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$  et  $\langle 101 \rangle(010)$  avec prépondérance des glissements  $[100]$  et  $1/2\langle 111 \rangle$ . Cependant, cette étude ne permet pas de savoir dans quelle mesure les systèmes de glissement participent à la déformation plastique de la wadsleyite. De plus, les études expérimentales réalisées montrent la faible participation du glissement des dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$ . Ceci est paradoxal car, comme nous le montrerons par la suite, les dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  sont plus favorables énergétiquement d'un point de vue élastique que les dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  et  $\langle 101 \rangle$ .

Dans ce chapitre, on se propose de déterminer les structures de coeur et les contraintes de Peierls des dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$ ,  $[010]$  et  $1/2\langle 111 \rangle$  avec le modèle de

Peierls-Nabarro-Galerkin. Ce modèle est applicable ici, de par la symétrie orthorhombique de la wadsleyite. On étudie également les dislocations de vecteurs de Burgers [001] et nous essaierons de comprendre pourquoi les dislocations possédant ce vecteur de Burgers ne participent pas à la déformation plastique de la wadsleyite. Les calculs seront réalisés à 15GPa, pression où la wadsleyite est stable, avec le potentiel empirique THB1 décrit au chapitre 2. Ce potentiel reproduit de manière convenable les propriétés élastiques et la réponse au cisaillement plastique de la wadsleyite, avec un gain de temps de calcul non-négligeable par rapport à des calculs *ab initio*.

## 4.1 Généralités sur la wadsleyite et déformation plastique.

La wadsleyite (ou  $\beta - (Mg_x, Fe_{1-x})_2SiO_4$ ) est un sorosilicate de structure spineloïde, polymorphe de haute pression de l'olivine. Le diagramme de phase du pôle magnésien de cette solution solide est donné sur la figure (4.1). Dans le manteau, au delà de 520km ( $P \sim 20$ GPa,  $T \sim 1600$  °C), cette wadsleyite  $\beta - (Mg_x, Fe_{1-x})_2SiO_4$  se transforme en un polymorphe plus dense : la ringwoodite  $\gamma - (Mg_x, Fe_{1-x})_2SiO_4$ .

La wadsleyite cristallise dans le système orthorhombique, dans le groupe d'espace *Imma*. Les paramètres de maille mesurés expérimentalement à 18,5GPa sont  $a=5,69$  Å ;  $b=11,44$  Å et  $c=8,26$  Å (Horiuchi & Sawamoto, 1981). Des projections de la structure de la wadsleyite sont présentées sur la figure (4.2).

La plasticité de la wadsleyite a été étudiée expérimentalement par plusieurs auteurs grâce à l'utilisation de presses multi-enclumes. Les premières expériences furent conduites en 1994 par Sharp *et al.* (1994) et Dupas *et al.* (1994). Les expériences de Sharp consistaient à déformer de la wadsleyite par compression à 16GPa et à 1600 °C à partir d'olivine de San Carlos monocristalline. Les auteurs caractérisèrent des dislocations de vecteur de Burgers [100]. Ils mirent également en évidence des fautes d'empilement dans le plan (010) bordées par deux dislocations partielles de vecteur de Burgers  $1/2\langle 101 \rangle$ . Ces fautes d'empilement dans le plan (010) ont déjà été observées dans la météorite de Peace River (Price *et al.*, 1983; Price, 1983). L'étude menée par Dupas *et al.* (1994) à 14GPa et 1400 °C en comprimant une harzburgite synthétique conduisit à la même caractérisation de dislocations avec, en plus, l'identification du système  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ . Tous ces résultats furent ensuite confirmés par l'étude de Dupas-Bruzek *et al.* (1998) à 11GPa et 1250 °C par transformation d'olivine de San Carlos. Une étude plus complète fut réalisée par

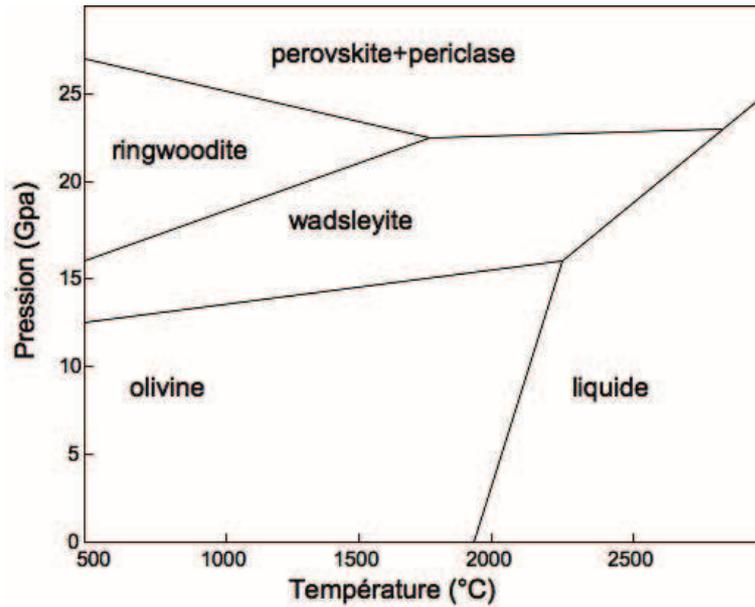


FIG 4.1 – Diagramme de phases du système  $Mg_2SiO_4$ . (Image reproduite d'après Fei *et al.* (1990).)

Thurel *et al.* (Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a,b). Ici, la wadsleyite a été déformée aussi bien en compression qu'en cisaillement. Neuf systèmes de glissement furent mis en évidence :  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[100]\{011\}$ ,  $[100]\{021\}$ ,  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ ,  $[010](001)$ ,  $[010]\{101\}$ ,  $[001](010)$  et  $\langle 101 \rangle(010)$  avec une majorité de dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$  et  $1/2\langle 111 \rangle$ .

Comme on peut le constater d'après ces études expérimentales, les directions du réseau de Bravais  $[100]$  et  $[010]$  ainsi que le vecteur  $1/2\langle 111 \rangle$ , dû au groupe d'espace centré, dominent la déformation de la wadsleyite. On peut également remarquer que les dislocations de vecteurs de Burgers  $[001]$  sont peu caractérisées expérimentalement. Paradoxalement, le paramètre  $c$  est plus petit que le paramètre  $b$  et donc, d'un point de vue élastique, les dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  sont plus favorables énergétiquement que les dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  (cf tableau (4.1)).

## 4.2 Méthode

Nous allons déterminer les structures de coeur ainsi que les contraintes de Peierls des dislocations vis et coin  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[010](100)$ ,  $[010](001)$ ,  $[001](010)$  et  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$  à 15GPa. La symétrie orthorhombique de la wadsleyite nous permet d'étudier ces dislocations dans la formulation du modèle de Peierls combiné avec les éléments diffus de Galerkin avec le

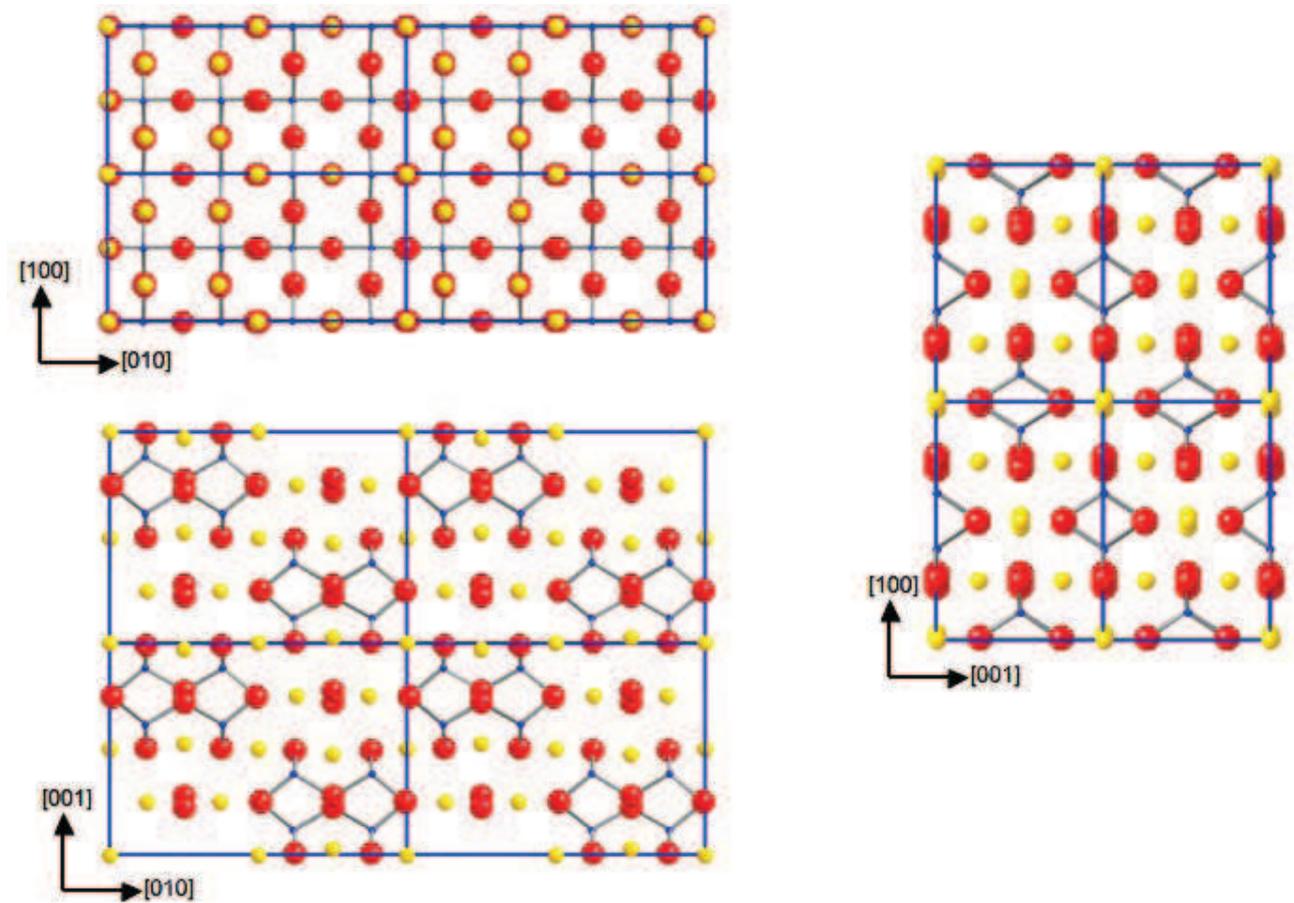


FIG 4.2 – Projection de 2\*2 mailles de la wadsleyite. Les atomes de magnésium sont en jaune, de silicium en bleu et d'oxygène en rouge. On met également en évidence les liaisons  $Si-O$ .

v. Burgers	E. relative
[100]	1
$1/2 \langle 111 \rangle$	1,8
[001]	2,0
[010]	4

TAB 4.1 – Energie élastique des dislocations dans la wadsleyite normalisée par rapport à l'énergie élastique des dislocations de vecteur de Burgers [100]. On considère que l'énergie élastique de la dislocation est simplement proportionnelle au module au carré du vecteur de Burgers.

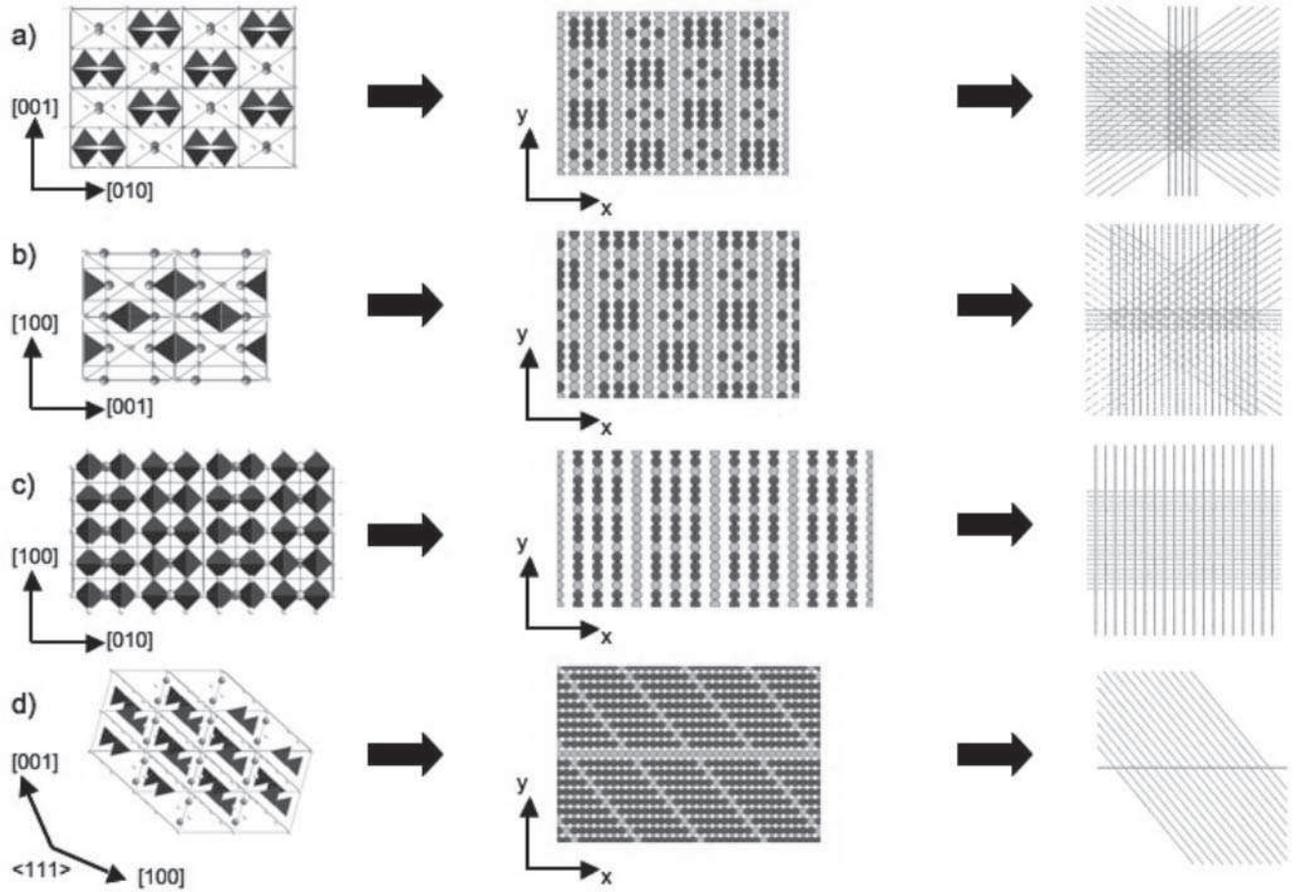


FIG 4.3 – Maillages de la structure cristalline utilisés pour l'application du modèle de Peierls-Galerkin. Nous posons également un repère orthonormé  $(xyz)$  sur ces maillages qui sera utilisé pour définir la contrainte appliquée sur la dislocation.

code *Cod<sup>2</sup>ex*. Nous devons mailler l'espace où sera introduite la dislocation. Nos maillages s'appuient sur la géométrie de la structure cristalline. Quatre maillages suffisent pour l'étude de nos dislocations. Ils sont présentés sur la figure (4.3). On y ajoute également des repères  $(xyz)$  qui seront utilisés pour définir les composantes du tenseur de contraintes que nous allons appliquer sur nos structures de coeurs de dislocations. Les dislocations étudiées en fonction du maillage utilisé sont :

- (a) : dislocations vis  $[100](010)$ ,  $[100](001)$  et dislocations coin  $[001](010)$ ,  $[010](001)$
- (b) : dislocations vis  $[010](100)$ ,  $[010](001)$  et dislocation coin  $[100](001)$
- (c) : dislocation vis  $[001](010)$  et dislocations coin  $[010](100)$ ,  $[100](010)$
- (d) : dislocations vis et coin  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$

L'utilisation du code *Cod<sup>2</sup>ex* requiert l'introduction des paramètres de maille, des constantes élastiques et des surfaces d'énergie de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  des plans de glissement

	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$
THB1- cette étude	5,5485	11,1869	8,0777
<i>ab initio</i> -cette étude	5,6067	11,2569	8,0559
exp. (18,5GPa)	5,6983	11,4380	8,2566

TABLE 4.2 – Paramètres de maille de la wadsleyite à 15GPa calculés avec le potentiel THB1 et *ab initio*. Les données expérimentales à 18,5GPa sont issues de Horiuchi & Sawamoto (1981).

des dislocations (100), (010), (001) et (101). L'introduction de ces plans contraint les dislocations vis [100] à ne s'étaler que dans les plans (010) et (001). Afin de modéliser ces dislocations vis de manière plus réaliste, nous ajoutons la surfaces de glissement (011) pour cette dislocation et dont nous calculons les énergies de fautes d'empilement généralisées. Ces paramètres physiques seront calculés avec le potentiel empirique THB1 décrit dans le chapitre 2, déjà utilisé pour modéliser les défauts *OH* dans la wadsleyite (Walker *et al.*, 2006). Cependant, nous calculerons également les paramètres de maille, les constantes élastiques et les  $\gamma$  – *lignes* des systèmes de glissement [100](010) et [100](001) *ab initio* (approximation GGA-pseudopotential PAW) afin de justifier l'utilisation d'un potentiel empirique pour l'étude de la wadsleyite à 15GPa.

## 4.3 Résultats

### 4.3.1 Structure et élasticité

Nous calculons dans un premier temps les paramètres de maille de la wadsleyite à 15GPa avec le potentiel THB1. Ces résultats sont comparés avec des calculs *ab initio* réalisés dans l'approximation GGA en utilisant des pseudo-potentiels construits avec la méthode PAW. Le tableau (4.2) présente les paramètres de mailles calculées avec le potentiel empirique, *ab initio* et les données expérimentales. Comme on peut le constater, les paramètres de maille sont bien reproduits avec une erreur relative inférieure à 10% par rapport aux calculs *ab initio*.

L'étude des dislocations que nous allons mener nécessite la connaissance des constantes élastiques. Nous allons les calculer avec ces potentiels ainsi qu'*ab initio*. Les résultats sont donnés dans le tableau (4.3). Les calculs basés sur des potentiels empiriques surestiment les constantes liées à la compression du cristal et sous-estiment celles liées au cisaillement par rapport aux calculs *ab initio*. Néanmoins, les constantes élastiques  $C_{ij}$  calculées avec le potentiel empirique THB1 sont dans l'ordre de grandeur des données *ab initio* que nous avons déterminé. Ces va-

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$
THB1-cette étude	492	478	415	102	113	121	179	174	192
<i>ab initio</i> -cette étude	439	431	350	116	126	120	116	130	140
Kiefer <i>et al.</i>	468	461	379	121	128	139	146	151	163
exp. à 14GPa (Zha <i>et al.</i> )	445	465	387	131	122	130	124	142	152

TAB 4.3 – Constantes élastiques (en GPa) de la wadsleyite à 15GPa. Une comparaison avec les données issues de Kiefer *et al.* (2001) et Zha *et al.* (2000) est également fournie.

leurs pour les  $C_{ij}$  sont également comparables aux données *ab initio* de Kiefer *et al.* (2001) et expérimentales de Zha *et al.* (2000) à 14GPa.

### 4.3.2 Calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées.

Dans cette section, nous calculons les énergies de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  pour cinq plans contenant les directions [100], [010], [001],  $1/2\langle 111 \rangle$  et susceptibles de jouer un rôle majeur dans la plasticité de la wadsleyite. Ce sont les plans (100), (010), (001), {011} et {101}. Nous utilisons la méthode décrite dans le chapitre 2. Les supercellules utilisées sont présentées sur la figure (4.4).

L'ajustement du potentiel empirique THB1 sur les paramètres de maille et les propriétés élastiques ne garantit pas la bonne description des propriétés plastiques de la wadsleyite. Il faut vérifier si la réponse du cristal au cisaillement plastique calculée avec le potentiel THB1 est identique avec des données *ab initio*. Les figures (4.5) comparent les résultats entre ces deux types de calculs pour les systèmes de glissement [100](010) et [100](001). Ces figures montrent que l'énergie de fautes d'empilement est toujours supérieure avec le potentiel THB1 par rapport aux calculs *ab initio* quelle que soit la valeur du cisaillement. Par contre, l'utilisation du potentiel THB1 reproduit correctement les formes des courbes d'énergie. L'utilisation de ce potentiel donnera les bonnes positions des fautes d'empilement ainsi que les réactions de dissociation des dislocations. Cependant, l'utilisation du potentiel empirique entraînera des structures de coeurs plus étroites et des contraintes de Peierls plus élevées qu'avec des calculs d'énergies de fautes *ab initio*.

Les résultats des  $\gamma$  – *surfaces* des plans (100), (010), (001), (011) et (101) calculées avec le potentiel THB1 sont représentés sur la figure (4.6). On ajoute à ces résultats, les  $\gamma$  – *lignes* des systèmes de glissement [100](0kl), [010](h0l) et  $1/2[111](101)$  sur la figure (4.7).

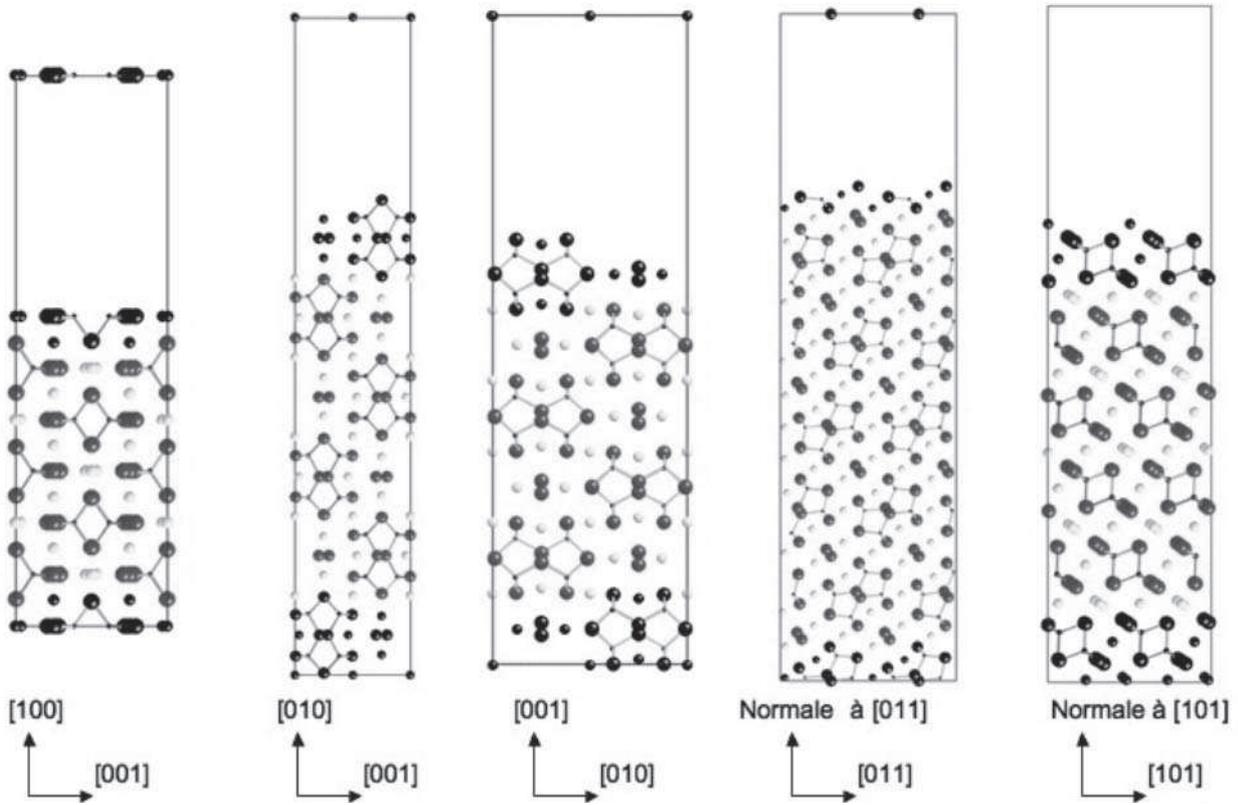


FIG 4.4 – Supercellules utilisées pour le calcul des énergies de fautes d'empilement généralisées dans le cas de la wadsleyite. Les atomes noirs ne sont pas autorisés à relaxer durant le calcul.

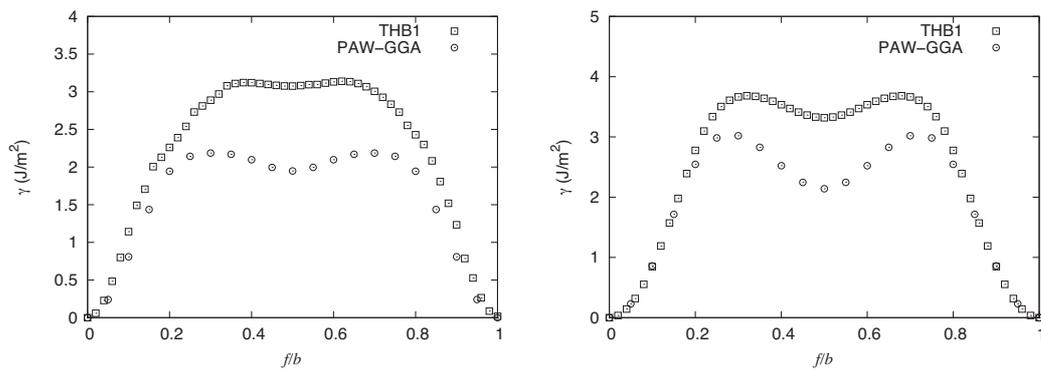


FIG 4.5 – Comparaison des énergies de fautes d'empilement généralisées calculées avec le potentiel THB1 et *ab initio* pour les systèmes de glissement  $[100](010)$  (à gauche) et  $[100](001)$  (à droite). (courbes non-lissées)

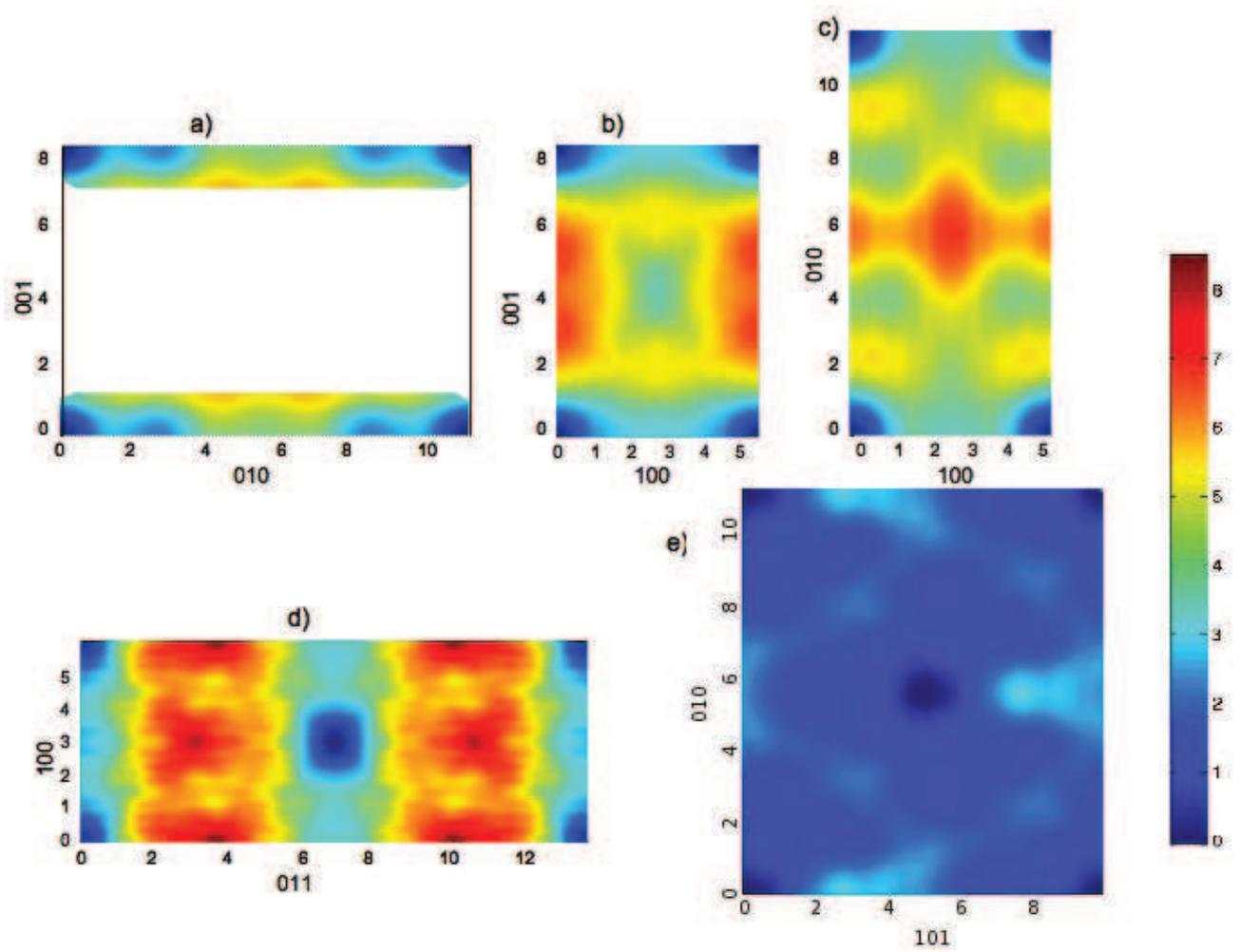


FIG 4.6 – Energie de fautes d'empilement généralisées en  $J.m^{-2}$  des plans (100) (a), (010) (b), (001) (c), {011} (d) et {101} (e) calculées à 15GPa avec le potentiel THB1. Les niveaux de couleurs correspondent à l'intensité de l'énergie de fautes. (courbes lissées)

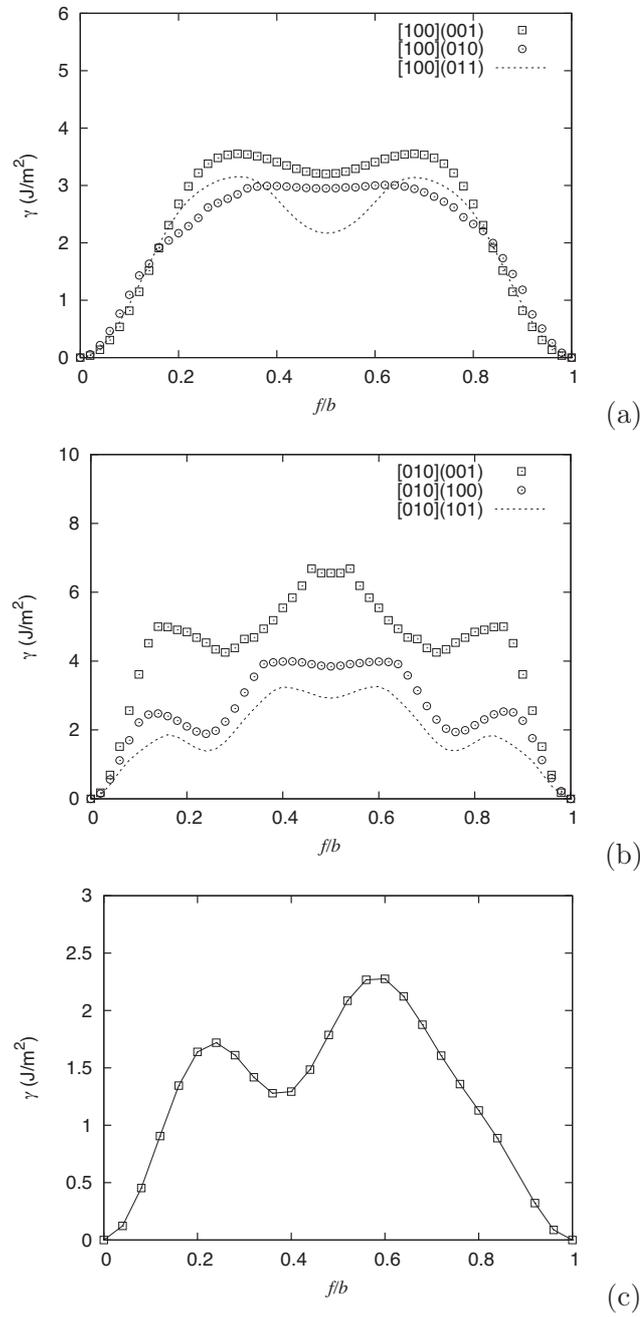


FIG 4.7 – Energie de fautes d'empilement généralisées en  $J.m^{-2}$  des systèmes de glissement  $[100](0kl)$  (a),  $[010](h0l)$  (b) et  $1/2[111](101)$  (c) calculées à 15GPa avec le potentiel THB1. (courbes non-lissées)

D'après ces figures, il apparait immédiatement que le plan (101) est plus facile à cisailier, quelle que soit la direction du cisaillement. Les cisaillements dans les directions [101] et  $1/2\langle 111 \rangle$  sont asymétriques et présentent des minima locaux pour des valeurs de 40% de cisaillement. La faute d'empilement stable au centre de cette surface correspond à la translation de réseau  $1/2\langle 111 \rangle$  provenant du mode de Bravais  $I$  de la wadsleyite.

Le cisaillement dans la direction [001] est difficile. Dans le plan (100), le cisaillement dans cette direction est limité à 15%. Les atomes d'oxygène de part et d'autre du plan de glissement se rapprochent et entraînent une divergence de l'énergie de la cellule de simulation. Dans le plan (010), le cisaillement suivant [001] possède un léger minimum local à 50% de cisaillement et est l'un des plus difficiles, avec un maximum de l'ordre de  $7 \text{ J.m}^{-2}$ . Par ailleurs, la  $\gamma$ -*surface* du plan (010) présente un minimum local d'énergie en son centre.

Le cisaillement dans la direction [100] possède un minimum local à 50% de cisaillement dans les plans (010), (001) et (011). Les différences d'énergie de fautes entre les différents plans pour ce cisaillement [100] sont assez faibles. Les maxima des courbes  $\gamma = f(f)$  de ces systèmes de glissement sont aux alentours de  $3 \text{ J.m}^{-2}$ , ce qui montre une assez bonne isotropie du cisaillement [100] dans les différents plans de glissement.

Dans les plans (100), (001) et {101}, les courbes  $\gamma = f(f)$  suivant la direction [010] présentent trois minima locaux. Les énergies de fautes d'empilement stables associés correspondent à des cisaillements  $b/4$ ,  $b/2$ ,  $3b/4$  dans les plans (100) et {101} et à des cisaillements  $b/3$ ,  $b/2$  et  $2b/3$  dans le plan (001). On peut également noter que le cisaillement [010] dans le plan (001) est difficile, avec un maximum d'énergie de fautes valant  $6,7 \text{ J.m}^{-2}$ .

Le tableau (4.4) donne les énergies de fautes maximales  $\gamma^{max}$  et les énergies de fautes stables ( $EFE$ ) des six systèmes de glissement étudiés : [100](010), [100](001), [010](100), [010](001), [001](010) et  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ . Les énergies de fautes maximales les plus petites sont pour les systèmes [100](010) et  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ , inférieures à  $3 \text{ J.m}^{-2}$ .

syst. gliss.	$\gamma^{max}$ ( $J.m^{-2}$ )	EFE ( $J.m^{-2}$ )
[100](010)	2,99	2,95 (b/2)
[100](001)	3,55	3,2 (b/2)
[010](100)	3,99	1,89 (b/4, 3b/4) 3,85 (b/2)
[010](001)	6,68	4,25 (b/3, 2b/3) 6,55 (b/2)
$1/2\langle 111 \rangle\{101\}$	2,29	1,28 (2b/5)
[001](010)	6,99	6,59 (b/2)

TABLE 4.4 – Résumé des calculs d'énergie de fautes d'empilement dans la wadsleyite. On donne le maximum  $\gamma^{max}$  et les énergies de fautes d'empilement stable (EFE) des six systèmes de glissement étudiés. La position des EFE est donnée entre parenthèses.

### 4.3.3 Application du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin à la wadsleyite.

Nous appliquons le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin décrit dans le chapitre 1 aux dislocations dans la wadsleyite. Nous étudions les dislocations [100](010), [100](001), [010](100), [010](001), [001](010) et  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ .

#### Etude des dislocations de vecteur de Burgers [100]

On détermine l'étalement  $f$  et la densité locale de vecteur de Burgers  $\rho$  dans leurs plans de glissement respectifs des dislocations [100](010) et [100](001), caractères vis et coin. Ces résultats sont donnés sur la figure (4.8) et résumés dans le tableau (4.5).

	maillage	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_{xy}$ (MPa)	$\sigma_{xz}$ (MPa)	$\sigma_{yz}$ (MPa)
vis [100](010)	a	2,0	5,0			480±25
vis [100](001)	a	3,8			1510±70	
coin [100](010)	c	2,9	7,6	310±15		
coin [100](001)	b	1,3	6,2	690±60		

TABLE 4.5 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations de vecteur de Burgers [100]. On utilise les maillages de la figure (4.3).  $\zeta$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité locale de dislocation.  $\Delta$  est la distance de séparation entre dislocations partielles.  $\sigma_{ij}$  est la contrainte critique  $ij$  appliquée d'après le maillage de la figure (4.3). Cette contrainte critique est assimilée à contrainte de Peierls.

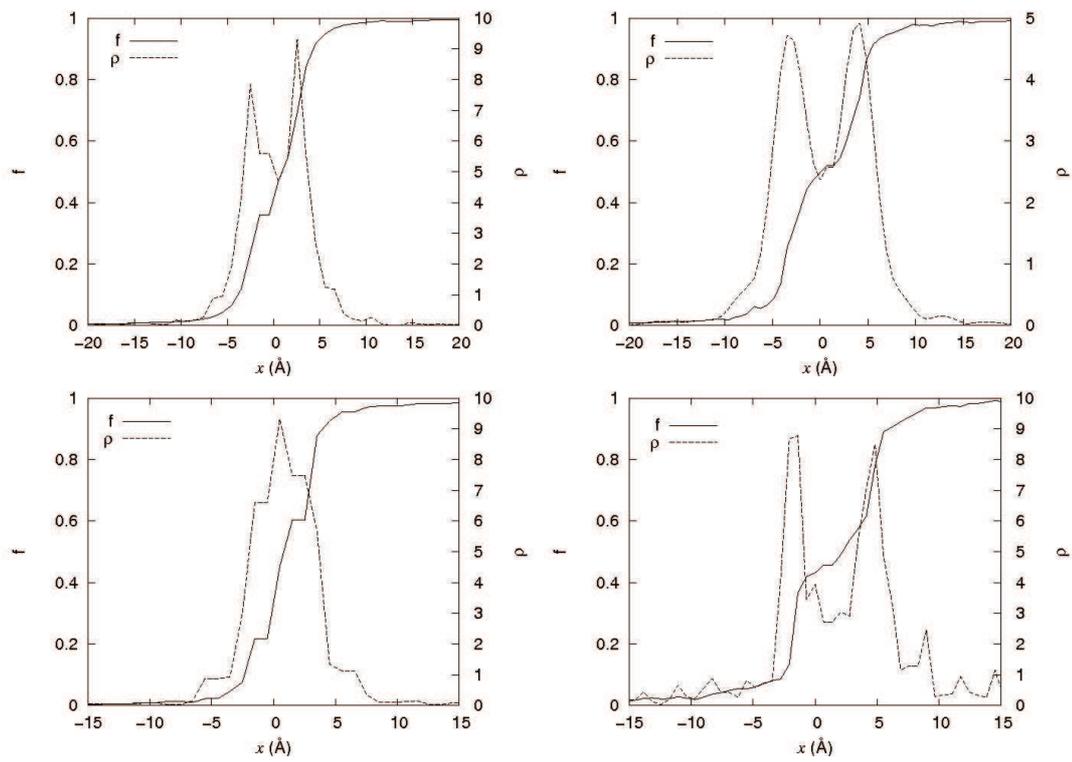


FIG 4.8 – Étalement  $f$  et densité locale de vecteur de Burgers  $\rho$  de la dislocation  $[100](010)$  (en haut) et  $[100](001)$  en bas pour les caractères vis (à gauche) et coin (à droite). Les étalements sont normalisés par rapport au module du vecteur de Burgers et les profils de densité locale sont donnés dans une unité arbitraire.

Nous avons vérifié que les caractères vis ne présentent aucune composante coin. De la même manière, l'analyse des caractères coin ne montre aucune composante vis sur ces dislocations.

Les profils de densités de dislocation  $\rho$  de la figure (4.8) montrent deux pics distincts mais convolués pour les caractères coin des deux dislocations  $[100](010)$  et  $[100](001)$  et le caractère vis de la dislocation  $[100](010)$ . Ces dislocations se dissocient en deux dislocations partielles. La distance de séparation entre dislocation partielles et leurs étalements respectifs (paramètre  $\zeta$ ) sont donnés dans le tableau (4.5). La distance de séparation entre dislocations partielles est toujours inférieure à  $8\text{\AA}$ . La densité locale de dislocation  $\rho$  du caractère vis  $[100](001)$  montre un seul pic, étendu sur  $3,8\text{\AA}$ .

Nous calculons la contrainte de Peierls de ces dislocations en appliquant une déformation  $\epsilon_{ij}$  sur la cellule de simulation décrite dans le repère de la figure (4.3, page 111). Les contraintes de Peierls de ces systèmes de glissement sont données dans le tableau (4.5). Les contraintes de Peierls sont plus élevées pour les caractères vis (480MPa pour  $[100](010)$  et 1510MPa pour  $[100](001)$ ) que pour les caractères coin (310MPa pour  $[100](010)$  et 690MPa pour  $[100](001)$ ).

### Etude des dislocations de vecteur de Burgers $[010]$

L'étude des dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  est effectuée en introduisant la dislocation dans les plan (100) ou (001). Les propriétés du coeur et les contraintes de Peierls des dislocations sont données dans le tableau (4.6). Comme dans le cas de la dislocation de vecteur de Burgers  $[100]$ , nous avons vérifié que le cisaillement ne dévie pas de la direction  $[010]$ .

La dislocation vis présente une structure complexe. Si cette dislocation est introduite dans le plan (100), elle se dissocie en quatre dislocations partielles de vecteur de Burgers colinéaires. La dissociation se distribue en deux dislocations partielles dans le plan (100), séparée de  $8\text{\AA}$  (paramètre de maille  $c$ ) et deux dislocations partielles dans les plans (101). Cette dislocation est symétrique par rapport à son centre. La figure (4.9) présente la structure de cette dislocation. Nous avons tracé les circuits de Burgers (non représentés) sur ces quatre dislocations partielles et nous vérifions ainsi la réaction de dissociation suivante :

$$[010] \rightarrow \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] \quad (4.1)$$

Lorsque cette même dislocation vis  $[010]$  est introduite dans le plan (001), elle se dissocie également en quatre partielles mais la distribution est asymétrique. Cette dislocation se dissocie

	maillage	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_{xy}$ (MPa)	$\sigma_{xz}$ (MPa)	$\sigma_{yz}$ (MPa)
vis [010](100)	b	1,3 ( $\zeta_A$ ) 0,7 ( $\zeta_B$ ) 0,7 ( $\zeta_C$ ) 1,3 ( $\zeta_D$ )	8,3 ( $\Delta_{AB}$ ) 10,1 ( $\Delta_{BC}$ )( $\Delta_{CD}$ )			510±35
vis [010](001)	b	2,1 ( $\zeta_A$ ) 0,6 ( $\zeta_B$ ) 1,4 ( $\zeta_C$ ) 0,6 ( $\zeta_D$ )	14,6 ( $\Delta_{AB}$ ) 4,8 ( $\Delta_{BC}$ ) 5,0 ( $\Delta_{CD}$ )		-	
coin [010](100)	c	0,3 ( $\zeta_1$ ) 0,7 ( $\zeta_2$ )	36,7 ( $\Delta_1$ ) 8,3( $\Delta_2$ )	1060±25		
coin [010](001)	c	1,0 ( $\zeta_1$ ) 2,1 ( $\zeta_2$ )	28,1 ( $\Delta_1$ ) 4,2( $\Delta_2$ )	1150±15		

Tab 4.6 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations de vecteur de Burgers [010]. On utilise les maillages de la figure (4.3).  $\zeta_i$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité locale de dislocation.  $\Delta$  est la distance de séparation entre dislocations partielles (cf. figures (4.9), (4.10) et (4.14)).  $\sigma_{ij}$  est la contrainte critique  $ij$  appliquée d'après le maillage de la figure (4.3). Cette contrainte critique est assimilée à contrainte de Peierls.

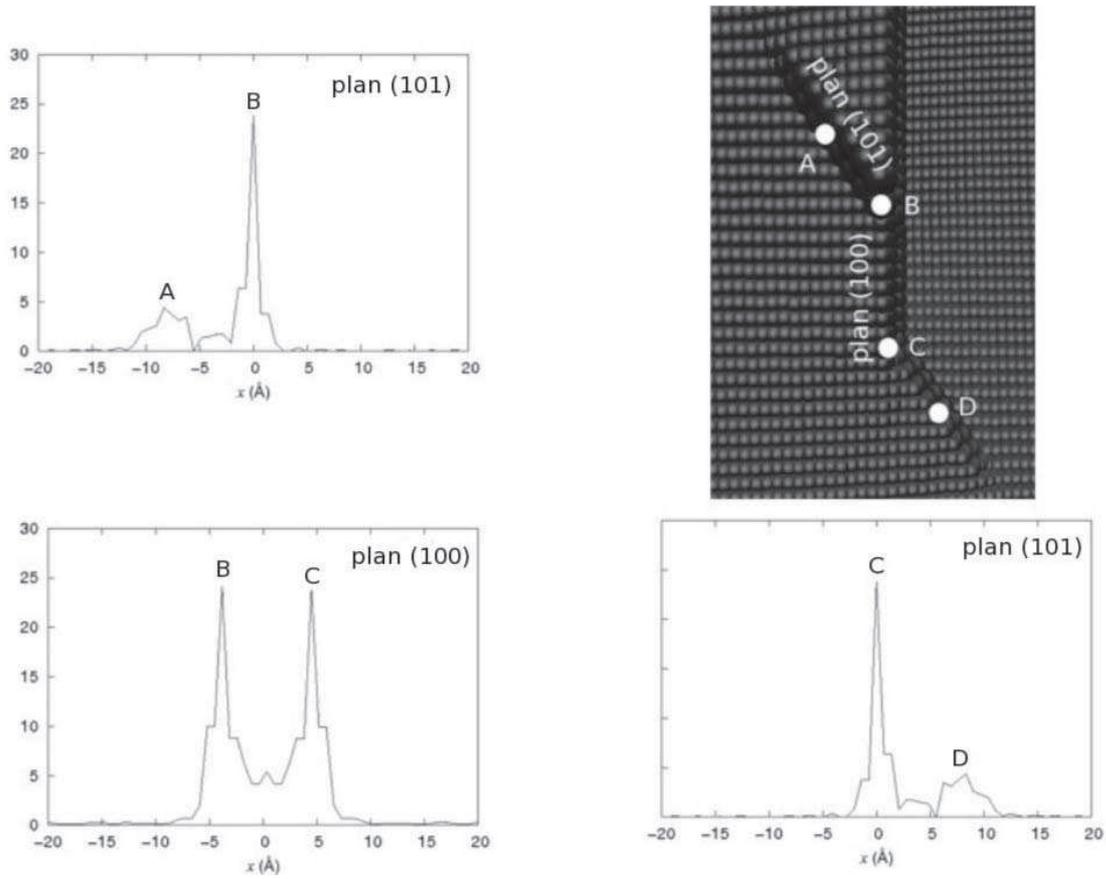


FIG 4.9 – Structure de la dislocation vis  $[010]$  introduite dans le plan  $(100)$ . On reproduit la structure de la dislocation sur le maillage en haut à droite et on donne les profils de densités de dislocations  $\rho$  dans les plans  $(100)$  et  $(101)$  dans une unité arbitraire.

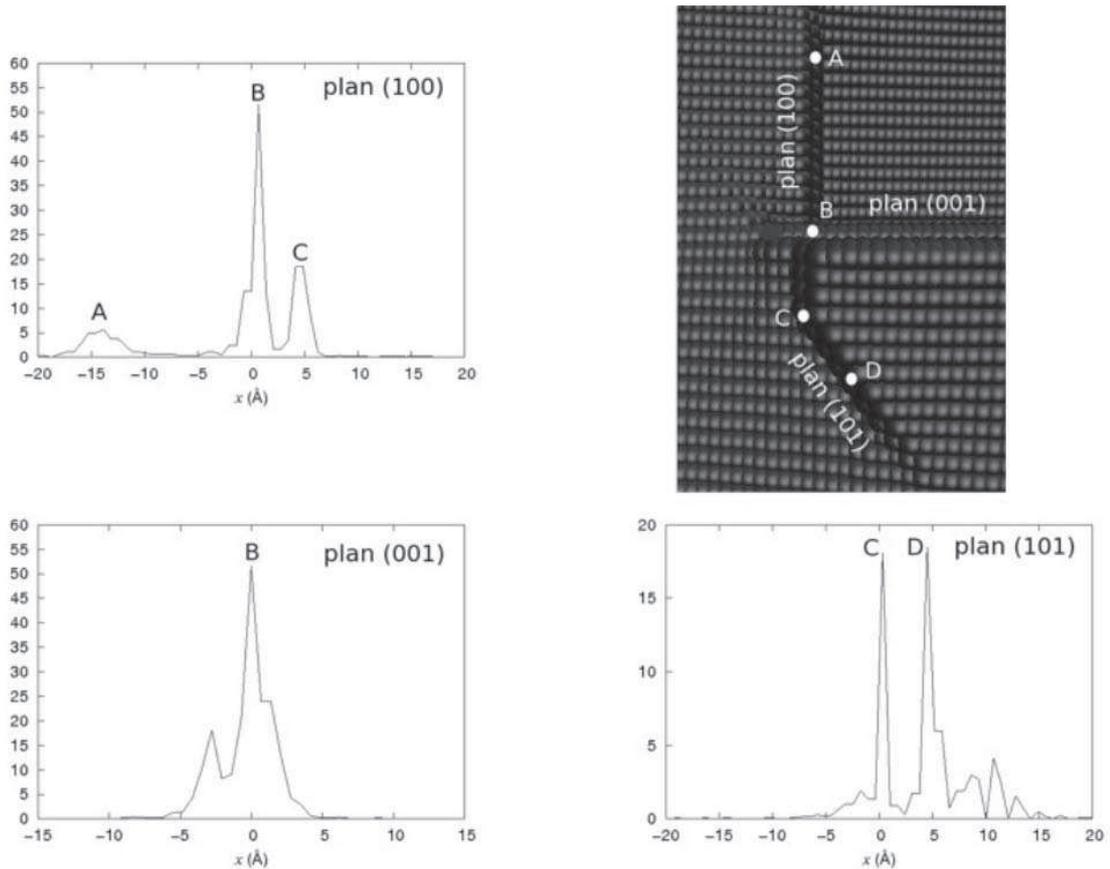


FIG 4.10 – Structure de la dislocation vis  $[010]$  introduite dans le plan (001). On reproduit la structure de la dislocation sur le maillage en haut à droite et on donne les profils de densités de dislocations  $\rho$  dans les plans (100), (001) et (101) dans une unité arbitraire.

en trois dislocations partielles dans le plan (100) et en une dislocation partielle dans un plan (101). La structure asymétrique de cette dislocation est présentée sur la figure (4.10). Le tracé des circuits de Burgers conduit à la même réaction de dissociation (4.1) que la dislocation vis  $[010]$  introduite dans le plan (100).

Ces deux structures montrent que le caractère vis de la dislocation  $[010]$  ne s'étale pas dans le plan (001). L'étalement est nul dans ce plan dans la configuration symétrique et faible dans la configuration asymétrique. De ce fait, nous déterminerons les contraintes de Peierls sur la configuration symétrique de la dislocation introduite dans le plan (100) et ne présentant pas d'étalement dans le plan (001).

Cette structure de dislocation est complexe et nous appliquerons différentes composantes du tenseur de contraintes défini dans le repère de la figure (4.11) pour déplacer cette dislocation non-planaire. Nous testons le déplacement de cette dislocation dans les plans (001), (100), (101)

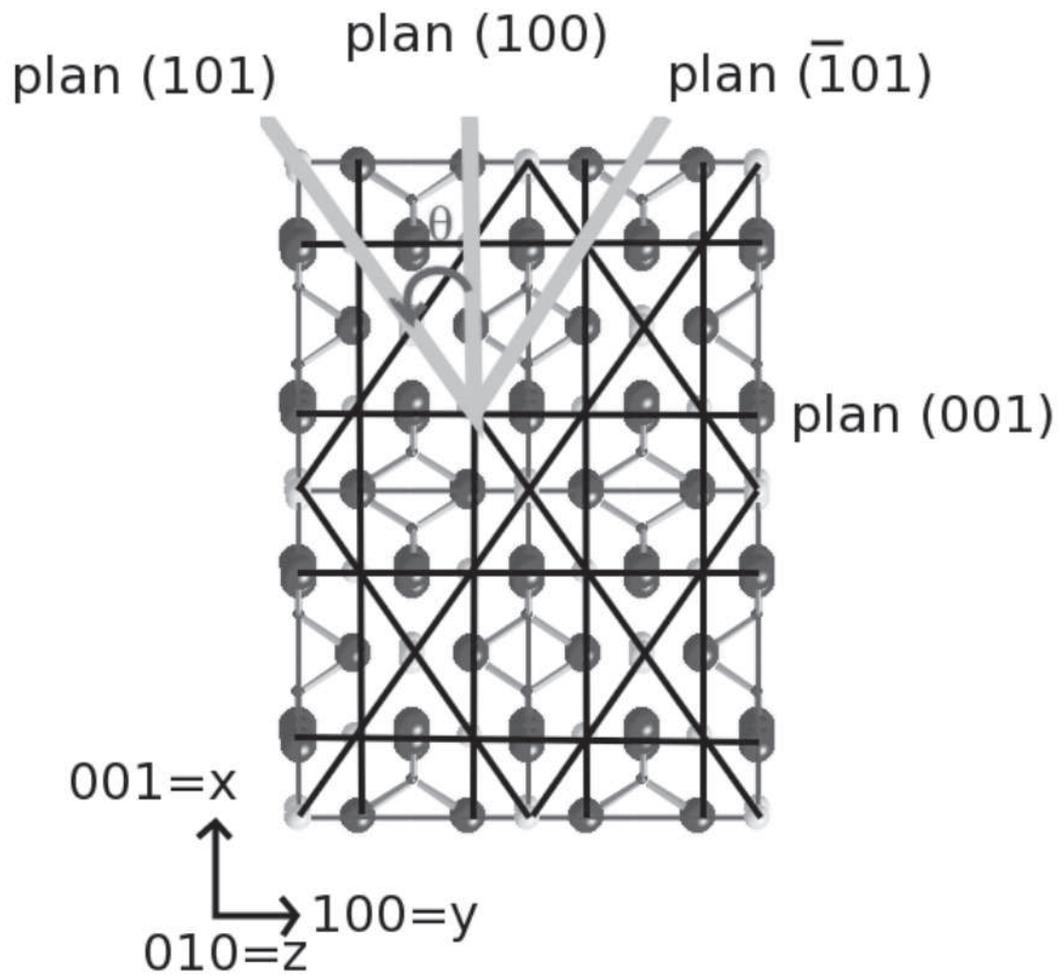


FIG 4.11 – Illustration présentant les plans (100), (001) et {101} ainsi que le repère  $(xyz)$  définissant les composantes du tenseur de contraintes appliquées sur la dislocation vis [010] de la wadsleyite. L'angle  $\theta$  entre les plans (100) et {101} est égal à  $\arctan(\frac{a}{c}) \sim 35^\circ$ .

en appliquant un cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers dans ces différents plans. Nous appliquons également une contrainte de cisaillement le long du vecteur de Burgers mais dans le plan  $(\bar{1}01)$ . La dislocation introduite à l'intersection des plans  $(100)$ ,  $(001)$  et  $(101)$  ne peut glisser dans le plan  $(\bar{1}01)$  (cf. figure (4.11)) mais l'application de la contrainte dans ce plan nous permettra d'obtenir des informations supplémentaires sur la mobilité de la dislocation vis  $[010]$ . Les résultats sont les suivants :

- L'application de la contrainte  $\sigma_{zx}$  ne permet pas le glissement de la dislocation dans le plan  $(001)$ . La cellule de simulation n'accomode pas la déformation.
- L'application d'une contrainte  $\sigma_{zy}$  fait glisser la dislocation dans le plan  $(100)$  en deux étapes. Tout d'abord, une contrainte de 300MPa permet la déviation des dislocations partielles des plans  $(101)$  vers le plan  $(100)$ . La dislocation s'étale alors en quatre partielles dans le plan  $(100)$ . Une contrainte de 510MPa fait déplacer cet ensemble. Une illustration de ce mécanisme est donnée sur la figure (4.12).
- Le cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers dans le plan  $(101)$  déplace la dislocation dans le plan  $(100)$  pour une contrainte projetée dans ce plan égale à 1,1GPa.
- Enfin, le cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers dans le plan  $(\bar{1}01)$  engendre une nouvelle structure de coeur, sessile et asymétrique pour une contrainte appliquée égale à 875MPa. Cette structure sessile est présentée figure (4.13).

Nous terminons l'étude des dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  par l'étude de leur caractères coin dans les plans  $(100)$  et  $(001)$ . Dans les deux cas, cette dislocation se dissocie en quatre dislocations partielles de vecteur de Burgers colinéaires. Les étalements  $f$  et les densités de vecteurs de Burgers  $\rho$ , ainsi que les définitions des distances entre partielles  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  sont données sur la figure (4.14, page 128) et résumées dans le tableau (4.6). Dans le plan  $(100)$ , les distances  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  valent respectivement 8,3 Å et 36,7 Å et la contrainte de Peierls vaut 1,06GPa. Dans le plan  $(001)$ , les distances  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$  valent 4,5Å et 28,1Å et la contrainte de Peierls est égale à 1,15GPa. Nous pouvons cependant noter une différence entre les réactions de dissociation de ces dislocations. Elles s'écrivent :

$$[010] \rightarrow \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] \quad (4.2)$$

dans le plan  $(100)$  et

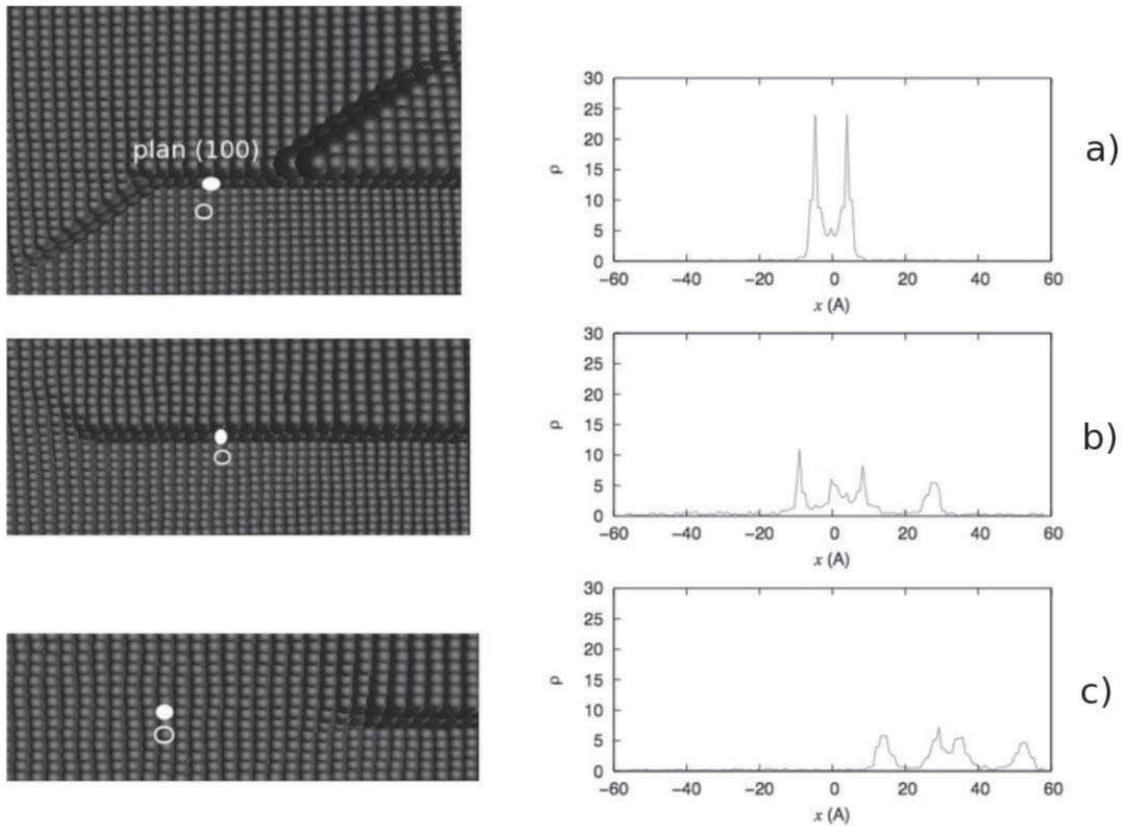


FIG 4.12 – Comportement de la dislocation vis  $[010]$  sous l'application d'une contrainte externe  $\sigma_{zy}$ . On représente à gauche la structure de la dislocation sur le maillage et à droite la densité locale de vecteur de Burgers dans le plan  $(100)$ . Avant l'application de la contrainte, le plan  $(100)$  possède deux dislocations partielles (a). L'action de  $\sigma_{zy}=300\text{MPa}$  permet la déviation des dislocations partielles des plans  $(101)$  vers le plan  $(100)$  : les quatre dislocations partielles se situent dans le plan  $(100)$  (b). Ces quatre dislocations partielles se déplacent sous l'action d'une contrainte  $\sigma_{zy}=510\text{MPa}$  (c).

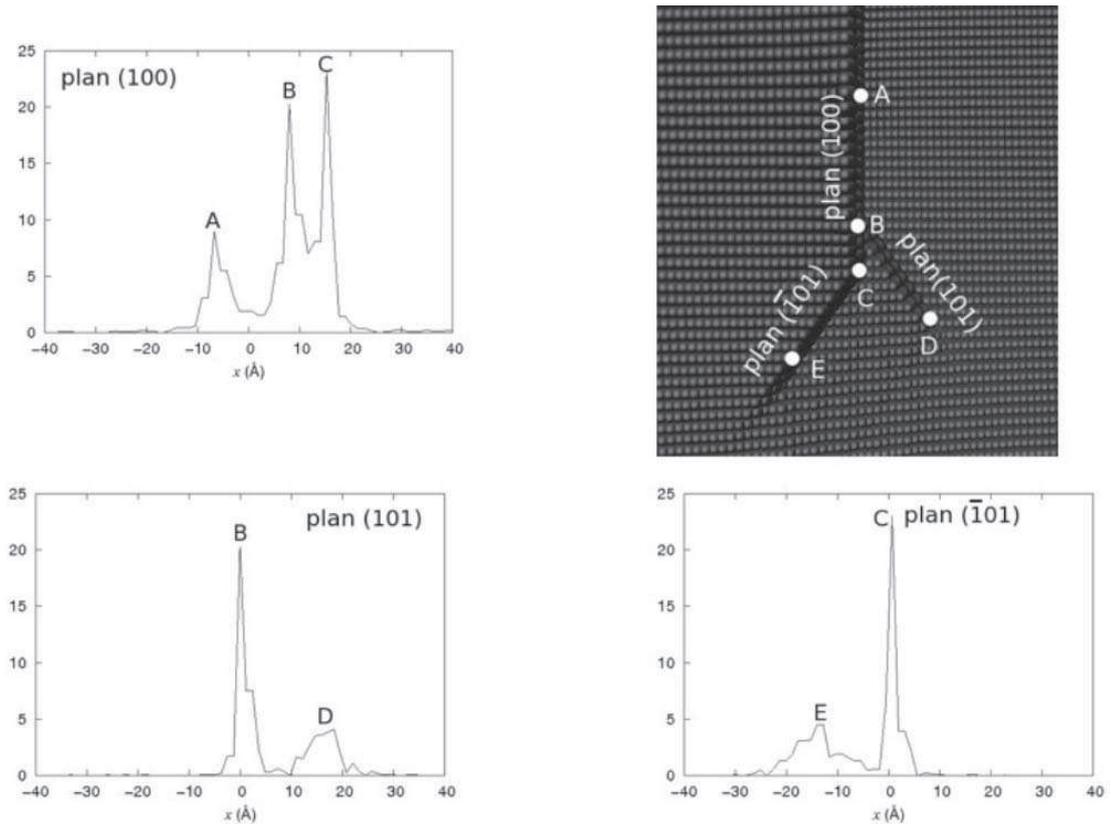


FIG 4.13 – Dislocation vis  $[010]$  sous l'action d'une contrainte de cisaillement le long du vecteur de Burgers dans le plan  $(\bar{1}01)$ . On reproduit la structure de la dislocation sur le maillage en haut à droite et on donne les profils de densités de dislocations  $\rho$  dans les plans  $(100)$ ,  $(101)$  et  $(\bar{1}01)$  dans une unité arbitraire. La dislocation adopte une configuration sessile asymétrique.

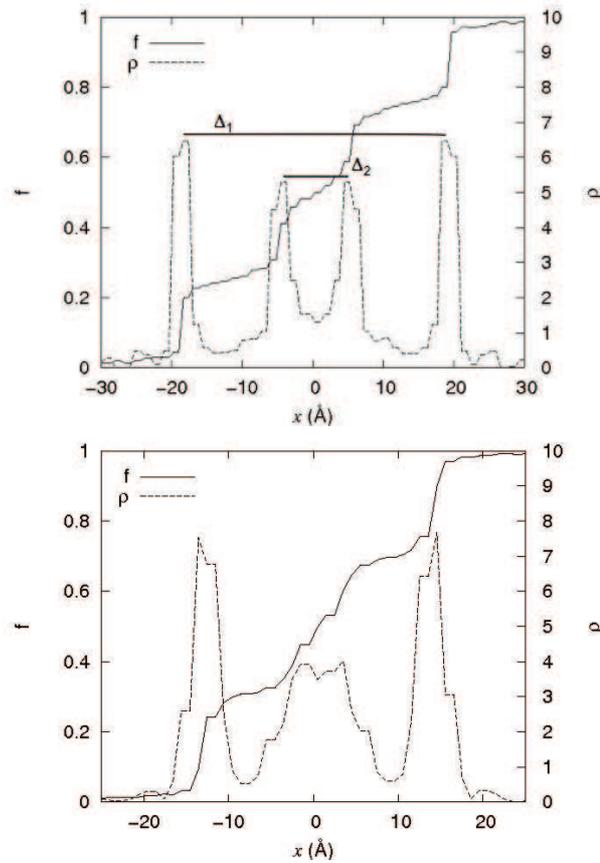


FIG 4.14 – Étalement et densité locale de vecteur de Burgers de la dislocation coin  $[010](100)$  (en haut) et  $[010](001)$  (en bas). Nous présentons également les définitions de  $\Delta_1$  et  $\Delta_2$ , les distances entre dislocations partielles.

$$[010] \rightarrow \frac{1}{3}[010] + \frac{1}{6}[010] + \frac{1}{6}[010] + \frac{1}{3}[010] \quad (4.3)$$

dans le plan  $(001)$ .

### Étude des dislocations de vecteur de Burgers $[001]$

Nous étudions la dislocation de vecteur de Burgers  $[001]$  dans le plan  $(010)$  uniquement, le cisaillement étant limité dans le plan  $(100)$  (cf. figure (4.6-a), page 115). Les résultats obtenus pour cette dislocation sont résumés dans le tableau (4.7). L'introduction de la dislocation  $[001](010)$  montre une déviation du cisaillement de la direction  $[001]$  : le cisaillement se répartit dans les directions  $[001]$  et  $[100]$ . La figure (4.15) présente les étalements  $f$  et les densités de vecteurs de Burgers  $\rho$  des caractères introduit pure vis et pure coin de la dislocation  $[001]$ . On ajoute à cette

	maillage	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_{xy}$ (MPa)	$\sigma_{xz}$ (MPa)	$\sigma_{yz}$ (MPa)
vis [001](010)	c	1,2	4,8		530±40	
coin [001](010)	a	1,0	8,1	880±20		

Tab 4.7 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations de vecteur de Burgers [001](010). On utilise les maillages de la figure (4.3).  $\zeta$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité locale de dislocation.  $\Delta$  est la distance de séparation entre dislocations partielles.  $\sigma_{ij}$  est la contrainte critique  $ij$  appliquée d'après le maillage de la figure (4.3). Cette contrainte critique est assimilée à contrainte de Peierls.

figure, la répartition du cisaillement pour ces mêmes caractères sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (010).

Les densités de dislocation  $\rho$  montrent deux pics séparés mais convolués. Nous aurons ici une dissociation de la dislocation en deux dislocations partielles. En utilisant la répartition du cisaillement dans les directions [001] et [100], les réactions de dissociation peuvent s'écrire :

$$[001] \rightarrow [x0\frac{1}{2}] + [\bar{x}0\frac{1}{2}] \quad (4.4)$$

avec  $x=0,22$  pour la dislocation introduite pure vis et  $x=0,24$  pour la dislocation introduite pure coin. Les distances de séparation entre dislocations partielles valent  $3,5\text{Å}$  et  $8,1\text{Å}$  pour les dislocations respectivement introduites pure vis et pure coin.

Nous calculons la contrainte de Peierls pour ces dislocations. On ne s'intéresse ici qu'aux composantes du tenseur de contraintes permettant de déplacer la dislocation [001] introduite pure vis et pure coin. Dans ce cas, les contraintes de Peierls de la dislocation introduite pure vis et introduite pure coin valent respectivement 530 et 880MPa. Nous pouvons également observer l'évolution de la composante coin de la dislocation introduite pure vis et de la composante vis de la dislocation introduite pure coin au cours du mouvement. La figure (4.16) montre l'évolution des étagement  $f_{vis}$  et  $f_{coin}$  lors du déplacement de la dislocation introduite pure vis pour des contraintes appliquées supérieures à la contrainte de Peierls. On note que la composante coin de cette dislocation évolue très peu en intensité : il n'y a pas de recombinaison du coeur de la dislocation lors de son déplacement. Nous observons le même comportement sur la dislocation introduite pure coin.

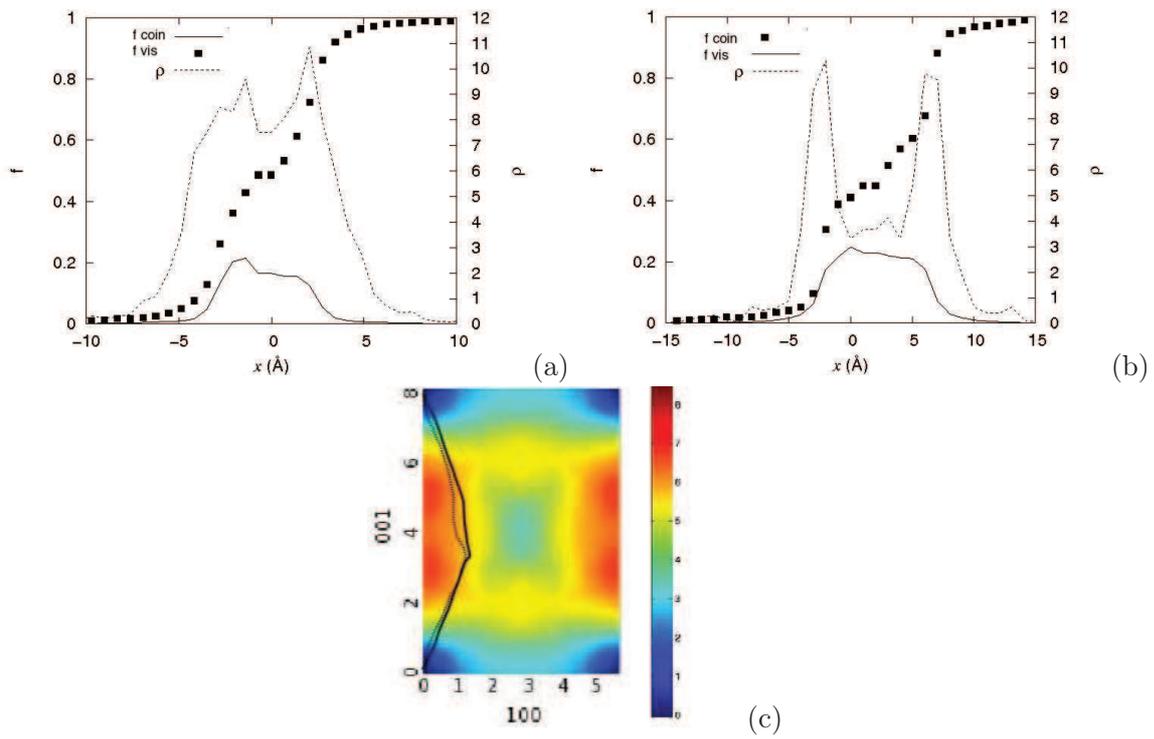


FIG 4.15 – Etallement  $f$  et densité locale de vecteur de Burgers  $\rho$  de la dislocation parfaite vis  $[001](010)$  (a) et coin (b). Sur la figure (c), on représente la répartition du cisailment sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (010) lorsque la dislocation est introduite pure vis (trait plein) et pure coin (trait pointillé). L'énergie sur la surface de fautes est donnée en  $J.m^{-2}$

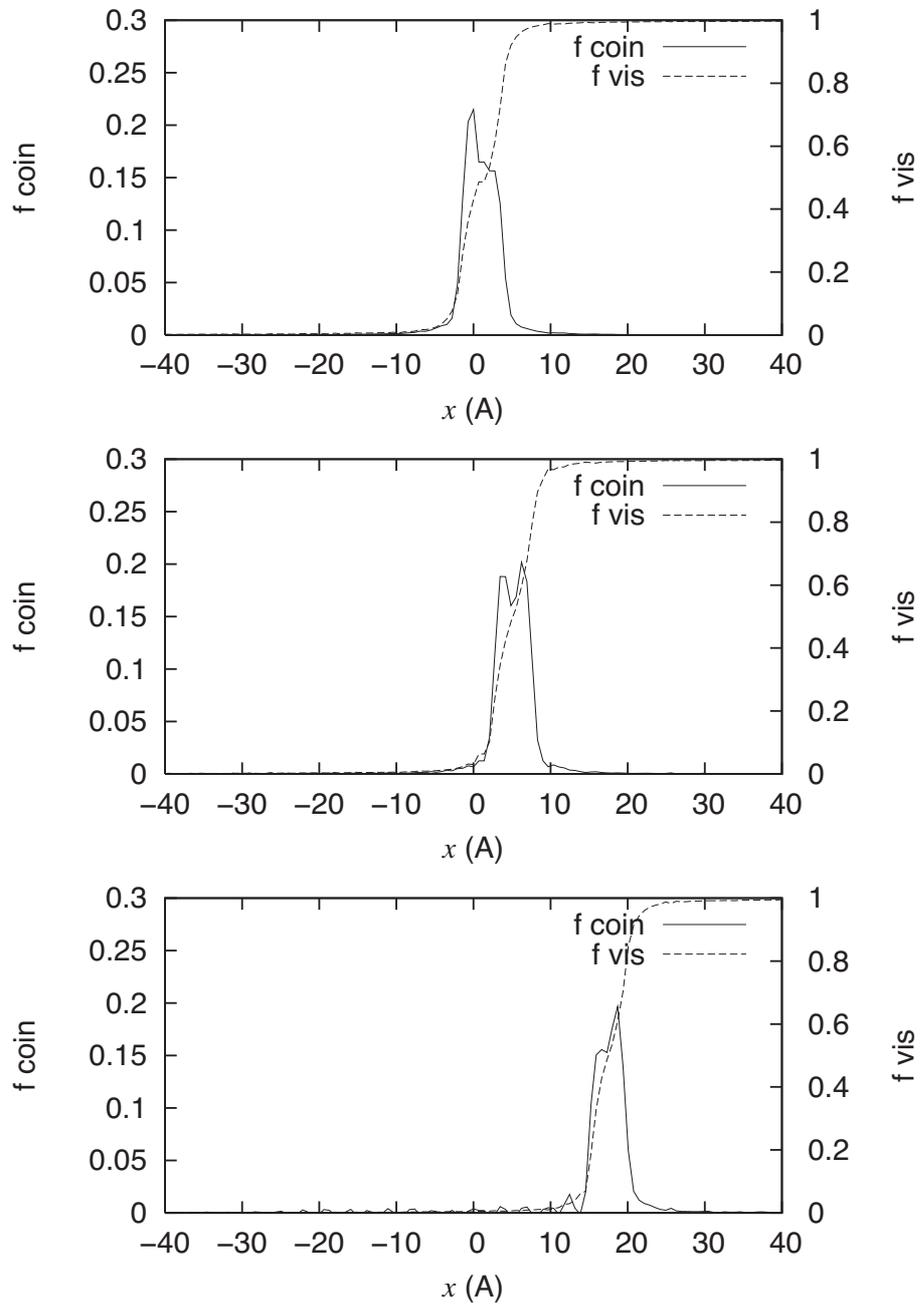


FIG 4.16 – Evolution des étalements  $f_{vis}$  et  $f_{coin}$  de la dislocation  $[001](010)$  introduite pure vis. (a) Sans contraintes appliquées. (b) et (c) pour des contraintes appliquées supérieures à la contrainte de Peierls.

	maillage	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_{xy}$ (MPa)	$\sigma_{xz}$ (MPa)	$\sigma_{yz}$ (MPa)
vis $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$	d	6,5 ( $\zeta_I$ ) 9,1 ( $\zeta_{II}$ )	30,7			450±25
coin $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$	d	21,4 ( $\zeta_I$ ) 11,2 ( $\zeta_{II}$ )	52,1	230±45		

TABLE 4.8 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations de vecteur de Burgers  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ . On utilise les maillages de la figure (4.3).  $\zeta_i$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité locale de dislocation.  $\Delta$  est la distance de séparation entre dislocations partielles (cf. figure (4.17)).  $\sigma_{ij}$  est la contrainte critique  $ij$  appliquée au maillage de la figure (4.3). Cette contrainte critique est assimilée à contrainte de Peierls.

### Etude des dislocations de vecteur de Burgers $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$

Nous terminons notre étude dans la wadsleyite par les dislocations  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ . Les étalements et densités de vecteur de Burgers des caractères vis et coin sont présentés sur la figure (4.17). Les résultats pour cette dislocation sont résumés dans le tableau (4.8). Les profils de densités de dislocations  $\rho$  montrent deux pics distincts et déconvolués. Nous avons ici une dissociation de la dislocation en deux dislocations partielles colinéaires :

$$\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \rightarrow \frac{2}{10} \langle 111 \rangle + \frac{3}{10} \langle 111 \rangle \quad (4.5)$$

On peut alors déterminer les distances de dissociation entre les dislocations partielles : 30,7Å pour le caractère vis et 52,1Å pour le caractère coin. Les étalements de coeur sont assez larges : 6,5 et 9,1Å pour le caractère vis et 21,4 et 11,2Å pour le caractère coin. Les contraintes de Peierls correspondantes valent 450MPa et 230MPa respectivement pour les caractères vis et coin.

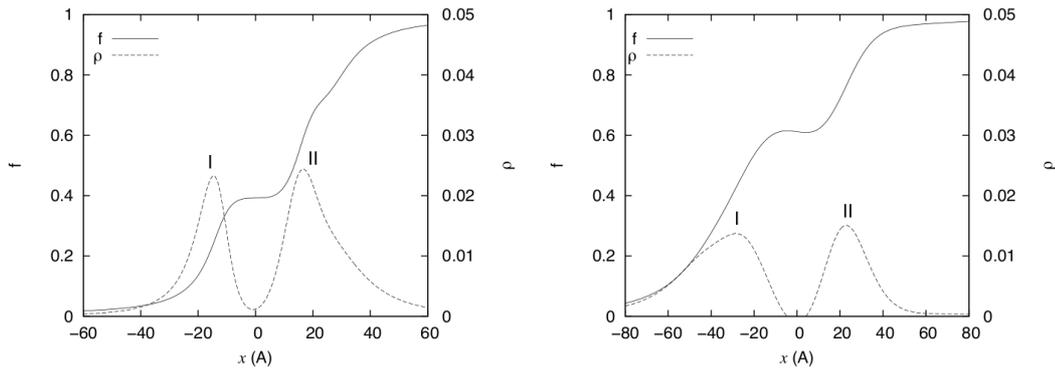


FIG 4.17 – Etalement  $f$  et densité locale de vecteur de Burgers  $\rho$  du caractère vis (à gauche) et coin (à droite) de la dislocation  $1/2\langle 111 \rangle \{101\}$ .

## 4.4 Discussion

### 4.4.1 Comparaison entre structures de coeurs des dislocations calculées et observées expérimentalement.

Les structures de coeurs des dislocations que nous avons calculées dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin peuvent être comparées aux observations réalisées en microscopie électronique en transmission. Les expériences de déformation conduites par Sharp *et al.* (1994), Dupas *et al.* (1994), Dupas-Bruzek *et al.* (1998) et Thurel *et al.* (Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a,b) ont été complétées par la caractérisation des dislocations responsables de la plasticité avec cette technique de caractérisation.

Nous avons déterminé les structures de coeurs des dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$  dans les plans  $(010)$  et  $(001)$ . Le cisaillement induit par la dislocation reste toujours parallèle à la direction du vecteur de Burgers. Ici, la structure de coeur des dislocations  $[100]$  sera gouvernée par la forme des  $\gamma$ -lignes des systèmes de glissement  $[100](0kl)$  qui montrent une faute d'empilement stable pour des cisaillements de 50% dans la direction  $[100]$  (figure(4.7-a), page 116). Nos résultats montrent une dissociation de ces dislocations en deux dislocations partielles pour les dislocations vis  $[100](010)$ , coin  $[100](010)$  et coin  $[100](001)$ . D'après le tableau (4.5, page 118), la distance entre les dislocations partielles est toujours inférieure à  $8\text{\AA}$  aussi bien pour les caractères vis et coin. On peut ici parler d'un effet de coeur de dislocation plutôt que d'une véritable dissociation de ces dislocations dans les plans  $(010)$  et  $(001)$ . Ceci est clairement visible dans le cas du caractère vis dans le plan  $(001)$  où le profil de densité locale de dislocations montre un pic unique, ce qui est en désaccord avec la forme de la courbe  $\gamma = f(f)$  du système de glissement  $[100](001)$ .

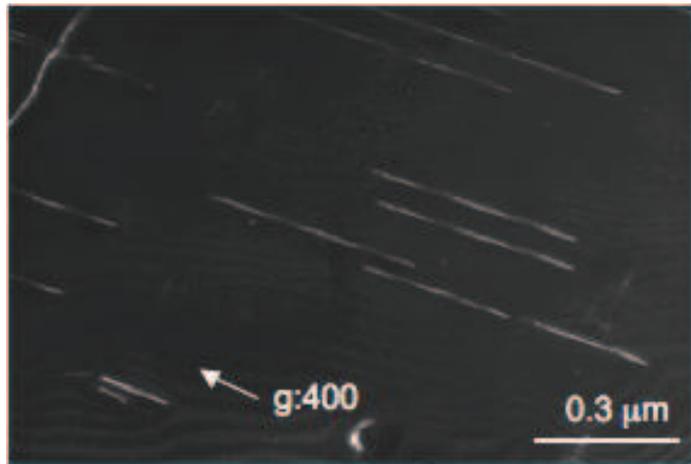


FIG 4.18 – Image réalisée en microscopie électronique en transmission de la dislocation  $[100]$ . Cette dislocation apparaît non-dissociée (image tirée de Thurel (2001)).

Expérimentalement, ces dislocations n'apparaissent pas dissociées dans les plans  $(010)$  et  $(001)$  (Sharp *et al.*, 1994; Dupas *et al.*, 1994; Dupas-Bruzek *et al.*, 1998; Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a). Une image de la dislocation  $[100]$  prise au microscope électronique en transmission est donnée sur la figure (4.18). Par contre, une dissociation de ces dislocations apparaît dans les plans  $\{021\}$  (Thurel & Cordier, 2003; Dupas *et al.*, 1994). Néanmoins, la caractérisation de ces dislocations dans les plans  $\{021\}$  reste marginale et n'a pas été traitée dans ce travail. La distance de séparation entre dislocations partielles que nous avons calculé dans les plans  $(010)$  et  $(001)$  est très petite, inférieure à la résolution des images. Nous avons mesuré la largeur du contraste obtenu sur les dislocations  $[100]$  de la figure (4.18) avec le logiciel *Digital Micrograph*. Cette largeur est égale à 10nm. Ceci signifie que la distance entre dislocations partielles doit être supérieure à 10nm pour être observée.

Le cas de la dislocation de vecteur de Burgers  $[010]$  est plus intéressant. Le cisaillement de la dislocation  $[010]$  ne dévie pas de cette direction : les formes des  $\gamma$  – *lignes* des systèmes de glissement  $[010](h0l)$  contrôlent la structure de coeur de ces dislocations. Les résultats obtenus dans cette étude montrent une dissociation de cette dislocation en quatre dislocations partielles colinéaires, aussi bien lorsque la dislocation est introduite dans le plan  $(100)$  que dans le plan  $(001)$ . Pour les caractères coin, la réaction de dissociation dépend du plan de glissement. Dans le plan  $(100)$ , la réaction de dissociation s'écrit :

$$[010] \rightarrow \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] \quad (4.6)$$

Dans le plan (001), cette réaction est :

$$[010] \rightarrow \frac{1}{3}[010] + \frac{1}{6}[010] + \frac{1}{6}[010] + \frac{1}{3}[010] \quad (4.7)$$

La différence entre les réactions de dissociation dans les plans (010) et (001) est liée aux formes des courbes  $\gamma = f(f)$  de la figure (4.7-b, page 116) du glissement [010] dans ces plans. On voit sur cette figure la position des fautes d'empilement stables dans ces plans. Celles-ci sont situées en  $b/4$ ,  $b/2$  et  $3b/4$  dans les plans (100) et {101} et en  $b/3$ ,  $b/2$  et  $2b/3$  dans le plan (001). La position de ces fautes contrôle la dissociation du caractère coin de la dislocation : dans le plan (100), les fautes stables sont équidistantes d'un cisaillement  $b/4$  et conduisent à la réaction de dissociation (4.6) ; dans le plan (001), les fautes stables apparaissent pour des cisaillements consécutifs de  $b/3$ ,  $b/6$ ,  $b/6$  et  $b/3$  et dirigent ainsi la réaction (4.7).

La forme du caractère vis de cette dislocation est complexe : elle se dissocie en deux dislocations partielles dans le plan (100) et deux dislocations partielles dans les plans (101) avec la réaction de dissociation suivante :

$$[010] \rightarrow \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] + \frac{1}{4}[010] \quad (4.8)$$

Cette dislocation vis ne s'étale pas dans le plan (001). Ceci est confirmé par l'introduction de cette dislocation [010] dans ce plan : l'étalement reste très faible dans le plan (001), la dislocation préférant s'étaler dans les plans (100) et (101). Les valeurs élevées d'énergie de faute (figure (4.7-b, page 116)) du cisaillement [010](001) par rapport au cisaillement [010](100) et [010](101) permettent d'expliquer ce résultat : la dislocation minimisera son énergie de désaccord en s'étalant dans les plans (100) et (101). La réaction de dissociation (4.8) est également expliquée par les formes des énergies de fautes d'empilement généralisées en fonction du cisaillement. D'après la figure (4.7-b, page 116), la dislocation [010] peut se décomposer en quatre dislocations partielles dans les plans (100), (001) et (101). Lors de l'introduction de la dislocation dans le plan (100), celle-ci commencera par s'étaler le long de [001] sur une distance de  $8\text{\AA}$  et se dissocier en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers  $1/2[010]$ . On aura alors atteint 50% de cisaillement dans la direction [010] et nous serons à l'intersection de plan (100), (001) et (101). Or, d'après les énergies de fautes d'empilement de la figure (4.7-b, page 116), cette énergie de faute est plus petite dans le plan {101} que dans le plan (100). On aura alors déviation de la dislocation dans

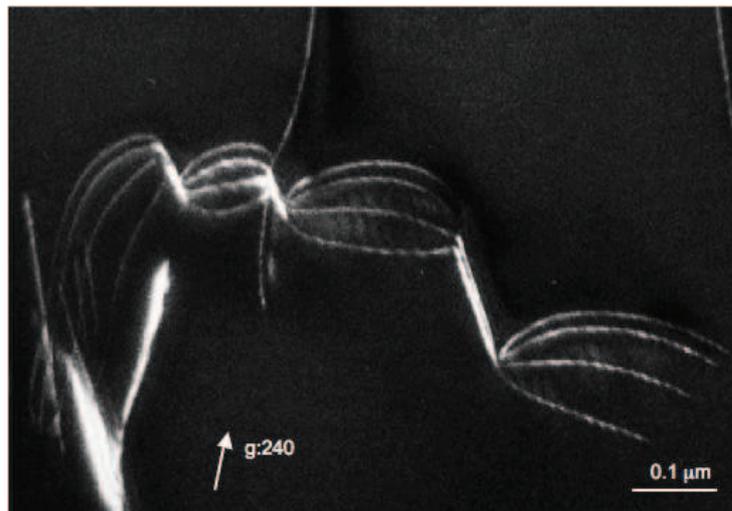


FIG 4.19 – Image réalisée en microscopie électronique en transmission de la dislocation  $[010]$  dissociée en quatre dislocations partielles (image tirée de Thurel (2001)).

les plans  $\{101\}$ . Cette dislocation ne peut être que symétrique par rapport à son centre. Si une dislocation partielle d'un plan  $(101)$  venait à se mettre dans un plan  $(\bar{1}01)$ , la répulsion entre dislocations partielles rendrait le système instable. La dissociation de la dislocation de vecteur de Burgers  $[010]$  en quatre dislocations partielles a été observée par Thurel *et al.* (Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a). La figure (4.19) montre une image réalisée microscopie électronique de cette dislocation dissociée en quatre dislocations partielles. La réaction de dissociation (4.6) a été proposée quel que soit le caractère et le plan de glissement de la dislocation. Les résultats numériques confirment globalement cette proposition, hormis pour le caractère coin de la dislocation  $[010](001)$ . Il est à noter que les observations de dislocations  $[010]$  largement dissociées réalisées par Thurel *et al.* n'ont été que rarement assorties de caractérisations fines des plans de dissociation.

Expérimentalement, la dislocation de vecteur de Burgers  $[001]$  n'a été que très rarement caractérisée. On trouve des caractérisations de ces dislocations dans des grains présentant une quantité importante de jonctions et de sous-joints (Thurel, 2001). Paradoxalement, l'énergie élastique des dislocations  $[001]$  est inférieure à l'énergie élastique des dislocations  $[010]$  et serait donc plus favorable. Cependant, les dislocations  $[010]$  se dissocient en quatre dislocations partielles et l'énergie de ce système dissocié pourrait être plus favorable d'un point de vue élastique que la dislocation  $[001]$  (Thurel *et al.*, 2003b). Les simulations des structures de coeurs des dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  ont été effectuées uniquement dans le plan  $(010)$  : le plan  $(100)$  étant

limité en cisaillement dans cette direction (cf. figure (4.6-a), page 115). La surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (010) présente une faute d'empilement stable en son centre (cf. figure (4.6-b), page 115). Cette faute a été observée en microscopie électronique, aussi bien dans les météorites (Price, 1983; Madon & Poirier, 1983) que dans les échantillons déformés (Sharp *et al.*, 1994; Dupas *et al.*, 1994; Dupas-Bruzek *et al.*, 1998; Thurel & Cordier, 2003; Thurel *et al.*, 2003a). On peut alors s'attendre à une dissociation de la dislocation en deux dislocations partielles de type Schockley :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{2}[101] + \frac{1}{2}[\bar{1}01] \quad (4.9)$$

qui respecte le critère de Frank.

Les résultats issus du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin montrent une dissociation de la dislocation [001] en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers non-colinéaires dans le plan (010). La réaction de dissociation pour la dislocation [001] introduite pure vis et pure coin est proche de :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{4}[102] + \frac{1}{4}[\bar{1}02] \quad (4.10)$$

Cette différence entre la réaction calculée et la réaction (4.9) est liée à la position et à l'énergie de la faute d'empilement stable au centre du plan (010) qui contrôle la dissociation de la dislocation en deux partielles non-colinéaires (Schoeck, 1999a, 1997).

Enfin, nos simulations montrent une dissociation de la dislocation de vecteur de Burgers  $1/2\langle 111 \rangle$  dans le plan  $\{101\}$  en deux partielles colinéaires suivant la réaction :

$$\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \rightarrow \frac{2}{10} \langle 111 \rangle + \frac{3}{10} \langle 111 \rangle \quad (4.11)$$

Cette réaction de dissociation est également due à la forme particulière de la courbe d'énergie de fautes d'empilement généralisées de ce système de glissement car le cisaillement ne dévie pas de la direction [111]. Ce courbe est présentée sur la figure (4.7-c, page 116). Elle montre la présence d'une faute d'empilement à 40% de cisaillement qui contrôle ainsi la réaction de dissociation. Les structures de coeur calculées montrent que la distance de séparation entre partielles est grande, de l'ordre de 4 à 7 module de  $b$ . La dissociation de la dislocation  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$  est

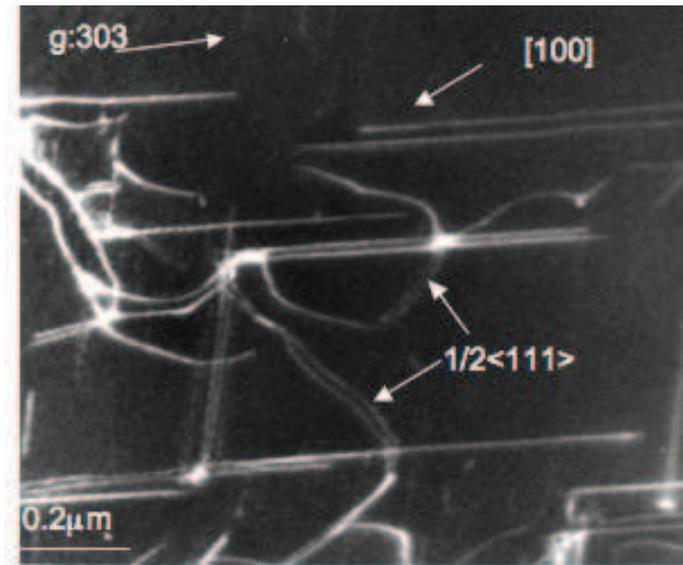


FIG 4.20 – Image réalisée en microscopie électronique en transmission de la dislocation  $1/2[111]$  dissociée en deux dislocations partielles (image tirée de Thurel (2001)).

observée expérimentalement. Un cliché de microscopie électronique en transmission de ce type de dislocation est présentée sur la figure (4.20). Par contre, cette dissociation asymétrique de la dislocation n'a jamais été proposée. La similarité des contrastes observés pour les deux dislocations partielles avait conduit Thurel & Cordier (2003) et Thurel *et al.* (2003a) à proposer une dissociation colinéaire simple du type :

$$\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \rightarrow \frac{1}{4} \langle 111 \rangle + \frac{1}{4} \langle 111 \rangle \quad (4.12)$$

#### 4.4.2 Contraintes de Peierls et systèmes de glissement actifs

Le calcul des contraintes de Peierls est utilisé pour déterminer le ou les systèmes de glissement les plus facilement activables. On assimile alors ces contraintes aux contraintes de cisaillement critiques projetées. Le tableau (4.9) reprend les contraintes de Peierls que nous avons calculé avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.

D'après ce tableau, nous observons que les dislocations  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$  présentent les contraintes de Peierls les plus faibles valant 450MPa et 230MPa respectivement pour le caractère vis et le caractère coin. Cette faible friction de réseau calculée pour ces dislocations  $1/2\langle 111 \rangle$  provient de leur structure dissociée en deux dislocations partielles. Ces dislocations partielles sont très

syst. gl.	$\sigma_p$ vis	$\sigma_p$ coin
[100](010)	480±25	310±15
[100](001)	1510±70	690±60
[010](100)	510±35	1060 ±25
[010](001)	-	1150 ±15
[001](010)	530 ±40	880 ±20
1/2<111>{101}	450 ±25	230 ±45

TAB 4.9 – Contraintes de Peierls (en MPa) calculées dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.

v. Burgers	% caractérisé
1/2<111>	40%
[100]	34%
[010]	16%
<101>	7%
[001]	3%

TAB 4.10 – Pourcentage de dislocations de vecteur de Burgers [uvw] caractérisées dans les expériences de déformation de Thurel (2001).

étendues dans le plan de glissement. De plus, elles glissent dans le plan (101) qui présente une réponse facile face au cisaillement plastique (cf. figure (4.6), page 115). Expérimentalement, ces dislocations 1/2<111>{101} ont été fréquemment caractérisées dans les observations de Thurel *et al.*. Le tableau (4.10) présente le pourcentage de dislocations de vecteur de Burgers [uvw] caractérisées dans les expériences de Thurel (2001). Sur 191 dislocations caractérisées en microscopie électronique en transmission, 40% étaient des dislocations de vecteur de Burgers 1/2<111>. Cette participation importante des dislocations 1/2<111>{101} sur la déformation plastique de la wadsleyite peut être expliquée par la faible friction de réseau que nous avons calculé pour ces dislocations.

En nous appuyant sur les résultats du tableau (4.9), nous voyons que le caractère vis contrôle la mobilité des dislocations de vecteur de Burgers [100] avec une différence importante de valeur de contrainte de Peierls entre la dislocation vis introduite dans les plans (010) et (001). Cette différence peut être expliquée par la distance entre deux vallées de Peierls  $a'$  qui influence la

valeur de la contrainte (cf. chapitre 1) : une distance importante entre deux vallées de Peierls entraîne une contrainte de Peierls élevée. Dans le cas de la dislocation vis  $[100]$  introduite dans le plan  $(010)$ , la distance entre deux vallées de Peierls vaut le paramètre de maille  $c$  ( $8\text{\AA}$ ) alors qu'elle vaut le paramètre de maille  $b$  ( $11,2\text{\AA}$ ) pour la dislocation vis  $[100]$  introduite dans le plan  $(001)$ . Ceci entraîne une contrainte de Peierls plus élevée pour la dislocation vis  $[100](001)$  que pour la dislocation vis  $[100](010)$ . Par contre, les caractères coin possédant la même périodicité de vallée de Peierls (paramètre de maille  $a$ ) présentent des valeurs de contraintes dans le même ordre de grandeur. Les observations au microscope électronique en transmission de Sharp *et al.* (1994), Dupas *et al.* (1994) et Thurel & Cordier (2003) montrent de long segments vis rigides mettent en évidence une friction de réseau plus marquée sur ces caractères. Nos calculs sont ici en accord avec l'expérience sur la mobilité des segments vis par rapport aux segments coin des dislocations de vecteurs de Burgers  $[100]$ . Les caractérisations des dislocations de Thurel (2001) en microscopie électronique à transmission mettent en évidence la participation du glissement  $[100]$  dans les mécanismes de plasticité de la wadsleyite. 34% des dislocations caractérisées étaient des dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$  (tableau (4.10)). De plus, la grande majorité des micrographies montraient un plan de glissement  $(010)$  pour ces dislocations. Les simulations que nous avons effectuées montrent de faibles contraintes de Peierls pour les dislocations  $[100](010)$  et mettent ainsi en évidence le rôle important joué par ce système de glissement sur la plasticité de la wadsleyite.

Dans le cas des dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$ , le tableau (4.9) montre que le caractère coin est le plus soumis à la friction de réseau dans les plans  $(100)$  et  $(001)$ . Les valeurs élevées de contraintes de Peierls pour les caractères coin de ces dislocations sont, comme pour les dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$ , liées à la périodicité des vallées de Peierls. Cette périodicité est égale au paramètre de maille  $b=11,2\text{\AA}$ , le plus grand paramètre de maille de la wadsleyite, et conduit à des contraintes de Peierls élevées pour ces dislocations coin. Dans le cas de la dislocation vis  $[010]$  étalée dans les plans  $(100)$  et  $(101)$ , nous n'avons déterminé la contrainte de Peierls que dans le plan  $(100)$ . Nous n'avons pas calculé cette contrainte dans le plan  $(001)$  car la cellule de simulation n'accomode pas la déformation. Par contre, nous avons testé l'application d'une contrainte de cisaillement dans la direction  $[010]$  dans les plans  $\{101\}$  qui donne des résultats différents entre le plan  $(101)$  et  $(\bar{1}01)$ . Dans le plan  $(\bar{1}01)$ , la dislocation adopte une structure sessile sous l'action de la contrainte appliquée alors que cette même dislocation glisse dans le plan  $(100)$  si la contrainte est appliqué dans le plan  $(101)$ . On met en évidence ici une sensibi-

lité importante de la dislocation vis  $[010]$  non-planaire à l'état de contraintes appliquées. Cette sensibilité est observée sur les dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$  non-planaires dans les métaux cubiques centrés (Vitek, 1976; Duesbery, 1984; Duesbery & Vitek, 1998). L'investigation de la réponse de la dislocation vis  $[010]$  non-planaire à d'autres états de contraintes est nécessaire pour une compréhension totale de la mobilité de cette dislocation. Expérimentalement, les dislocations de vecteur de Burgers  $[010]$  ont été peu caractérisées en comparaison des dislocations  $[100]$  et  $1/2\langle 111 \rangle$ . Les résultats de Thurel (2001) (cf. tableau (4.10)) montrent que 16% des dislocations caractérisées dans son étude étaient des dislocations  $[010]$ . Cependant, ces dislocations avaient été interprétées comme des vestiges de la compression à froid sous fortes contraintes inhérente aux expériences de relaxation en presse multi-enclumes. La persistance de ces dislocations après la phase haute température avait été attribuée à la présence de caractères non-glissiles. Le caractère sessile de certaines dislocations ainsi que la forte friction de réseau mise en évidence à travers le calcul de la contrainte de Peierls conforte cette interprétation.

Comme nous l'avons montré, la dislocation de vecteur de Burgers  $[001]$  se dissocie en deux dislocations de vecteur de Burgers non-colinéaires. L'application d'une contrainte sur cette dislocation dissociée ne permet pas la recombinaison du coeur de la dislocation et nous avons en fait calculé la contrainte de Peierls du système dissocié en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers non-colinéaires. Ce système dissocié présente une forte friction de réseau comparée aux systèmes  $[100](010)$  et  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$  et explique la faible activité de ce système de glissement dans les expériences de déformation.

## 4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons appliqué un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin pour étudier la structure et la mobilité des dislocations dans la wadsleyite, le minéral majoritaire dans la partie supérieure de la zone de transition. Nous montrons que la plupart des observations expérimentales sont reproduites par le modèle. De plus, l'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin fournit des informations détaillées sur la structure de coeur et le comportement des dislocations dans la wadsleyite sous l'action d'une contrainte appliquée. Les principaux résultats mis en évidence dans cette étude sont les suivants :

- Le système de glissement présentant la friction de réseau la plus faible est le système  $1/2\langle 111 \rangle\{101\}$ . Les dislocations associées à ce système sont dissociées en deux dislocations

partielles de vecteur de Burgers colinéaires  $2/10\langle 111 \rangle$  et  $3/10\langle 111 \rangle$ .

- Le second système présentant une faible friction de réseau est le système  $[100](010)$ . Les dislocations de vecteurs de Burgers  $[100]$  se dissocient en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers colinéaires  $1/2[100]$ . Le glissement des dislocations  $[100]$  est difficile dans le plan  $(001)$ .
- Le glissement des dislocations  $[001]$  n'est possible que dans le plan  $(010)$  où elles se dissocient en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers non-colinéaires  $[x0\frac{1}{2}]$  avec  $x \sim \pm 0,25$ . Ce système de glissement  $[001](010)$  présente une friction de réseau importante.
- Les dislocations de vecteurs de Burgers  $[010]$  se dissocient en quatre dislocations partielles avec des vecteurs de Burgers colinéaires. Les dislocations coin restent planaires tandis que la dislocation vis présente une structure non-planaire étalée dans les plans  $(100)$  et  $(101)$ . La réponse de cette dislocation vis non-planaire est sensible à l'état de contraintes appliquées.

## Chapitre 5

# Structures de coeurs des dislocations dans le diopside à 0 et 10GPa



Les pyroxènes sont les seconds constituants du manteau supérieur dans le modèle pyrolitique de Green & Ringwood (1963). Cette famille de minéraux se décompose en deux sous-classes, les orthopyroxènes (structure orthorhombique) et les clinopyroxènes (structure monoclinique). Ces derniers présentent une forte anisotropie élastique par rapport aux autres minéraux du manteau supérieur, l'olivine, les orthopyroxènes et les grenats (Mainprice *et al.*, 2000). Cette anisotropie élastique combinée aux développements des orientations préférentielles des clinopyroxènes déformés pourrait contribuer de manière significative à l'anisotropie sismique observée dans le manteau supérieur.

Nous avons choisi d'étudier le diopside  $CaMgSi_2O_6$ , un minéral représentatif de la famille des clinopyroxènes. La déformation plastique de ce minéral a été étudiée expérimentalement, aussi bien à partir de roches naturelles (Raleigh & Talbot, 1967), que de monocristaux (Lallemant, 1978; Kollé & Blacic, 1982; Ingrin *et al.*, 1992; Raterron & Jaoul, 1991; Raterron *et al.*, 1994; Amiguet, 2009) ou de polycristaux (Kirby & Christie, 1977; Lallemant, 1978; Bolland & Tullis, 1986; Zhang *et al.*, 2006).

La plasticité du diopside est une problématique complexe. Les études réalisées sur monocristaux à basse pression montrent un changement de mode de déformation passant du maclage mécanique à basse température aux glissement des dislocations pour des températures supérieures à 800 °C. De plus, on note un changement de système de glissement dominant le fluage par dislocations avec la température, passant du glissement des dislocations [001] au glissement des dislocations  $1/2[110]$  pour des températures supérieures à 1000 °C. Dans les conditions de pression et température du manteau supérieur profond ( $P \sim 9\text{GPa}$ ,  $1100 < T < 1400$  °C), les glissements [001] et  $1/2[110]$  ont une activité comparable (Amiguet, 2009). Ces changements dans les mécanismes de déformation opérant à haute température et à haute pression peuvent être liés aux modifications des structures de coeur des dislocations responsables de la plasticité. La connaissance des structures de coeur des dislocations du diopside à basse et haute pression est alors nécessaire pour comprendre les phénomènes qui gouvernent la plasticité de ce minéral.

L'étude présentée dans ce chapitre s'inscrit dans la continuité des travaux expérimentaux réalisés par Amiguet (2009) sur la déformation du diopside monocristallin à haute pression (9GPa) dans une machine de déformation-DIA. Les microstructures des échantillons déformés ont été observés en microscopie électronique à transmission. Cinq systèmes de glissement ont été caractérisés : [100](010), [010](100), [001](100), [001](110) et  $1/2[110](110)$ .

Dans ce chapitre, nous déterminerons les structures de coeur ainsi que les contraintes de Peierls des dislocations de vecteur de Burgers  $[100]$ ,  $[010]$ ,  $[001]$  et  $1/2[110]$ . L'effet de pression sera étudié en effectuant les calculs à 0 et 10GPa. Nous utiliserons le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel décrit au chapitre 1 pour étudier les dislocations de ce minéral. De par sa structure monoclinique, l'étude de toutes les dislocations n'est pas possible avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Le code *Cod<sup>2</sup>ex* ne prend pas en compte les structures de plus basse symétrie que la symétrie orthorhombique (cf. chapitre 1). Toutefois, la structure de coeur de la dislocation  $[001]$  dans le plan  $(100)$  pourra être déterminée avec ce modèle : le plan  $(100)$  présente des vecteurs de base perpendiculaires. Les constantes élastiques ainsi que les énergies de fautes d'empilement généralisées introduites dans le modèle de Peierls-Nabarro seront calculées avec le potentiel THB1 qui fournit des résultats satisfaisants par rapport à des calculs *ab initio* et qui présente l'avantage d'une consommation de ressources informatiques moindre.

## 5.1 Structure et déformation plastique du diopside

Le diopside  $CaMgSi_2O_6$  cristallise dans le système monoclinique, dans le groupe d'espace  $C2/c$ . Ce silicate est formé de chaînes infinies de tétraèdres ( $SiO_4$ ) partageant deux sommets d'oxygène. Ces chaînes sont parallèles à la direction  $c$ . La structure cristalline est présentée sur la figure (5.1). Le diopside est le pôle magnésien des clinopyroxènes et est stable jusqu'aux conditions de pression et température de la zone de transition (Presnall, 1995). Ses paramètres de maille mesurés expérimentalement à température et pression ambiante sont :  $a=9,746 \text{ \AA}$ ,  $b=8,899 \text{ \AA}$ ,  $c=5,251 \text{ \AA}$  et  $\beta=105,63^\circ$  (Cameron *et al.*, 1973).

Les expériences de déformation décrites dans la littérature font apparaître deux domaines de déformation :

- Un domaine basse température et/ou forte contrainte où le maclage mécanique est dominant. Les systèmes de maclage  $[001](100)$  et  $[100](001)$  apparaissent dans les expériences de déformation de Raleigh & Talbot (1967) sur des roches naturelles riches en diopside ainsi que dans l'étude de Kirby & Christie (1977) sur des polycristaux de diopside. Lallemand (1978) puis Kolle & Blacic (1982) observent ces mêmes macles dans des monocristaux déformés avec une machine de Griggs.
- Un domaine haute température où prédomine le glissement des dislocations. Trois études sur la déformation des polycristaux ont été réalisées pour des pressions de confinement infé-

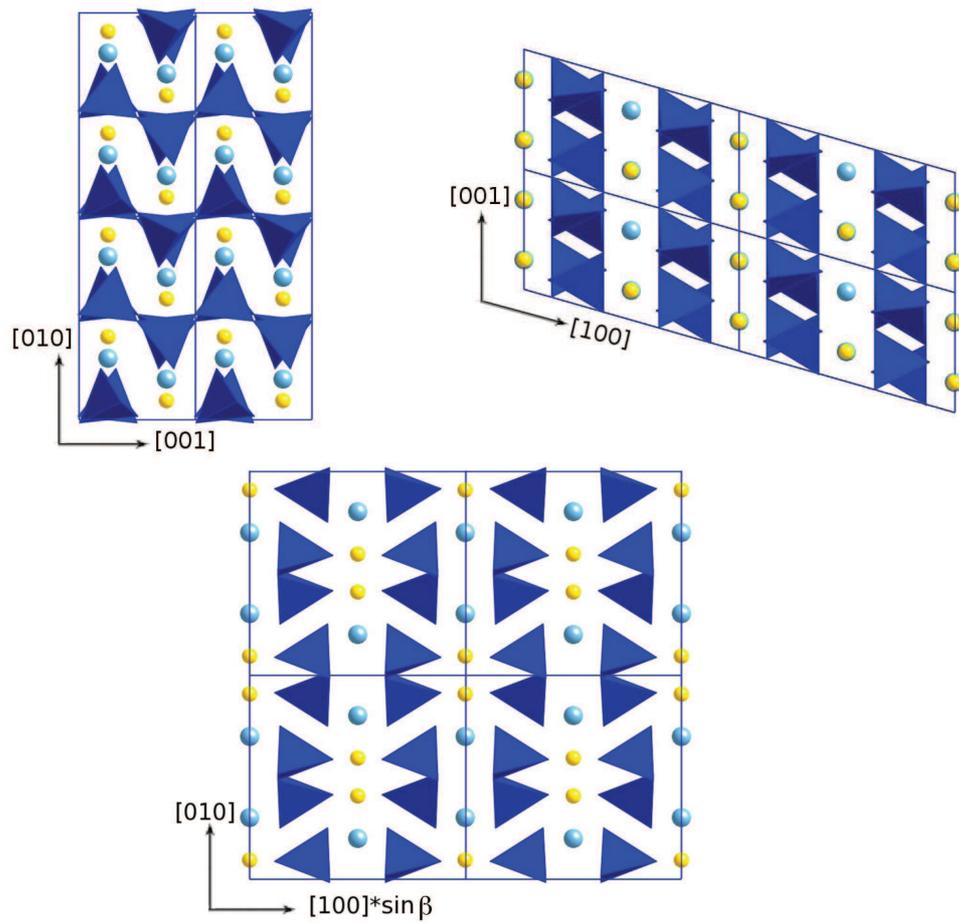


FIG 5.1 – Projections de 2\*2 mailles du diopside suivant les directions de réseau  $[100]$ ,  $[010]$  et  $[001]$ . Sur ces projections, les atomes de magnésium et de calcium sont colorés respectivement en jaune et en bleu. Nous représentons également les arrangements des chaînes de tétraèdres  $(SiO_3)_\infty$ .

rieures à 3GPa (Lallemant, 1978; Bolland & Tullis, 1986; Zhang *et al.*, 2006). De ces études, il ressort que les systèmes de glissement  $1/2[110]\{110\}$  et  $[001](100)$  sont les plus actifs pour déformer plastiquement le diopside. Les études sur la déformation de monocristaux à pression ambiante sont apparues dans les années 1990. A basse température ( $<1000^\circ\text{C}$ ), les systèmes de glissement activés sont  $[100](010)$ ,  $1/2\langle 110\rangle\{110\}$ ,  $[001](010)$  et  $[001](100)$ , ce dernier nécessitant une contrainte d'activation plus faible que les autres (Ingrin *et al.*, 1992). A haute température ( $>1000^\circ\text{C}$ ), les études de Raterron & Jaoul (1991); Raterron *et al.* (1994) ont montré que le système de glissement  $1/2\langle 110\rangle\{110\}$  domine la déformation plastique. Enfin, une nouvelle étude a été réalisée par Amiguet (2009) sur des monocristaux déformés sous une pression isostatique de 9GPa. Cinq systèmes de glissement ont été activés et les dislocations responsables de la plasticité caractérisées au microscope électronique en transmission. Il s'agit des dislocations  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001]\{110\}$  et  $1/2\langle 110\rangle\{110\}$  avec prépondérance des glissements  $[001](110)$  et  $1/2\langle 110\rangle\{110\}$  qui ont une activité similaire.

## 5.2 Résultats

### 5.2.1 Méthode

Nous voulons modéliser les dislocations dans le diopside associées aux systèmes de glissement caractérisées par Amiguet (2009) :  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](110)$  et  $1/2[110](110)$ . Nous ajoutons également le système de glissement  $[001](010)$  caractérisé par Ingrin *et al.* (1992) à basse pression. Du fait de la structure monoclinique du diopside, les angles entre les vecteurs de base des plans de glissement ne sont pas tous égaux à  $90^\circ$ . Cette situation se produit pour les plans (010) et (110). Dans le plan (010), l'angle entre les vecteurs de base  $\vec{a}$  et  $\vec{c}$  est égal à  $\beta$ . Dans le plan (110) les vecteurs de base  $\vec{c}$  et  $1/2(\vec{a} + \vec{b})$  font un angle de  $\arccos\left(\frac{a \cdot \cos\beta}{1/2|a+b|}\right) \sim 101^\circ$  en utilisant les données de Cameron *et al.* (1973). Ceci implique que nous ne pouvons pas appliquer un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin aux dislocations glissant dans les plans (010) et (110) : le code *Cod2ex* ne sait gérer que des symétries supérieures à la symétrie orthorhombique. Nous pourrions par contre décrire la dislocation  $[001]$  glissant dans le plan (100) avec ce modèle car l'angle entre les vecteurs de base  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$  est bien égal à  $\frac{\pi}{2}$ . Nous nous tournons alors vers une description de toutes les structures de coeurs des dislocations avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. L'équation de Peierls-Nabarro sera résolue en utilisant la solution développée par Joós *et al.* (1994) (cf. chapitre 1). Nous recherchons l'étalement  $f$  et la densité locale de vecteur de Burgers  $\rho$  de nos dislocations. Pour la dislocation  $[001](100)$ , la structure de coeur sera recherchée avec ce modèle unidimensionnel et le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.

Nous calculerons les surfaces d'énergie de fautes d'empilement généralisées des plans (100), (010) et (110) à 0 et 10GPa avec le potentiel THB1. L'application du modèle unidimensionnel nécessite l'introduction des énergies de fautes d'empilement généralisées des six systèmes de glissement étudiés qui seront extraites du calcul des surfaces d'énergies complètes. La description de la dislocation  $[001](100)$  nécessite, quant à elle, l'introduction de l'énergie de faute du plan (100) complet.

Quels sont les caractères des dislocations à étudier ? Cette question se pose pour un minéral monoclinique. Contrairement à des matériaux de haute symétrie où on ne s'intéresse qu'aux caractères vis et coin uniquement, il semble nécessaire de déterminer les structures de coeur des dislocations pour des caractères mixtes dans le diopside. Le diopside étant élastiquement très anisotrope, le choix des caractères pertinents pour l'étude des dislocations sera réalisé en calculant l'énergie élastique de la dislocation en élasticité anisotrope avec le logiciel *DisDi* pour

	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	$\beta(^{\circ})$
THB1-cette étude	9,7526	8,9374	5,2571	105,77
PAW-GGA-cette étude	9,8449	9,0006	5,3001	106,04
US-GGA (Walker <i>et al.</i> , 2008)	9,910	9,051	5,330	106,51
exp. (Cameron <i>et al.</i> , 1973)	9,746	8,899	5,251	105,63

TAB 5.1 – Paramètres de maille du diopside à 0GPa calculés avec le potentiel THB1 et *ab initio*. Une comparaison avec d'autres calculs *ab initio* réalisés avec des pseudo-potentiels UltraSoft et des données expérimentales est également fournie.

tous les caractères des dislocations. Le choix des caractères étudiés dépendra de ces résultats.

Nous calculons également la contrainte de Peierls des dislocations dont la structure de coeur sera déterminée avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Ce calcul est réalisé par dérivation de la somme de l'énergie de fautes d'empilement généralisées sur l'ensemble du coeur de la dislocation (formule (1.22)- chapitre 1). Il faut alors définir la périodicité  $a'$  des vallées de Peierls franchies par la dislocation lors de son déplacement. Dans le cas du diopside, la détermination de ce paramètre est difficile de par sa structure cristalline. Nous choisissons la plus petite distance à parcourir par la dislocation pour se retrouver dans le même environnement atomique. On déterminera ce paramètre  $a'$  après avoir choisi les caractères des dislocations que nous allons étudier. Pour la dislocation  $[001](100)$  déterminée avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, le calcul de la contrainte de Peierls n'est pas possible. Dans le formalisme de ce modèle, il est nécessaire d'introduire des plans non-parallèles au plan de glissement pour obtenir une valeur réaliste de cette contrainte (cf. chapitre 1). Ces plans non-parallèles, différents du plan (100), ne sont pas gérés par *Cod<sup>2</sup>ex* car leurs vecteurs de base ne sont pas perpendiculaires.

## 5.2.2 Paramètres de maille et constantes élastiques

Nous utilisons le potentiel empirique THB1 décrit dans le chapitre 2 pour modéliser le cristal à 0 et 10GPa. Un autre potentiel, développé par Matsui & Busing (1984) est limité à 5 GPa pour l'étude du diopside. Les paramètres de maille calculés avec ce potentiel à 0 et 10 GPa, ainsi qu'une comparaison avec l'expérience et des calculs *ab initio* que nous avons effectué (approximation GGA- pseudopotential PAW) ou d'autres calculs *ab initio* sont donnés dans les tableaux (5.1) et (5.2). De même, les constantes élastiques calculées et mesurées à 0 et 10GPa figurent dans les tableaux (5.3) et (5.4).

La comparaison des paramètres de maille montre que le potentiel THB1 reproduit la structure

	$a(\text{Å})$	$b(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	$\beta(^{\circ})$
THB1-cette étude	9,5493	8,6597	5,1194	104,32
<i>US-GGA</i> (Walker <i>et al.</i> , 2008)	9,639	8,760	5,176	105,15
exp. (10,16GPa) (Thompson & Downs, 2008)	9,516	8,645	5,125	105,03
exp. (9,97GPa) (Zhang <i>et al.</i> , 1997)	9,520	8,640	5,118	105,03

Tab 5.2 – Paramètres de maille du diopside à 10GPa calculés avec le potentiel THB1. Une comparaison avec d'autres calculs *ab initio* réalisés avec des pseudo-potentiels UltraSoft et des données expérimentales est également fournie.

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{15}$	$C_{23}$	$C_{25}$	$C_{35}$	$C_{46}$
THB1-cette étude	201	167	298	67	52	69	96	76	22	73	11	39	11
exp. (Levien <i>et al.</i> , 1979)	223	171	235	74	67	66	77	81	17	57	7	43	7

Tab 5.3 – Constantes élastiques (en GPa) du diopside à 0GPa calculées avec le potentiel THB1 comparées à des valeurs déterminées expérimentalement.

du diopside à 0 et 10GPa. Les résultats sont légèrement supérieurs aux valeurs mesurées. L'erreur relative entre nos calculs et les données expérimentales est inférieure à 0,5% à 0GPa et inférieure à 0,3% à 10GPa. Par contre, les paramètres de maille calculés avec le potentiel empirique sont sous-estimés par rapport aux calculs *ab initio*. Ceci provient de l'utilisation de l'approximation GGA qui surestime les paramètres de maille.

Nous comparons les constantes élastiques calculées par potentiel empirique THB1 avec les données expérimentales de Levien *et al.* (1979) à 0GPa. Les valeurs calculées restent dans l'ordre de grandeur des constantes élastiques mesurées. A 10GPa, il n'existe aucune étude expérimentale pour vérifier nos résultats.

### 5.2.3 Choix des caractères des dislocations étudiés

Le diopside est un minéral très anisotrope d'un point de vue élastique. Cette anisotropie peut conduire à des différences importantes sur les coefficients énergétiques  $K$  des dislocations. Nous allons déterminer ce coefficient  $K$  pour toutes les orientations d'une ligne de dislocation par rap-

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{15}$	$C_{23}$	$C_{25}$	$C_{35}$	$C_{46}$
THB1-cette étude	253	197	323	60	58	96	148	114	18	105	8	38	8

Tab 5.4 – Constantes élastiques (en GPa) du diopside à 10GPa calculées avec le potentiel THB1.

port à son vecteur de Burgers. Nous calculons  $K$  à partir de l'énergie de la dislocation déterminée avec le logiciel *DisDi* dans lequel nous avons introduit les constantes élastiques calculées avec le potentiel THB1. Ce coefficient  $K$  est donné par :

$$K = \frac{4\pi E}{\ln\left(\frac{R}{r_0}\right) * b^2} \quad (5.1)$$

Dans cette équation,  $E$  est l'énergie élastique de la dislocation,  $b$  le module du vecteur de Burgers. Les valeurs  $R$  et  $r_0$  sont respectivement égales à  $100b$  et  $0,3b$  d'après la documentation de *DisDi*. On calcule alors l'énergie de la dislocation pour toutes les orientations de la ligne de dislocation par rapport au vecteur de Burgers et on en déduit le coefficient  $K$  pour toutes ces orientations.

On représente la variation du facteur  $K$  pour toutes les orientations des dislocations sur la figure (5.2).

Cette figure montre les minimums et maximums pour les coefficients  $K$  : nous pouvons maintenant choisir les caractères des dislocations que nous choisissons d'étudier :

- Dans le plan (100), les minimums et maximums des coefficients  $K$  sont respectivement pour les caractères vis et coin des dislocations  $[010](100)$  et  $[001](100)$  : nous déterminerons les structures de coeurs et les contraintes de Peierls de ces dislocations.
- Dans le plan (010), les minimums des coefficients  $K$  apparaissent pour des orientations  $\beta - \frac{\pi}{2} \sim 16^\circ$  de la ligne par rapport au vecteur de Burgers aussi bien pour la dislocation  $[100](010)$  que  $[001](010)$ . Les coefficients  $K$  associés à cet angle sont proches du coefficient  $K$  calculé pour le caractère vis :  $K_{vis}=57,5\text{Pa}$  et  $K_{16}=54,1\text{GPa}$  pour le système  $[100](010)$  et  $K_{vis}=58,1\text{GPa}$  et  $K_{16}=55,5\text{GPa}$  pour le système  $[001](010)$ . De même, les maximums de  $K$  sont pour des orientations  $\beta$  de la ligne par rapport au vecteur de Burgers, ce qui correspond à une ligne de dislocation dans la direction  $[001]$  pour la dislocation  $[100](010)$  et une direction  $[100]$  pour la dislocation  $[001](010)$ . De manière à simplifier les calculs et à augmenter la visibilité, on traitera le caractère vis et le caractère mixte  $\theta = \beta$  que nous appellerons "coin" dans la suite du document pour les dislocations  $[100](010)$  et  $[001](010)$ .
- Enfin, dans le plan (110), les minimums des coefficients  $K$  apparaissent pour des orientations  $\arccos\left(\frac{a*\cos\beta}{1/2|a+b|}\right) - \frac{\pi}{2} \sim 11^\circ$  de la ligne par rapport au vecteur de Burgers aussi bien pour la dislocation  $[001](110)$  que  $1/2[110](110)$ . Les coefficients  $K$  associés à cet angle sont proches du coefficient  $K$  calculé pour le caractère vis :  $K_{vis}=50,0\text{Pa}$  et  $K_{11}=48,2\text{GPa}$  pour le système  $1/2[110](110)$  et  $K_{vis}=58,1\text{GPa}$  et  $K_{11}=56,4\text{GPa}$  pour le système  $[001](110)$ . De

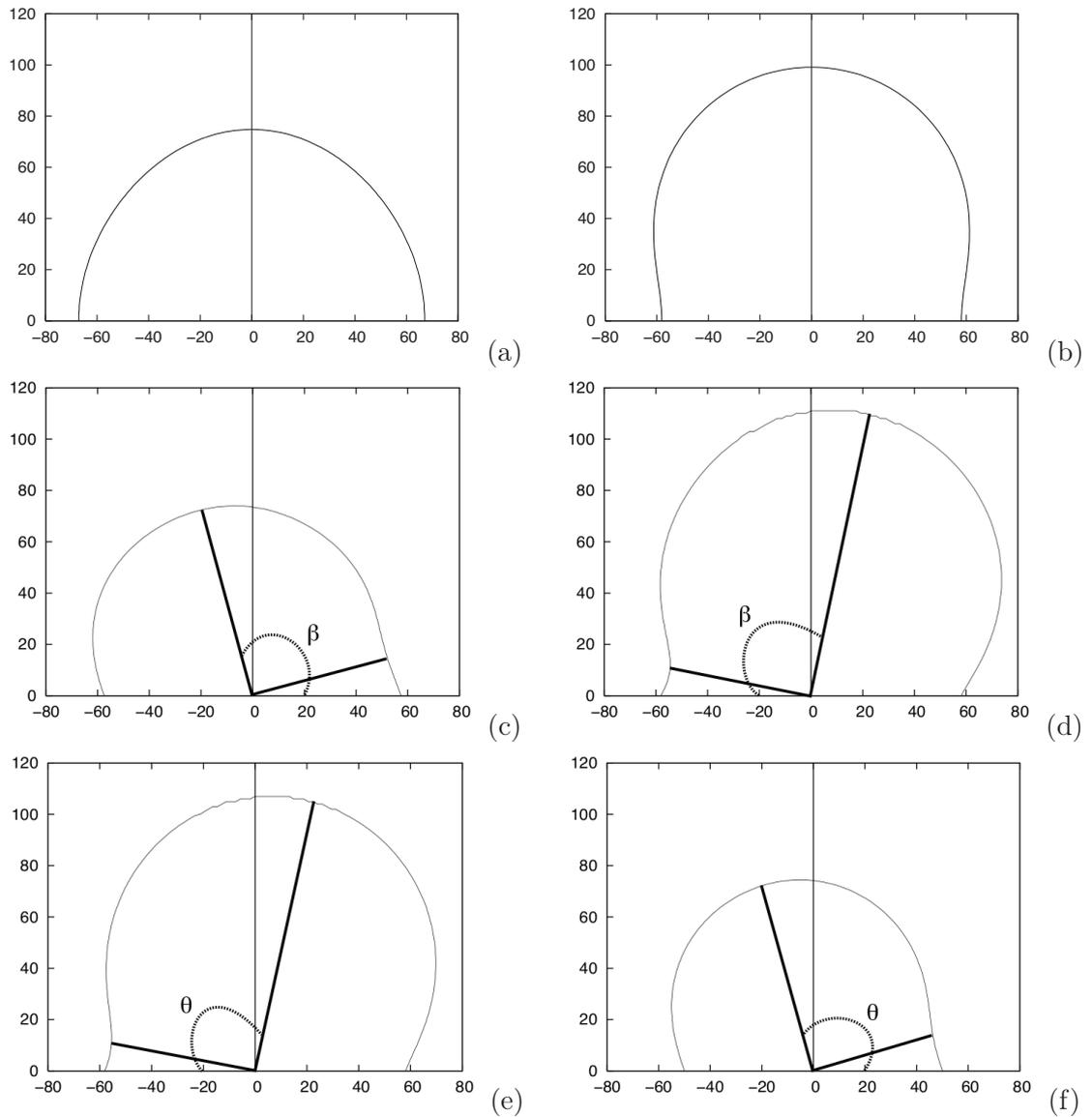


FIG 5.2 – Coefficients énergétiques  $K$  (en GPa) en fonction de l'orientation de la ligne de la dislocation par rapport au vecteur de Burgers pour la dislocation  $[100](010)$  (a),  $[001](010)$  (b),  $[100](010)$  (c),  $[001](010)$  (d),  $[001](110)$  (e),  $1/2[110](110)$  (f). On utilise sur cette figure les coordonnées polaires. Les minimums et maximums des courbes sont mis en évidence pour les dislocations dans les plans (010) et (110). Pour les dislocations dans le plan (110), l'angle  $\theta$  est égal à  $\arccos\left(\frac{a \cdot \cos \beta}{1/2|a+b|}\right)$

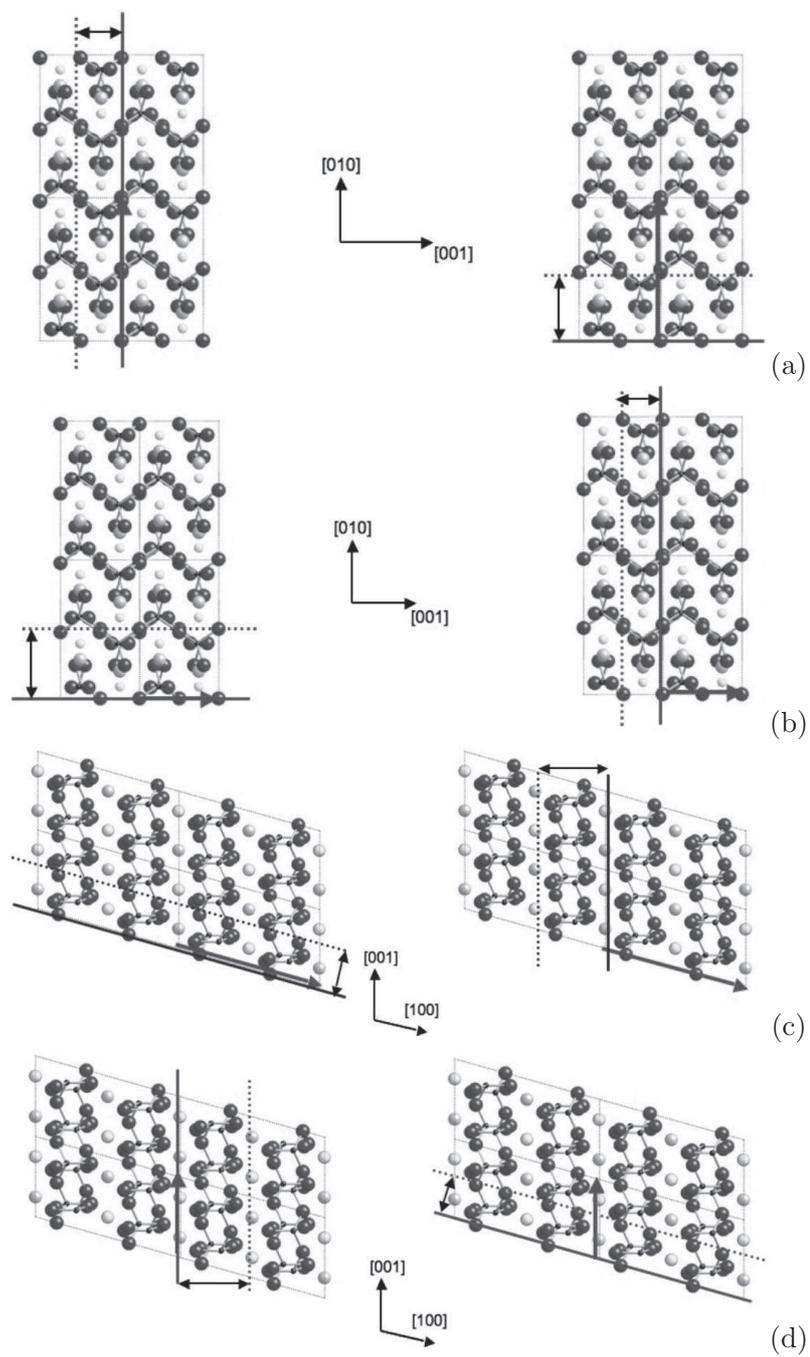
	vis	coin
[100](010)	57,5 (69,8)	75,1 (89,0)
[010](100)	67,1 (75,5)	74,8 (83,5)
1/2[110](110)	50,0 (46,9)	74,9 (86,4)
[001](100)	58,1 (58,6)	99,1 (107)
[001](010)	58,1 (58,6)	111 (110)
[001](110)	58,1 (58,6)	107 (112)

TAB 5.5 – Coefficients énergétiques  $K$  (en GPa) des caractères vis et coin des dislocations du diopside à 0 et 10GPa (entre parenthèses)

même, les maximums de  $K$  sont pour des orientations  $\arccos(\frac{a*\cos\beta}{1/2|a+b|})$  de la ligne par rapport au vecteur de Burgers, ce qui correspond à une ligne de dislocation dans la direction [001] pour la dislocation 1/2[110](110) et une direction [110] pour la dislocation [001](110). Comme pour les dislocations dans le plan (010), on calcule les structures de coeurs et les contraintes de Peierls des caractères vis et mixte  $\theta=\arccos(\frac{a*\cos\beta}{1/2|a+b|})$  que nous appellerons "coin" dans la suite du document pour les dislocations 1/2[110](110) et [001](110).

Les coefficients  $K$  à 0 et 10GPa nécessaires à l'application du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel pour tous ces caractères sont donnés dans le tableau (5.5).

Après avoir déterminé les caractères des dislocations, nous pouvons définir les périodicités  $a'$  des vallées de Peierls. Celles-ci sont mises en évidence sur la figure (5.3) et données dans le tableau (5.6).



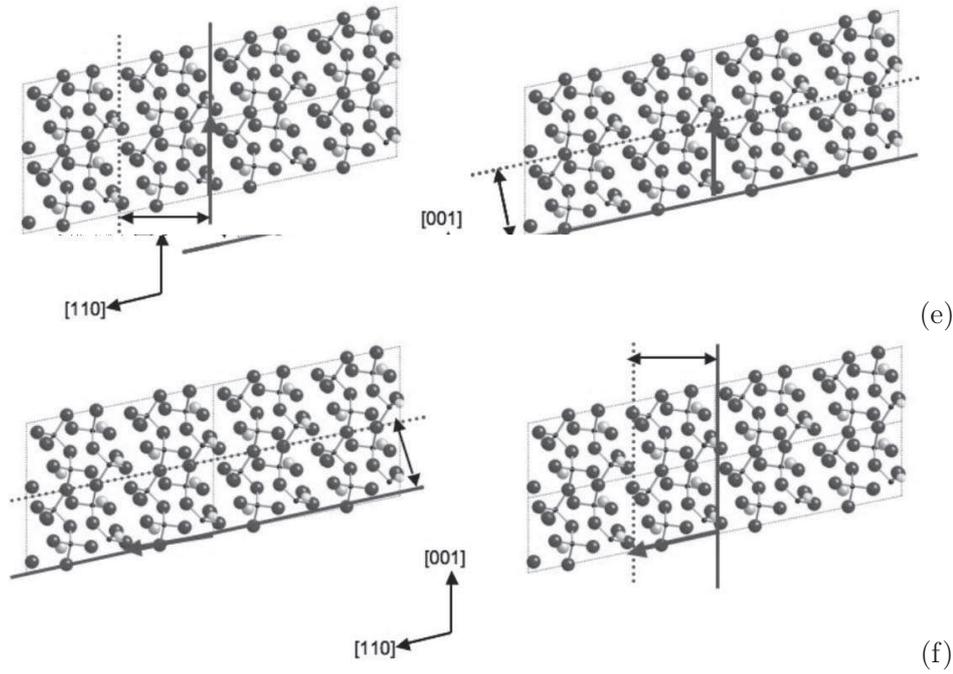


FIG 5.3 – Illustration des vallées de Peierls  $a'$  des caractères vis et coin des dislocations du diopside sur la structure cristalline. (a)  $[010](100)$ , (b)  $[001](100)$ , (c)  $[100](010)$ , (d)  $[001](010)$ , (e)  $[001](110)$ , (f)  $1/2[110](110)$

	vis	coin
$[100](010)$	$0,5 * c * \sin(\beta)$ (2,5)	$0,5 * a * \sin(\beta)$ (4,9)
$[010](100)$	$0,5 * c$ (2,6)	$0,5 * b$ (4,5)
$1/2[110](110)$	$c * \sin(\arccos(\frac{a * \cos \beta}{1/2 a+b }))$ (5,1)	$1/2(a + b) * \sin(\arccos(\frac{a * \cos \beta}{1/2 a+b }))$ (2,6)
$[001](100)$	$0,5 * b$ (4,5)	$0,5 * c$ (2,6)
$[001](010)$	$0,5 * a * \sin(\beta)$ (4,7)	$0,5 * c * \sin(\beta)$ (2,5)
$[001](110)$	$1/2(a + b) * \sin(\arccos(\frac{a * \cos \beta}{1/2 a+b }))$ (6,4)	$c * \sin(\arccos(\frac{a * \cos \beta}{1/2 a+b }))$ (5,2)

TAB 5.6 – Définitions des périodicités  $a'$  des vallées de Peierls des caractères vis et coin des dislocations dans le diopside. On donne entre parenthèses la valeur numérique en  $\text{Å}$  à 0GPa.

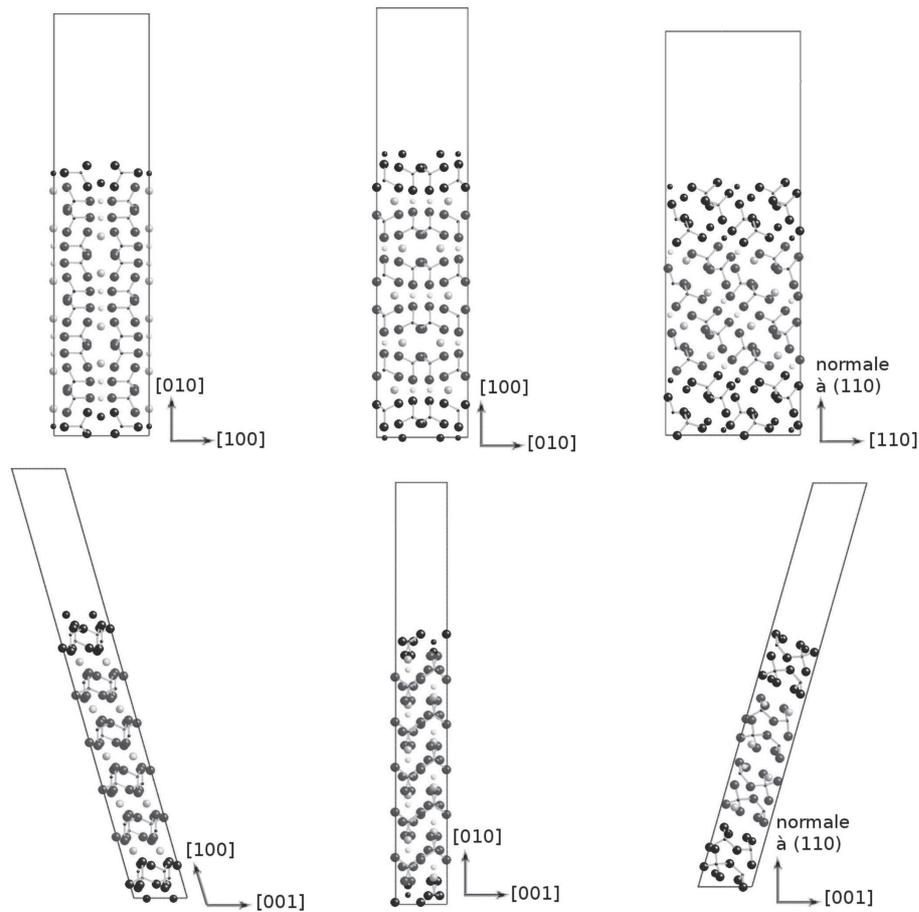


FIG 5.4 – Supercellules utilisées pour le calcul des énergies de fautes d’empilement généralisées. Les atomes noirs ne sont pas autorisés à relaxer durant le calcul.

### 5.2.4 Fautes d’empilement généralisées

Nous calculons les surfaces d’énergie de fautes d’empilement des plans (100), (010), (110) à 0 et 10GPa avec le potentiel THB1. Les énergies de fautes d’empilement généralisées des systèmes de glissement  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001](110)$  et  $1/2[110](110)$  seront extraites du calcul de ces surfaces. Les supercellules utilisées pour les calculs sont présentées sur la figure (5.4) et sont construites avec la méthode explicitée dans le chapitre 2. Nous avons tout d’abord comparé les  $\gamma$  – *lines* des systèmes  $[100](010)$  et  $[001](010)$  à 0GPa avec des calculs *ab initio* (PAW-GGA), le potentiel THB1 n’étant pas initialement développé pour étudier la réponse du diopside au cisaillement du cristal (cf chapitre 2). Les comparaisons sont données sur la figure (5.5).

D’après cette figure, le potentiel empirique THB1 reproduit bien les formes des courbes mais

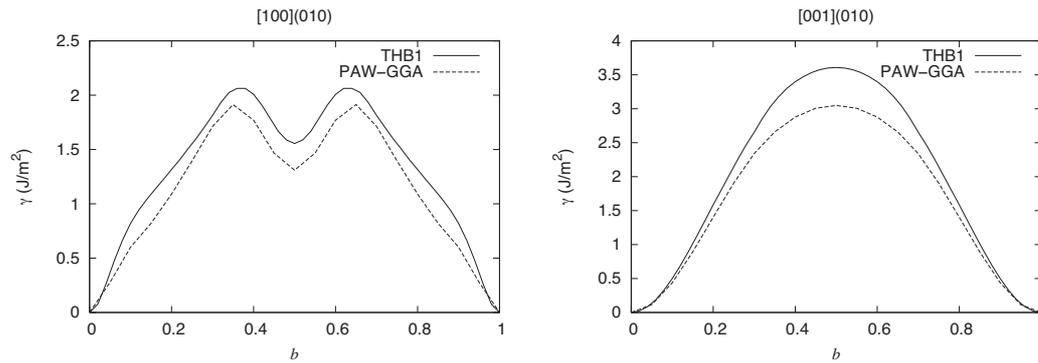


FIG 5.5 – Comparaison entre l'énergie de fautes d'empilement (en  $J.m^{-2}$ ) calculée avec le potentiel empirique *THB1* et *ab initio* (PAW-GGA) pour les systèmes de glissement  $[100](010)$  et  $[001](010)$  du diopside à 0GPa. (courbes non-lissées)

donne une valeur d'énergie légèrement supérieure par rapport aux calculs *ab initio*. Pour le système  $[100](010)$ , les deux calculs reproduisent les épaulements sur la courbe situés à 10 et 90% de cisaillement ainsi que le minimum local à 50% de cisaillement. Dans le cas du système  $[001](010)$ , les maximums de la courbe  $\gamma = f(b)$  se situent à  $f=0,5*b$  pour les calculs effectués *ab initio* et avec le potentiel empirique. Le potentiel empirique nous donnera les bonnes positions des fautes d'empilement stables possibles mais l'énergie de fautes d'empilement sera surestimée par rapport à des calculs *ab initio*.

Les résultats des calculs avec le potentiel THB1 des  $\gamma$  – surfaces des plans (100), (010) et (110) à 0 et 10GPa sont présentés sur la figure (5.6). Les  $\gamma$  – lignes correspondant aux six systèmes de glissement étudiés sont données sur la figure (5.7) à 0 et 10 GPa.

D'après ces figures, les formes des courbes d'énergie  $\gamma$  en fonction du cisaillement varient peu entre 0 et 10GPa. On observe par contre une variation de l'énergie de fautes avec la pression.

Le système de glissement  $[001](100)$  présente des valeurs d'énergies de fautes faibles pour des cisaillements compris entre 0 et 20%. Cette énergie de faute évolue ensuite rapidement pour être maximum à 64% de  $b$  à 0GPa et à 60% de  $b$  à 10GPa (figure (5.7-d)). Les maximums des énergie de faute pour ce système de glissement sont égaux respectivement à 3,13 et 3,82  $J.m^{-2}$  à 0 et 10GPa. Dans la direction  $[010]$ , l'énergie de faute du système de glissement  $[010](100)$  est maximale pour 25 et 75% de cisaillement. Il apparaît également un maximum local à 50% de cisaillement à 0GPa qui disparaît avec la pression. La différence d'énergie à 0GPa entre ce maximum et les minimums locaux est très faible, égale à 0,04  $J.m^{-2}$  (figure (5.7-b)). La surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (100) montre un chemin de basse énergie qui contourne le maximum observé sur la direction  $[001]$  (figure (5.6-a)) aussi bien à 0 qu'à

10GPa.

Le système [100](010) présente une faute d'empilement stable pour un cisaillement  $b/2$  ainsi qu'un changement de pente à 10 et 90% de cisaillement à 0GPa et à 14 et 86% de cisaillement à 10GPa. Les maximas de ces courbes valent respectivement 2 et 3  $J.m^{-2}$  à 0 et 10GPa. De même, les énergie de fautes stables sont égales à 1,55 et 2,12  $J.m^{-2}$  à ces mêmes pressions. La description du système [001](010) est plus aisée : la courbe d'énergie de fautes présente un maximum global à 50% de cisaillement, égal à 3,60 et 4,52  $J.m^{-2}$  à 0 et 10GPa. Quant à la surface d'énergie de fautes d'empilement du plan (010), celle-ci présente un minimum local hors des directions [100] et [001]. Ce minimum est repéré par la lettre A sur la surface d'énergie de fautes d'empilement du plan (010).

Enfin, les calculs d'énergie de fautes d'empilement du système de glissement  $1/2[110](110)$  montrent un minimum local d'énergie pour un cisaillement  $\frac{11}{40}[110]$ . L'énergie associée à ce minimum local est plus faible à 10GPa qu'à 0GPa, passant de 2,17 à 2,02  $J.m^{-2}$  (figure (5.7-c)). Le glissement [001](110) présente un maximum global à 50% de cisaillement, l'énergie de fautes est égale à 2,33 et 3,24 respectivement à 0 et 10GPa. Le plan (110) montre également un minimum local, repéré par la lettre B sur la surface d'énergie de faute d'empilement à 0 et 10GPa.

### 5.2.5 Structures de coeur des dislocations et contraintes de Peierls

#### Structures de coeurs et contraintes de Peierls à 0GPa.

Les résultats obtenus avec le modèle de Peierls unidimensionnel à 0 GPa sur les étalements de coeur des caractères vis sont donnés sur la figure (5.8) et des caractères coin sur la figure (5.9). Le tableau (5.7) résume les résultats obtenus sur les structures de coeurs. Les résultats des calculs de contraintes de Peierls sont présentés dans le tableau (5.8).

A 0GPa, les étalements des dislocations de la figure (5.8) montrent une décomposition de la densité locale de vecteur de Burgers de la dislocation vis [100](010) en quatre pics. Les deux pics externes sont très convolués avec les pics internes : on analysera cette dislocation comme une dislocation dissociée en deux dislocations partielles colinéaires de vecteur de Burgers  $1/2[100]$  et présentant des coeurs larges. On observe la même décomposition en quatre pics sur le caractère coin qui sera alors analysée comme le caractère vis en deux dislocations partielles. La distance de dissociation sera prise entre les deux pics internes de la figure (5.8) . Les demi-largeurs de coeurs et les distances de dissociation sont présentées dans le tableau (5.7). Les contraintes de Peierls pour déplacer cette dislocation valent 0,8 et 1,9 GPa pour les caractères vis et coin. (cf.

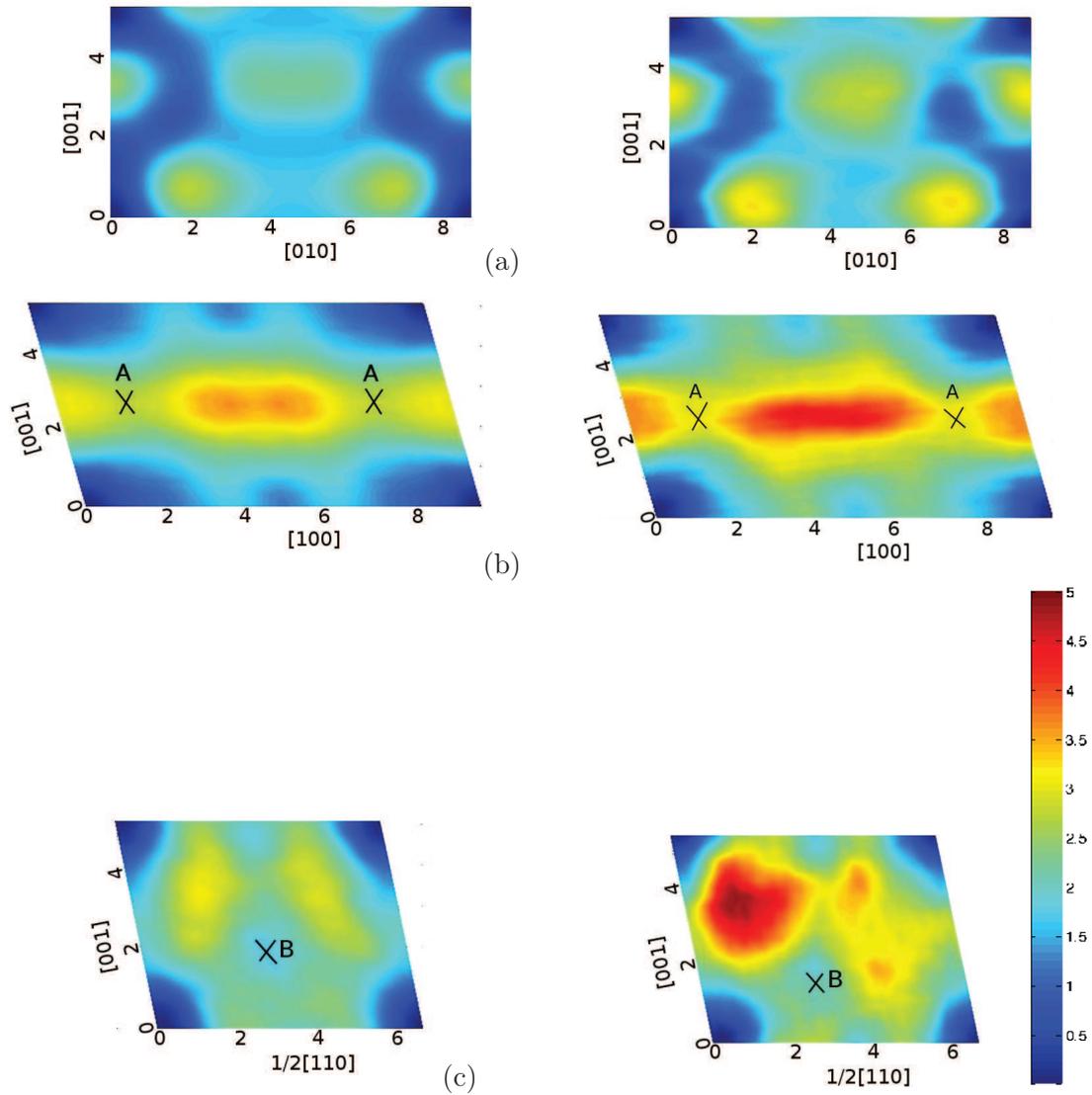


FIG 5.6 – Surfaces d'énergies de fautes d'empilement généralisées calculées avec le potentiel THB1 à 0 (à gauche) et 10GPa (à droite) des plans (100) (a), (010) (b) et (110) (c). Les niveaux de couleur représentent l'intensité de l'énergie en  $J.m^{-2}$ . (courbes lissées)

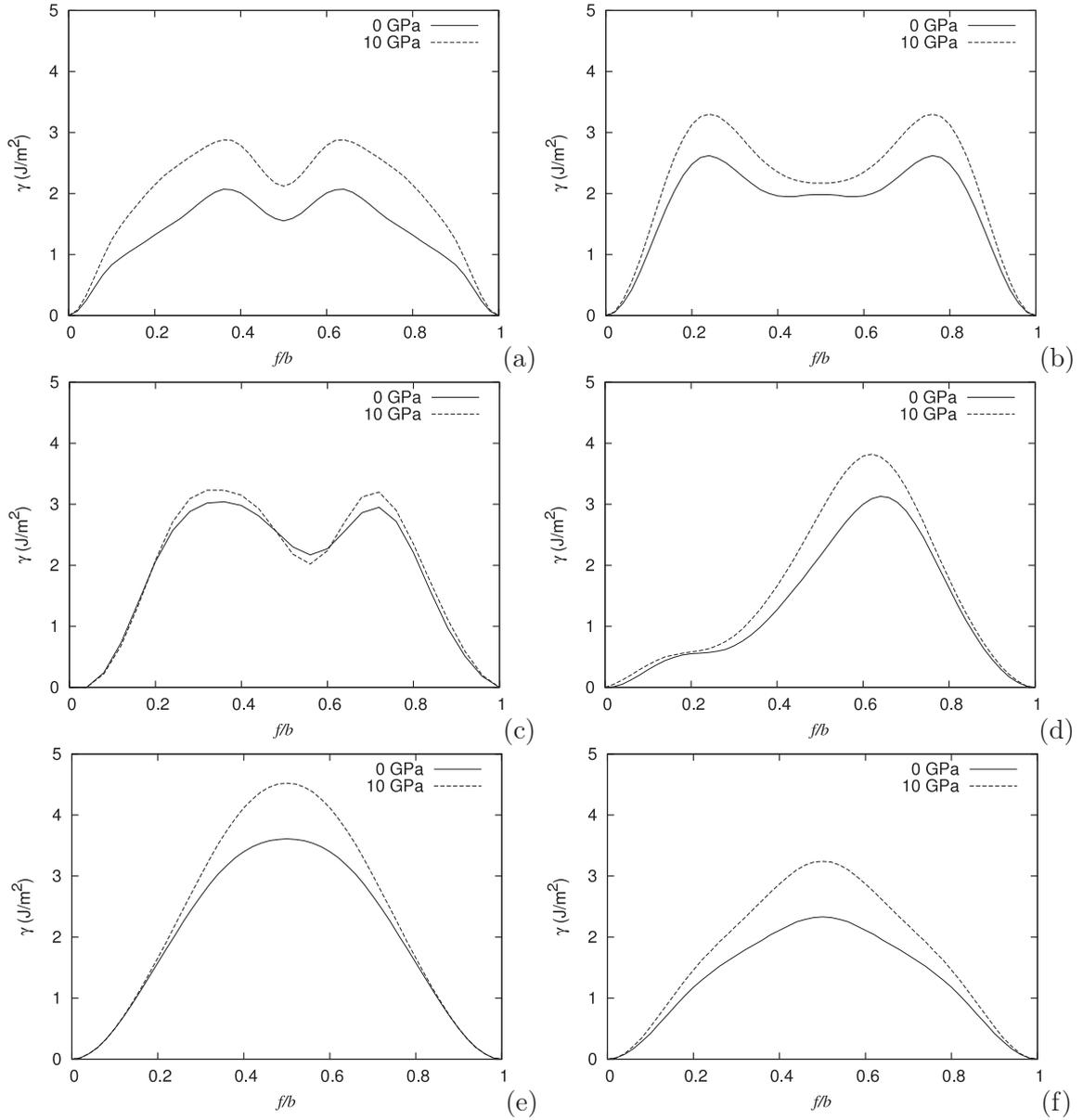


FIG 5.7 – Energies de fautes d'empilement généralisées pour les six systèmes de glissement étudiés à 0 et 10GPa. (a)  $:[100](010)$ , (b)  $:[010](100)$ , (c)  $:[1/2][110](110)$ , (d)  $:[001](100)$ , (e)  $:[001](010)$ , (f)  $:[001](110)$ . Ces énergies de faute ont été calculées avec le potentiel THB1. (courbes lissées)

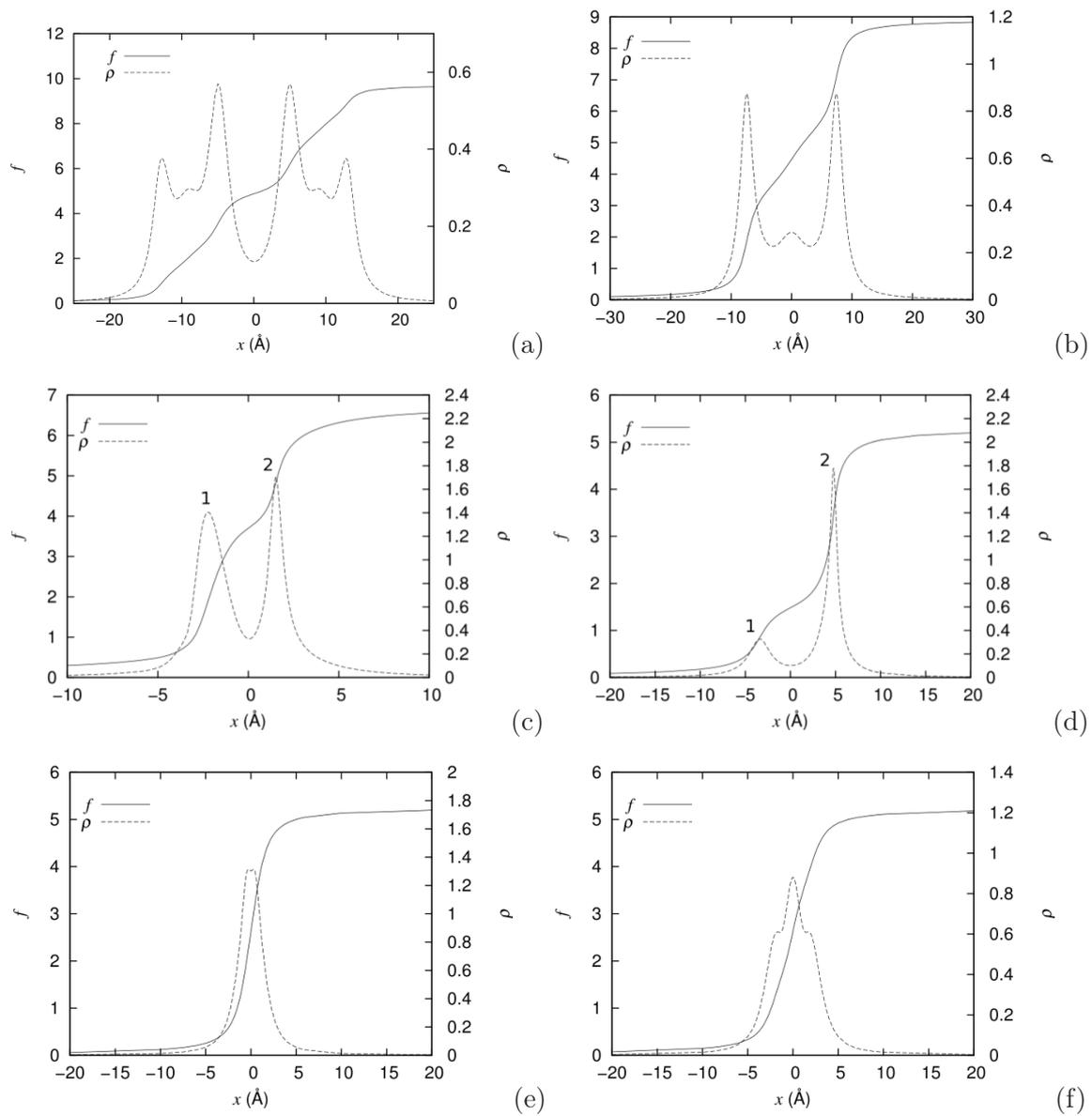


FIG 5.8 – Etalements  $f$  et densité locale de dislocations  $\rho$  des dislocations vis des six systèmes de glissement étudiés à 0GPa. (a)  $:\{100\}(010)$ , (b)  $:\{010\}(100)$ , (c)  $:\frac{1}{2}[110](110)$ , (d)  $:\{001\}(100)$ , (e)  $:\{001\}(010)$ , (f)  $:\{001\}(110)$ .

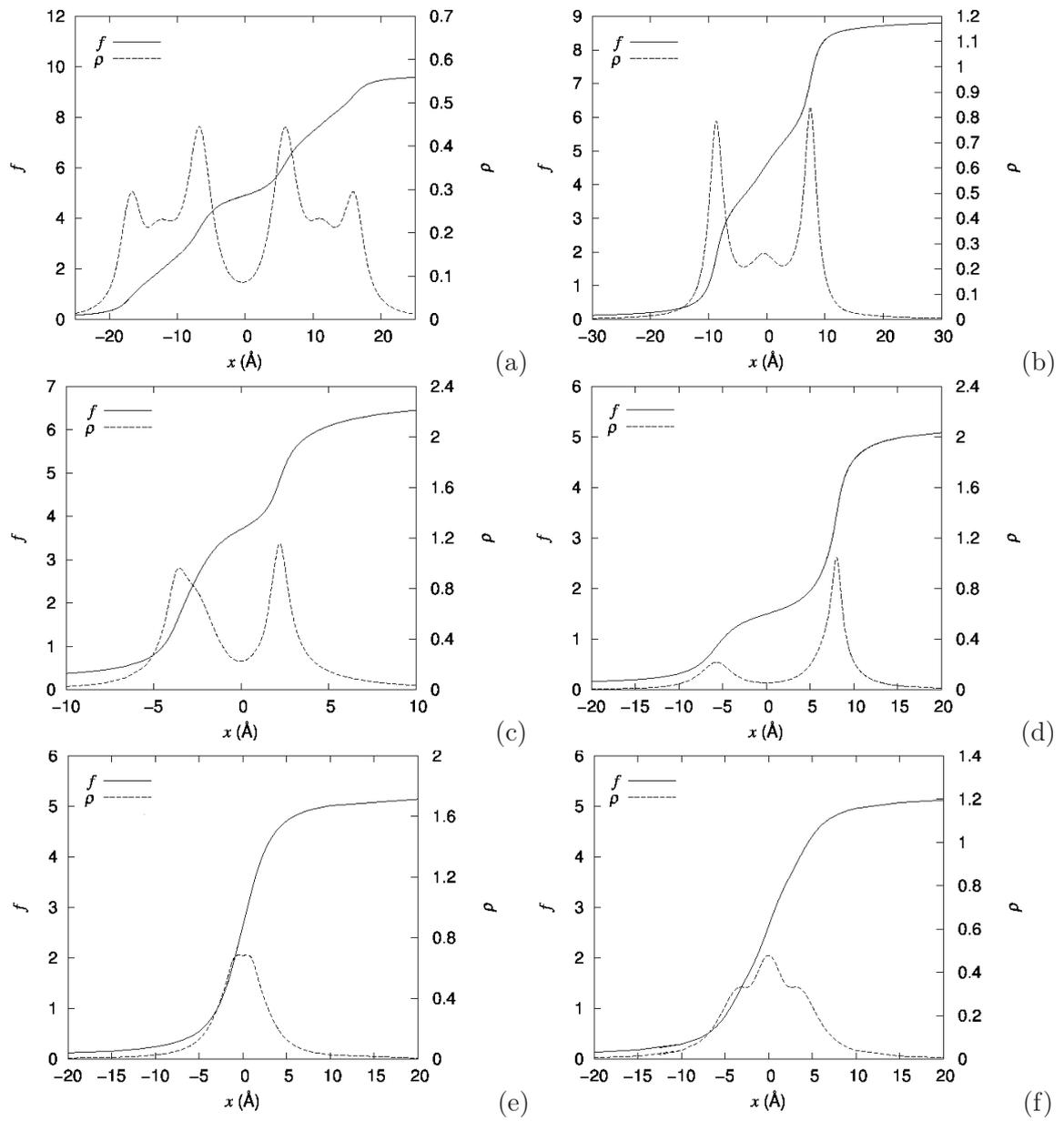


FIG 5.9 – Etalements  $f$  et densité locale de dislocations  $\rho$  des dislocations coin des six systèmes de glissement étudiés à 0GPa. (a)  $:[100](010)$ , (b)  $:[010](100)$ , (c)  $:[1/2][110](110)$ , (d)  $:[001](100)$ , (e)  $:[001](010)$ , (f)  $:[001](110)$ .

	vis		coin	
	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)
[100](010)	5,3 (4,1)	10,0 (8,6)	6,9 (4,9)	13,0 (11,1)
[010](100)	1,4 (1,3)	14,6 (13,2)	1,6 (1,4)	17,4 (14,8)
$1/2[110](110)$	$\zeta_1 = 1,0$ $\zeta_2 = 0,5$ ( $\zeta_1 = 0,7$ ) ( $\zeta_2 = 0,4$ )	3,9  (3,5)	$\zeta_1 = 1,5$ $\zeta_2 = 0,7$ ( $\zeta_1 = 1,4$ ) ( $\zeta_2 = 0,7$ )	5,8  (6,3)
[001](100)	$\zeta_1 = 1,5$ $\zeta_2 = 0,6$ ( $\zeta_1 = 1,6$ ) ( $\zeta_2 = 0,4$ )	8,2  (7,1)	$\zeta_1 = 2,8$ $\zeta_2 = 0,9$ ( $\zeta_1 = 3,0$ ) ( $\zeta_2 = 0,8$ )	13,9  (12,9)
[001](010)	1,5 (0,9)		2,8 (1,7)	
[001](110)	2,7 (1,7)		5,2 (3,2)	

TABLE 5.7 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations dans le diopside à 0 et 10GPa (entre parenthèses) pour les caractères vis et coin des dislocations.  $\zeta$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité locale de dislocation.  $\Delta$  est la distance entre les maximas de densité. Dans le cas où les deux dislocations partielles n'ont pas les mêmes étalements de coeurs, les définitions des dislocations partielles 1 et 2 sont données sur la figure (5.8).

	$\sigma_p$ vis	$\sigma_p$ coin
[100](010)	0,8 (0,2)	1,9 (0,5)
[010](100)	1,0 (4,45)	1,8 (4,8)
1/2[110](110)	14,7 (23,5)	8,6 (19,2)
[001](100)	26,6 (77,6)	7,4 (10,5)
[001](010)	15,9 (29,9)	0,7 (3,6)
[001](110)	3,9 (15,0)	0,6 (3,2)

TAB 5.8 – Résumé des contraintes de Peierls (en GPa) calculées pour le diopside à 0 et 10GPa (entre parenthèses) pour les caractères vis et coin des dislocations.

tableau (5.8)).

Pour le système [010](100), la structure de coeur du caractère vis de la figure (5.8) montrent deux pics distincts bien séparés avec une légère bosse sur le profil de densité locale de dislocations. Cette bosse sur le profil de densité locale est convoluée aux deux autres pics et nous analyserons cette dislocation comme dissociée en deux dislocations partielles colinéaires de vecteur de Burgers  $1/2[010]$ . Ces dislocations partielles sont séparées de 14,6 et 17,4 Å respectivement pour les caractères vis et coin. Les largeurs de coeurs sont plus faibles que pour le système [100](010) et estimées aux alentours de 1,5Å. On note également que le caractère coin contrôle la mobilité de cette dislocation, la contrainte de Peierls du caractère coin vaut 1,8 GPa, à comparer avec la valeur de 1GPa déterminée pour le caractère vis (cf table (5.8)).

Le système  $1/2[110](110)$  se dissocie en deux dislocations partielles colinéaires. La réaction de dissociation est proche de :

$$1/2[110] \rightarrow \frac{1}{4}[110] + \frac{1}{4}[110] \quad (5.2)$$

pour les caractères vis et coin. Les distances entre partielles sont égales à 3,9 et 5,8Å pour les dislocations vis et coin. Les étalements de coeur sont différents pour les deux partielles, une étant

plus étalée quel que soit le caractère de la dislocation (cf table (5.7)). Les contraintes de Peierls sont plus importantes que pour les deux systèmes de glissement présentés précédemment avec la contrainte la plus élevée pour le caractère vis (14,7GPa) (cf table (5.8)).

Les structures de coeur des dislocations  $[001](010)$  et  $[001](110)$  vis et coin ne montrent pas de dissociation. Les étalements de coeurs sont égaux à 1,5 et 2,8Å pour la dislocation  $[001](010)$  et 2,7 et 5,2Å pour la dislocation  $[001](110)$  pour les caractères vis et coin respectivement. Entre ces deux systèmes, les contraintes de Peierls sont plus élevées pour le caractère contrôlant la mobilité des défauts, le caractère vis, pour  $[001](010)$  que pour  $[001](110)$  (cf table (5.8)).

Enfin, la structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  est plus complexe. Cette dislocation a été étudiée dans un premier temps avec un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Cette dislocation se dissocie en deux dislocations partielles colinéaires avec la réaction de dissociation suivante pour tous les caractères :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{3}[001] + \frac{2}{3}[001] \quad (5.3)$$

Les distances entre partielles valent 8,2 et 13,9Å pour les caractères vis et coin. Comme pour le système  $1/2[110](110)$ , les deux dislocations partielles ne présentent pas le même étalement, celui-ci est plus grand pour la dislocation partielle de vecteur de Burgers  $\frac{1}{3}[001]$  (cf tableau(5.7)). Les valeurs de contraintes de Peierls sont les plus élevées, estimées à 26,6 et 7,4GPa pour les caractères vis et coin.

On complète l'étude de la structure de coeur de cette dislocation (caractère vis et coin) avec un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Nous avons réalisé un maillage dans un espace élastique ne contenant qu'un plan de glissement (100). Les étalements de coeur de cette dislocation sont présentés sur la figure (5.10). Le cisaillement de cette dislocation dévie de la direction  $[001]$  : le cisaillement se répartit dans la direction  $[001]$  uniquement pour des valeurs de cisaillement comprises entre 0 et  $\frac{1}{3}[001]$  puis dans les directions  $[001]$  et  $[010]$ . Ces résultats montrent que la dislocation  $[001](100)$  se dissocie selon la réaction suivante :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{3}[001] + \frac{1}{3}[0x1] + \frac{1}{3}[0\bar{x}1] \quad (5.4)$$

où  $x=0,07$  pour une dislocation introduite pure vis et  $x=0,37$  pour une dislocation introduite pure coin.

Structures de coeurs et contraintes de Peierls à 10GPa.

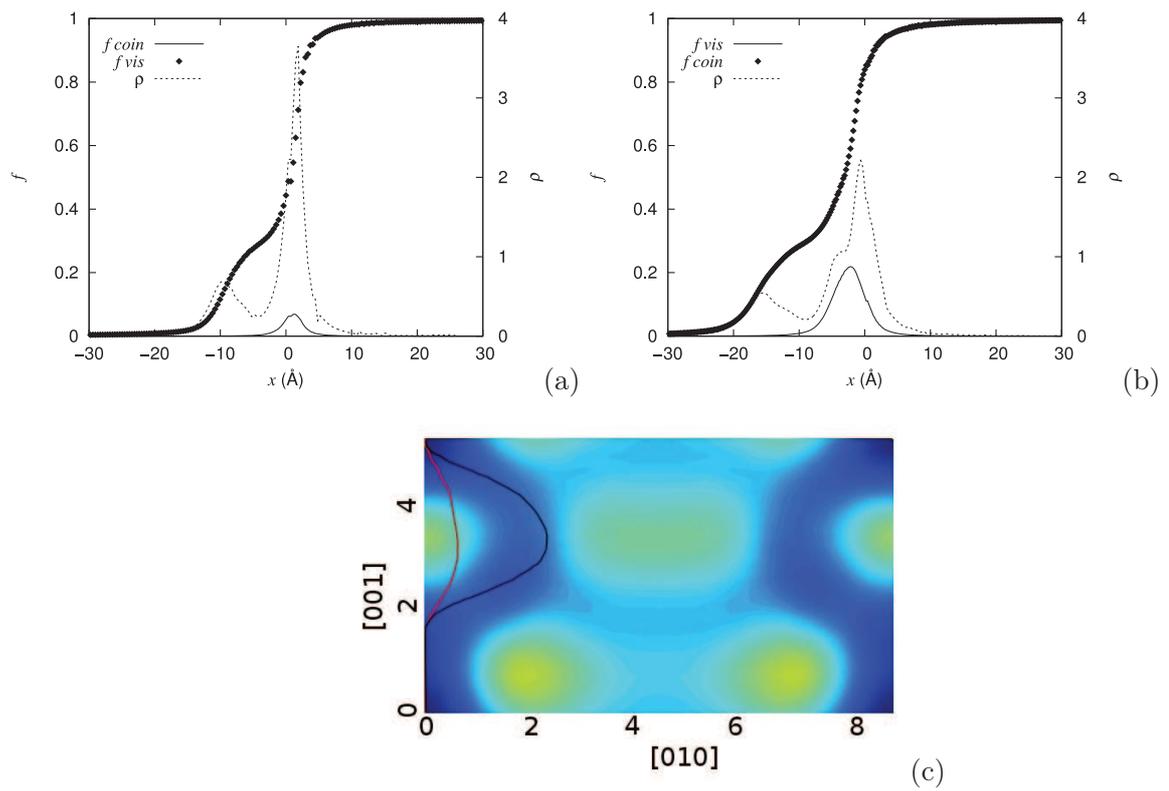
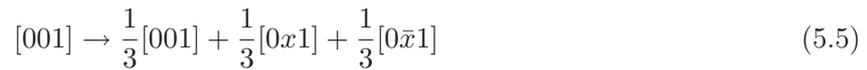


FIG 5.10 – Structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  à 0GPa. Les étalements  $f$  ainsi que les profils de densités locales de dislocation  $\rho$  pour une dislocation introduite pure vis et pure coin sont présentées respectivement en (a) et (b). La figure (c) montre la repartition du cisaillement tracée sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées, en noir et rouge pour les dislocations introduites pure vis et pure coin.

Nous reprenons la même démarche que précédemment pour étudier les structures de coeurs de dislocations à 10GPa. Nous utilisons le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel auquel on incorpore les coefficients  $K$  et les  $\gamma$  – lignes calculés à cette pression pour déterminer la structure de coeur et la contrainte de Peierls des dislocations  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001](100)$  et  $1/2[110](110)$ . La description de la structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  est étendue avec l'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Les profils de densités locales de dislocations des caractères coin déterminées à cette pression avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel sont présentés sur la figure (5.11). On ajoute à cette figure les profils de densités locales de dislocations de ce même caractère coin déterminées à 0GPa pour une comparaison directe des structures de coeurs. Les largeurs de coeurs  $\zeta$  et les distances de séparation entre dislocations partielles à cette pression sont consignés dans le tableau (5.7).

A 10GPa, nous observons les mêmes dissociations des dislocations qu'à 0GPa avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Les distances entre dislocations partielles sont plus faibles, sauf pour le caractère coin de la dislocation  $1/2[110](110)$ . Hormis pour la dislocation partielle  $\frac{1}{3}[001]$  du plan (100), les étalements de coeur sont plus étroits à 10GPa. La structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  a également été déterminée avec un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin à cette pression. Comme à 0GPa, nous avons réalisé un maillage ne contenant qu'un plan de glissement (100). Les résultats sont présentés sur la figure (5.12). La dislocation  $[001](100)$  se dissocie également en trois dislocations partielles à cette pression suivant la réaction :



où  $x=0,07$  pour une dislocation introduite pure vis et  $x=0,42$  pour une dislocation introduite pure coin.

Nous avons calculé les contraintes de Peierls des dislocations associées aux structures de coeur calculé avec le modèle unidimensionnel. Nous avons utilisé les mêmes définitions pour le paramètre  $a'$  qu'à 0GPa (cf. tableau (5.6)). Les valeurs de contraintes de Peierls à 10GPa sont présentées dans le tableau (5.8). Ces valeurs de contraintes sont plus élevées à cette pression, sauf pour la dislocation  $[100](010)$ , où les contraintes de Peierls sont moins importantes qu'à 0GPa. Les caractères limitant la mobilité des dislocations sont les mêmes à 10GPa et à 0GPa :

- Le caractère vis des dislocation  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001](110)$  et  $1/2[110](110)$
- Le caractère coin des dislocations  $[010](100)$  et  $[100](010)$

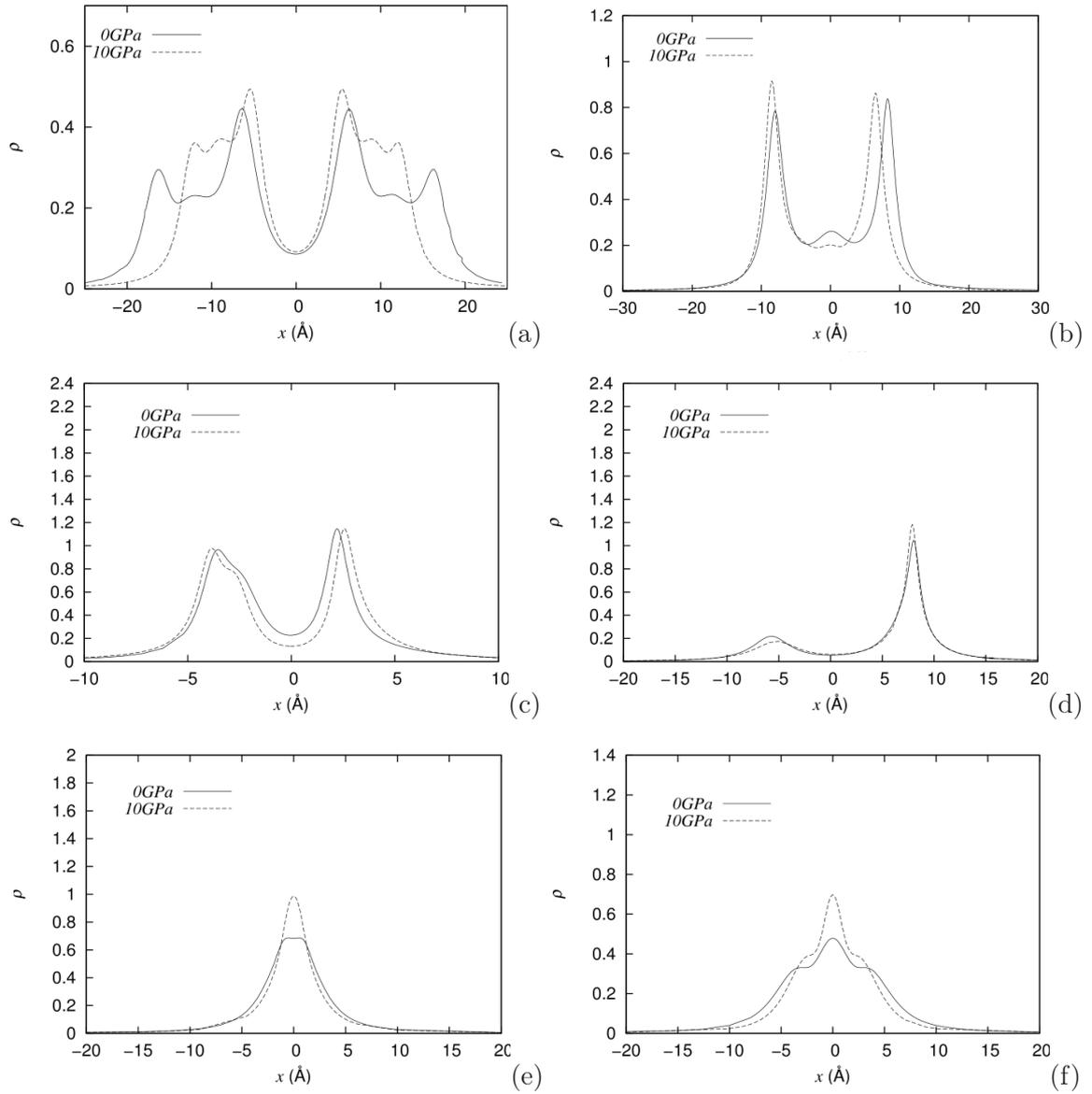


FIG 5.11 – Comparaison entre les profils de densité locale de dislocations  $\rho$  des dislocations coin à 0 et 10 GPa. (a)  $:[100](010)$ , (b)  $:[010](100)$ , (c)  $:[1/2][110](110)$ , (d)  $:[001](100)$ , (e)  $:[001](010)$ , (f)  $:[001](110)$ .

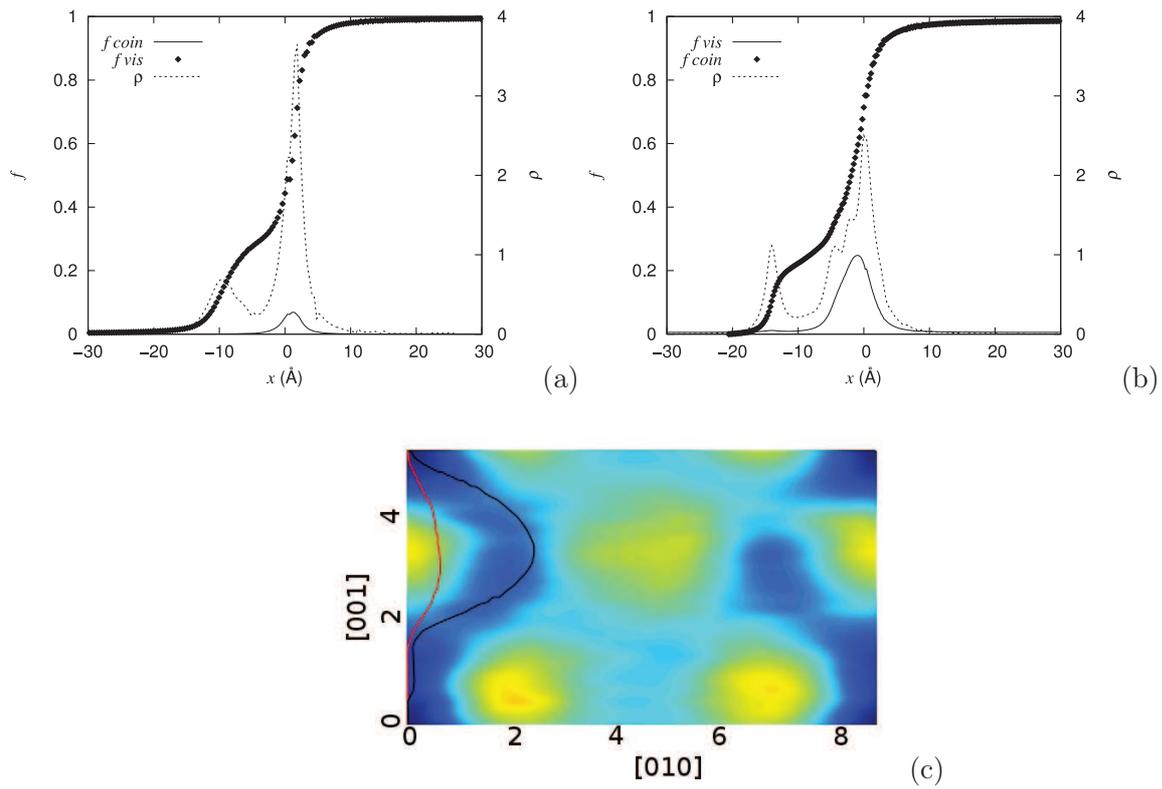


FIG 5.12 – Structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  à 10GPa. Les étalements  $f$  ainsi que les profils de densités locales de dislocation  $\rho$  pour une dislocation introduite pure vis et pure coin sont présentées respectivement en (a) et (b). La figure (c) montre la repartition du cisaillement tracée sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées, en noir et rouge pour les dislocations introduites pure vis et pure coin.

## 5.3 Discussion

Dans cette étude, nous avons déterminé les structures de coeurs et les contraintes de Peierls des systèmes de glissement  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001](110)$  et  $1/2[110](110)$  du diopside à 0 et 10GPa. Ces systèmes de glissement sont ceux caractérisés dans les études de Ingrin *et al.* (1992) et d'Amiguet (2009). Les résultats ont été obtenus en utilisant le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel que nous avons décrit au chapitre 1. L'application d'un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin n'a pas été possible pour tous ces systèmes de glissement. Ceci est lié au code *Cod<sup>2</sup>ex* qui ne sait gérer que des maillages dans une symétrie supérieure à l'orthorhombique. Seule la structure de coeur de la dislocation  $[001](100)$  a pu être déterminée avec *Cod<sup>2</sup>ex* car les vecteurs de base du plan (100), les vecteurs  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ , sont orthogonaux.

On ne s'intéresse ici qu'aux mécanismes de déformation faisant intervenir le mouvement des dislocations. Les expériences de déformation réalisées sur le diopside monocristallin montrent une dépendance importante de la température sur la plasticité de ce minéral. Le maclage mécanique est le mécanisme de déformation prédominant à basse pression-basse température du diopside monocristallin (Lallemant, 1978; Kollé & Blacic, 1983). Le glissement des dislocations devient prépondérant pour des températures supérieures à 800 °C à basse pression. A haute pression, les seules expériences de déformation ont été réalisées à des températures supérieures à 1000 °C : elles montrent que le diopside se déforme par des mécanismes de mouvement des dislocations. Dans la suite de cette discussion, nous parlerons de comportement basse/haute température pour des températures inférieures ou supérieures à 1000 °C.

### 5.3.1 Structures de coeurs et mobilité des dislocations $[100]$ et $[010]$

#### Facilité du glissement des dislocations $[100]$ et $[010]$

Les contraintes de Peierls que nous avons calculé pour les systèmes  $[100](010)$  et  $[010](100)$  sont faibles comparées à celles des systèmes  $[001](hk0)$  et  $1/2[110](110)$  aussi bien à 0 qu'à 10GPa (cf. tableau (5.8), page 165). Ces dislocations  $[100](010)$  et  $[010](100)$  sont dissociées en deux dislocations partielles de structures complexes aux deux pressions considérées. Les contraintes de Peierls sont égales à 0,3 et 1,9GPa pour la dislocation  $[100](010)$  à 0GPa et 0,2 à 0,5 à 10GPa pour les caractères vis et coin. On observe un adoucissement avec la pression pour ce système de glissement. Cet adoucissement est paradoxal car l'énergie de fautes d'empilement du système  $[100](010)$  augmente avec la pression. De plus, la dislocation  $[100](010)$  présente des distances

entre dislocations partielles plus petites à 10GPa, ce qui doit conduire à des contraintes de Peierls plus élevées. Pour comprendre ce paradoxe, il faut rapporter la distance de séparation entre deux dislocations partielles à la périodicité  $a'$  de la vallée de Peierls. L'explication suivante est basée sur les travaux de Schoeck et Püschl sur la mobilité des dislocations dissociées (Schoeck & Püschl, 1994). Prenons l'exemple du caractère vis de cette dislocation  $[100](010)$ . A 0GPa, la distance entre les deux dislocations partielles  $\Delta$  vaut  $10,0\text{\AA}$  et la périodicité  $a'$  est égale à  $2,5\text{\AA}$ . Le rapport  $\Delta/a'$  vaut dans ce cas 4 : les dislocations partielles sont alors en phase, au sommet ou au fond de la vallée de Peierls. Les deux dislocations partielles en fond de vallée franchiront le col en même temps, ce qui entraîne une contrainte de Peierls élevée. A 10GPa,  $\Delta=8,6\text{\AA}$  et  $a'=2,5\text{\AA}$  : le rapport  $\Delta/a'$  vaut 3,4. A cette pression, les dislocations sont quasiment en opposition de phase : lorsqu'une dislocation partielle est située au fond de la vallée de Peierls, l'autre sera située sur le col. Le franchissement du col de la dislocation partielle en fond de vallée sera facilité par la descente du col de l'autre dislocation partielle. La contrainte de Peierls dans ce cas est faible. L'adoucissement du système  $[100](010)$  avec la pression est lié à la géométrie des dislocations partielles dans la vallée de Peierls. Contrairement au système  $[100](010)$ , le système  $[010](100)$  durcit avec la pression pour tous les caractères. Les contraintes de Peierls du caractère vis de la dislocation passent de 1 à 4,5GPa et du caractère coin de 1,8 à 4,8GPa avec l'augmentation de pression.

Les faibles contraintes de Peierls calculées suggéreraient une participation importante des glissements  $[100](010)$  et  $[010](100)$  sur la plasticité du diopside. Or expérimentalement, seul le glissement  $[100](010)$  apparaît à basse pression-basse température dans les expériences de microindentation de Doukhan *et al.* (1986) et de fluage de Ingrin *et al.* (1992). Les systèmes de glissement  $[100](010)$  et  $[010](100)$  n'ont également été activés à haute pression par Amiguet (2009) que sur des monocristaux orientés de tel sorte que le facteur de Schmid de ces systèmes de glissement soit maximal et pour des contraintes élevées.

Cette facilité de glissement des dislocations  $[100]$  et  $[010]$  est associée à une structure de coeur particulière. Le modèle de Peierls-Nabarro ne permet d'étudier les dislocations que dans une configuration de glissement. Nous montrons que les dislocations  $[100](010)$  et  $[010](100)$  peuvent être dissociées colinéairement en glissement. On pourrait envisager d'autres configurations pour la dislocation, non en glissement mais, par exemple, une configuration présentant une dissociation de montée. Cette autre configuration modifierait profondément la mobilité de ces dislocations et pourrait rendre compte de la difficulté à activer ces systèmes de glissement dans les expériences

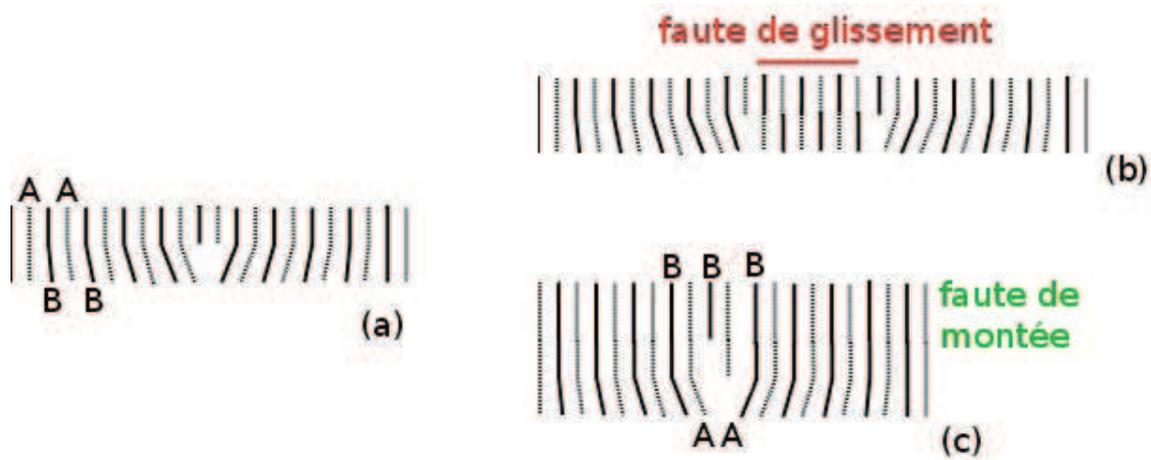


FIG 5.13 – Illustration d’une faute d’empilement séparant deux dislocations partielles séparées en glissement et en montée. (a) Dislocation coin possédant deux demi-plans supplémentaires  $A$  (en pointillés) et  $B$  (en trait plein). (b) Dissociation de cette dislocation en glissement. La faute d’empilement séparant les deux dislocations partielles est contenue dans le plan de glissement. La largeur de cette faute est reperée en rouge. (c) Dissociation en montée de la dislocation présentée en (a). La faute est perpendiculaire au plan de glissement.

de déformation. Ce scénario a été envisagé par Amiguet (2009). Les observations au microscope électronique en transmission des dislocations  $[100]$  et  $[010]$  montrent en effet des structures de coeurs complexes, peut être caractéristiques des phénomènes de montée des dislocations.

#### Dissociation de glissement/dissociation de montée.

La montée est un mécanisme de mobilité des dislocations apparaissant à haute température. Les caractères coin peuvent changer de plans de glissement suivant ce processus lent qui implique le transport de matière par diffusion entre la ligne du défaut et le volume du cristal.

On représente une dislocation coin d’un système polyatomique possédant deux demi-plans supplémentaires sur la figure (5.13-a). Contrairement à la dissociation en glissement, la faute d’empilement séparant deux dislocations partielles dissociées en montée n’est pas contenue dans le plan de glissement de la dislocation (Bretheau *et al.*, 1979). Sur la figure (5.13-b), on représente une dissociation de glissement. Les deux dislocations partielles sont séparés par une faute d’empilement d’énergie  $\gamma_{glissement}$ . Cette faute d’empilement est contenue dans le plan de glissement de la dislocation. Dans le cas d’une dissociation de montée, cette faute d’empilement d’énergie  $\gamma_{montee}$  est perpendiculaire au plan de glissement. La figure (5.13-c) montre une configuration de dissociation de montée. Une faute de montée correspond à une redistribution de matière entre les deux demi-plans de la faute par une diffusion locale conservative. Ce type de faute met en regard des plans de même nature. Dans notre exemple de la figure (5.13-c), la séquence d’empilement

$ABABAB$  devient  $ABAABAB$  avec la présence de la faute de montée.

A partir de considérations élastiques, Mitchell & Heuer (2004) ont montré que la dissociation de montée était plus favorable que la dissociation de glissement si :

$$\gamma_{montee} < e * \gamma_{glissement} \quad (5.6)$$

#### Applications aux dislocations [100] et [010] du diopside.

On étudie, dans un premier temps, la possibilité de dissociation de montée pour les dislocations [100](010). On adopte les notations présentées sur la figure (5.13). Sur la figure (5.14-a), on représente la structure cristalline orientée de façon à étudier la dislocation coin [100](010). On définit les couches atomiques  $A$  et  $B$  qui sont constituées d'une rangée d'alcalino-terreux et d'une rangée d'entités  $Si-O$ . On crée la faute de montée en retirant une couche  $B$  (figure (5.14-b)). On obtient la même structure si on retire une couche  $A$ . En effet, les rangées  $A$  et  $B$  sont identiques à une translation  $[010]/2$  près. Si on cisaille le plan (100) suivant la direction [010] d'une valeur de cisaillement de 50%, on obtient la même structure que la faute de montée (5.14-b'). Ainsi, l'énergie de la faute de montée de la dislocation coin [100](010) est égale à l'énergie de fautes d'empilement du glissement [010](100) à 50%. On peut résumer les différentes énergies mises en jeu en utilisant les énergies de fautes d'empilement calculées. A 0GPa :

- $\gamma_{montee}[100](010) = \gamma_{glissement}[010](100) = 2,0 J.m^{-2}$
- $\gamma_{glissement}[100](010) = 1,6 J.m^{-2}$

A 10GPa :

- $\gamma_{montee}[100](010) = \gamma_{glissement}[010](100) = 2,2 J.m^{-2}$
- $\gamma_{glissement}[100](010) = 2,1 J.m^{-2}$

Avec ces données, la relation (5.6) est vérifiée aux deux pressions considérées. La dissociation de montée de la dislocation coin [100](010) est plus favorable que la dissociation de glissement.

Nous pouvons réaliser la même étude sur la dislocation coin [010](100). Sur la figure (5.15-a), on représente la structure cristalline orientée de façon à étudier la dislocation coin [010](100). On redéfinit les couches atomiques  $A$  et  $B$ . Les limites de ces couches ne coupent pas de liaisons  $Si-O$ . On crée la faute de montée en retirant une couche  $A$  (figure (5.15-b)). Comme précédemment, on obtient la même structure si on retire une couche  $B$  car les rangées  $A$  et  $B$  sont identiques à une translation  $[100]/2$  près. Si on cisaille le plan (010) suivant la direction [100] d'une valeur de cisaillement de 50%, on obtient la même structure que la faute de montée (figure (5.15-b)). L'énergie de la faute de montée de la dislocation coin [010](100) est alors égale à l'énergie de fautes d'empilement du glissement [100](010) à 50%, ce qui donne en terme d'énergie à 0GPa :

$$- \gamma_{montee}[010](100) = \gamma_{glissement}[100](010) = 1,6 J.m^{-2}$$

$$- \gamma_{glissement}[010](100) = 2,0 J.m^{-2}$$

et à 10GPa :

$$- \gamma_{montee}[010](100) = \gamma_{glissement}[100](010) = 2,1 J.m^{-2}$$

$$- \gamma_{glissement}[010](100) = 2,2 J.m^{-2}$$

La relation (5.6) est une nouvelle fois vérifiée à 0 et 10GPa pour cette dislocation : la dissociation de montée de la dislocation coin  $[010](100)$  est également plus favorable que la dissociation en glissement.

Nous montrons ici la possibilité pour les dislocations  $[100](010)$  et  $[010](100)$  d'adopter une configuration de dissociation de montée. Cette configuration semble plus stable d'un point de vue énergétique que la configuration de dissociation de glissement que nous avons établi avec le modèle de Peierls-Nabarro. Ces configurations de dissociation de montée sont une piste d'explication de la difficulté d'activer expérimentalement les glissements  $[100](010)$  et  $[010](100)$ .

### 5.3.2 Glissement des dislocations de vecteur de Burgers $1/2[110]$ ?

Le système de glissement  $1/2\langle 110 \rangle \{110\}$  domine la déformation plastique pour des températures supérieures à  $1000^\circ C$  (Raterron *et al.*, 1994) à basse pression. A haute pression-haute température, Amiguet (2009) a mis en évidence que les glissements  $1/2[110]$  et  $[001]$  ont une activité similaire dans le plan (110).

La détermination des structures de coeurs des dislocations que nous avons réalisé avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel sur les dislocations  $1/2[110](110)$  montre une dissociation de ces dislocations en deux dislocations partielles de vecteurs de Burgers colinéaires proche de la réaction :

$$1/2[110] \rightarrow \frac{1}{4}[110] + \frac{1}{4}[110] \quad (5.7)$$

Cette réaction de dissociation est identique pour la dislocation  $1/2[110](110)$  à 0 et 10GPa. Elle est la conséquence de la forme de la courbe d'énergie de fautes d'empilement en fonction du cisaillement  $f$  (figure (5.7), page 161) qui montre un minimum local pour un cisaillement de  $\frac{11e}{40}$  dans la direction  $[110]$  aux deux pressions considérées. Par contre, on observe une variation de l'étalement de la largeur de coeur et de la distance de séparation entre les dislocations partielles avec le changement de pression (cf. tableau (5.7), page 164). Les contraintes de Peierls que nous

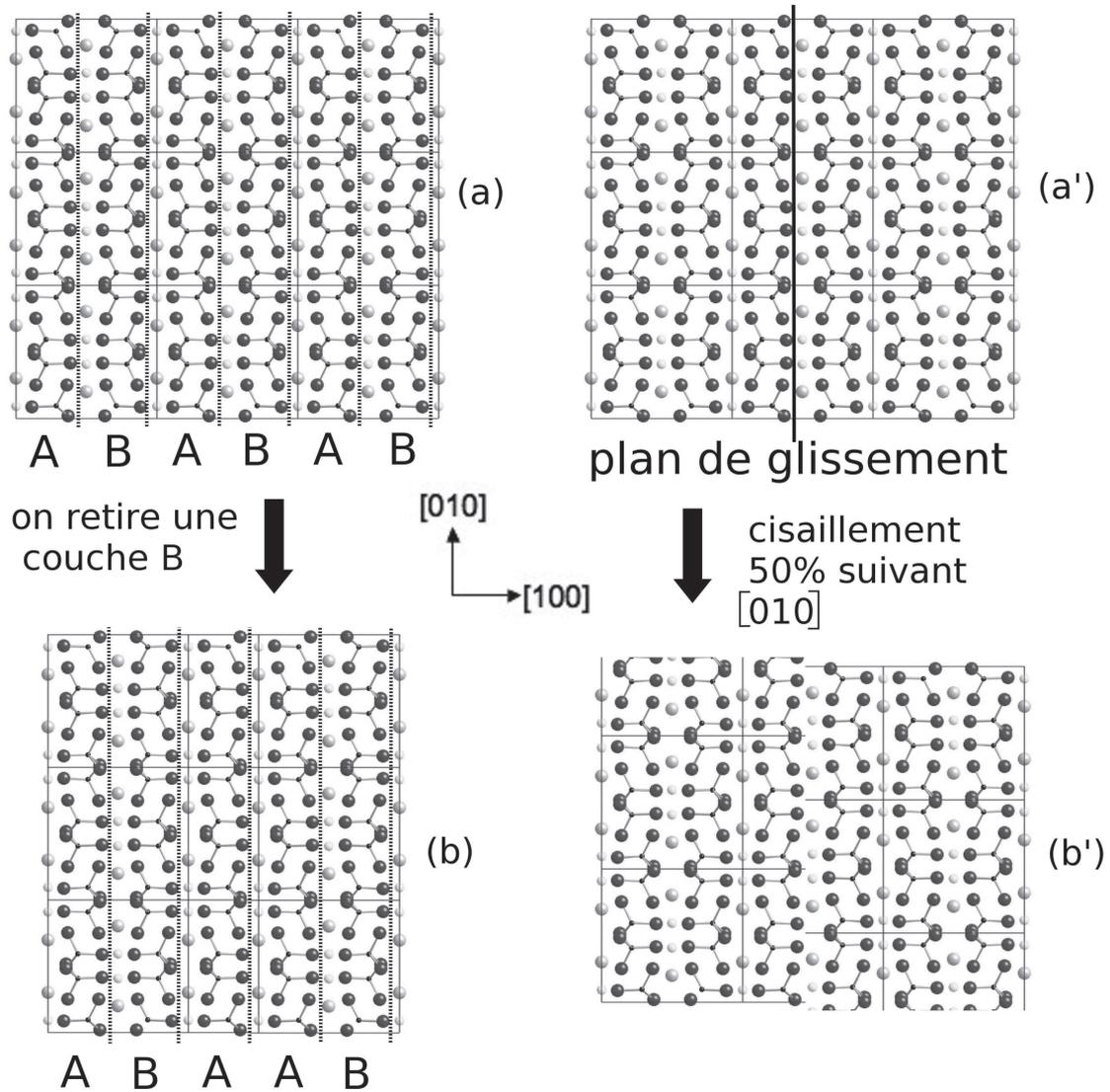


FIG 5.14 – faute de montée  $[100](010)$  et faute de cisaillement  $[010](100)$ . (a) On définit les deux rangées atomiques  $A$  et  $B$  pour se placer dans les conditions de la figure (5.13). (b) On retire une couche  $B$  pour créer la faute de montée  $ABAAB$  (Le même arrangement atomique est obtenu si on retire une couche  $A$ . Dans ce cas la séquence devient  $ABBAB$ .) (a') On reprend la structure du cristal parfait et on dessine le plan de glissement de la dislocation  $[010](100)$ . On cisaille cette structure de 50% suivant  $[010]$ . La structure (b') obtenue est identique à la structure faute de montée (b).

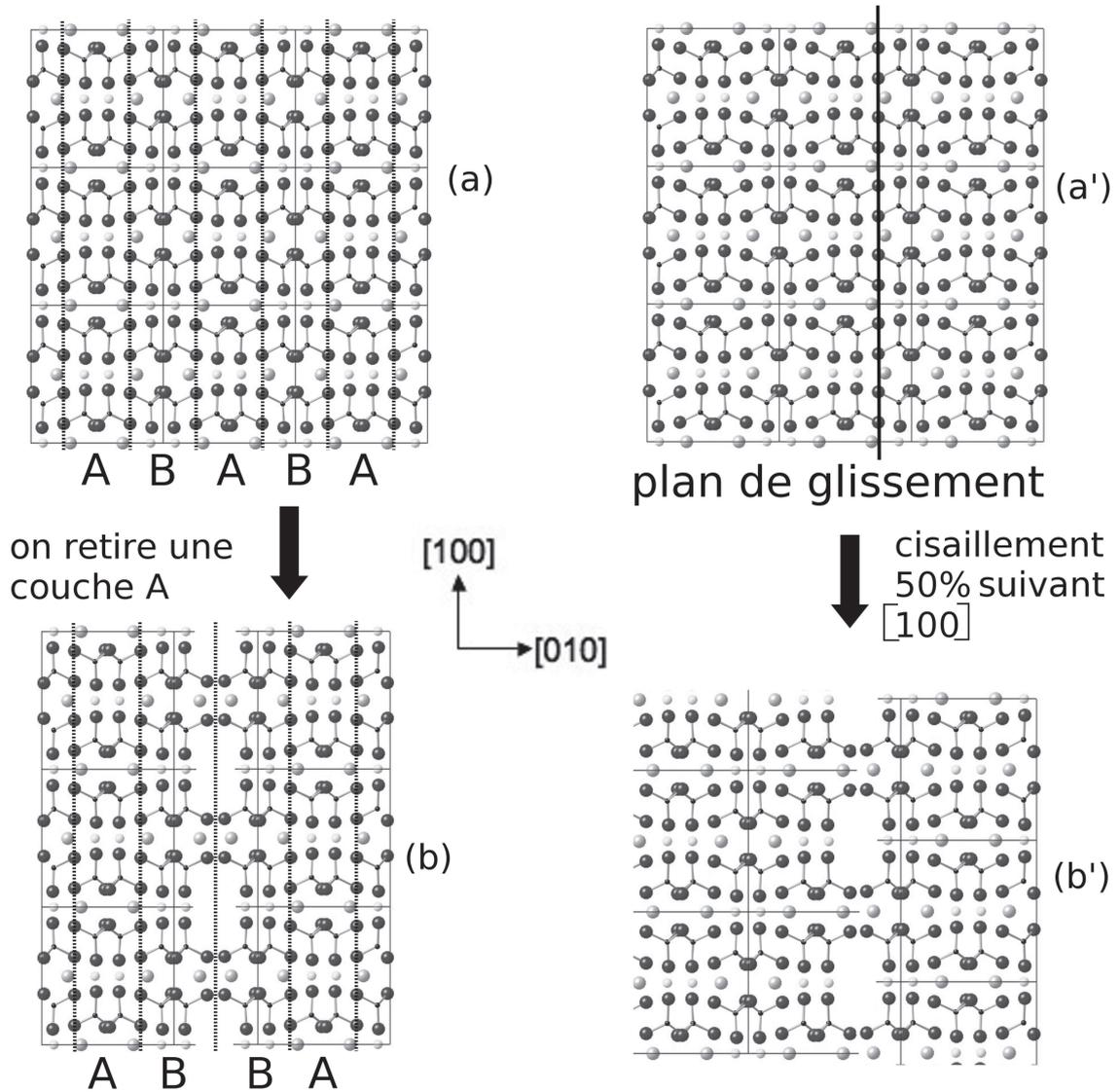


FIG 5.15 – faute de montée  $[010](100)$  et faute de cisaillement  $[100](010)$ . (a) On définit les deux rangées atomiques  $A$  et  $B$  pour se placer dans les conditions de la figure (5.13). (b) On retire une couche  $A$  pour créer la faute de montée  $ABBA$  (Le même arrangement atomique est obtenu si on retire une couche  $B$ . Dans ce cas la séquence devient  $ABAA$ ). (a') On reprend la structure du cristal parfait et on dessine le plan de glissement de la dislocation  $[100](010)$ . On cisaille cette structure de 50% suivant  $[100]$ . La structure (b') obtenue est identique à la structure faute de montée (b).

avons calculées pour cette dislocation montrent un durcissement de ce système de glissement avec la pression. Les contraintes de Peierls valent pour le caractère vis, le caractère de la dislocation présentant la friction de réseau la plus élevée, respectivement 15 et 24GPa (cf. tableau (5.8), page 165).

Les dislocations  $1/2[110](110)$  ont été caractérisées en microscopie électronique. A basse pression-basse température, les observations de Ingrin *et al.* (1992) montrent des caractères coin des dislocations plutôt courbes. A 1000 °C, Raterron & Jaoul (1991) caractérisent des dislocations  $1/2[110](110)$  plus droites dont les lignes sont parallèles à la direction  $[001]$  : le caractère coin. A haute pression-haute température, Amiguet (2009) met en évidence une friction de réseau importante sur les caractères coin de cette dislocation.

A 0 et 10GPa, les résultats que nous avons obtenus montrent que la friction de réseau est plus importante sur le caractère vis que le caractère coin de la dislocation, en opposition avec les observations expérimentales. On pourrait penser à une autre structure de coeur pour la dislocation que celle déterminée avec le modèle de Peierls-Nabarro pour expliquer la différence entre les calculs et l'expérience. Le modèle de Peierls-Nabarro que nous avons utilisé met en évidence une dissociation de la dislocation en configuration glissile. Nous pourrions, ici aussi, imaginer une configuration de dissociation de montée pour cette dislocation. Dans ce cas, le caractère coin de la dislocation présenterait alors une friction de réseau plus élevée que le caractère vis. Les observations de Raterron & Jaoul (1991) mettent en évidence des mécanismes de montée sur cette dislocation. Ceci signifie que la diffusion est active dans le coeur de la dislocation et pourrait permettre d'initier la configuration de dissociation de montée que nous suggérons.

### 5.3.3 Le glissement des dislocations de vecteur de Burgers $[001]$ .

Le glissement des dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  joue un rôle important dans la déformation plastique du diopside. Les systèmes de glissement faisant intervenir le glissement  $[001]$  sont caractérisés aussi bien à basse pression-basse température (Ingrin *et al.*, 1992), basse pression-haute température (Raterron & Jaoul, 1991) et haute pression-haute température (Amiguet, 2009).

L'activation du système  $[001](110)$  apparaît à haute température, aussi bien à basse pression qu'à haute pression. Les dislocations associées à ce système de glissement sont caractérisées lorsque le diopside est déformé à plus de 1000 °C (Raterron & Jaoul, 1991; Amiguet, 2009). Les microstructures révélées par microscopie électronique en transmission ne montrent pas de

dissociation pour la dislocation  $[001](110)$ . Cette structure non-dissociée est reproduite par le calcul de structures de coeurs de dislocations avec le modèle de Peierls-Nabarro. La structure non-dissociée est la conséquence de la forme de la courbe d'énergie de fautes d'empilement généralisées (figure (5.7-f), page 161). L'étalement de cette structure de coeur évolue avec la pression : le coeur devient plus étroit avec l'augmentation de pression. Ceci est la cause du durcissement observé sur ce système de glissement avec la pression (cf. tableau (5.8), page 165). Les contraintes de Peierls calculées pour les systèmes de glissement  $[001](hk0)$  sont les plus basses pour le système  $[001](110)$  à 0 et 10GPa, avec une friction de réseau moins marquée sur le caractère vis.

Les études réalisées par Raterron *et al.* à basse pression montrent un glissement des dislocations  $[001](110)$  dont la mobilité est contrôlée par son caractère vis. Les calculs de  $\sigma_p$  que nous avons effectués montrent une mobilité des dislocations  $[001](110)$  contrôlée par le caractère vis, en accord avec cette étude expérimentale. A haute pression, Amiguet (2009) a mis en évidence que les dislocations  $[001]$  glissaient principalement dans le plan (110) à P=9GPa sans présenter une friction de réseau marquée. Cette constatation expérimentale est reproduite par nos calculs.

L'étude de la dislocation  $[001](100)$  a été réalisé avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel dans les formulations unidimensionnelles et combinées aux éléments diffus de Galerkin. L'utilisation de la formulation unidimensionnelle du modèle conduit à une structure de coeur dissociée en deux dislocations partielles avec des vecteurs de Burgers colinéaires et qui présente une friction de réseau élevée (cf. tableau (5.8), page 165). Cependant, la  $\gamma$  - *surface* du plan (100) (figure 5.6, page 160) montre un chemin de basse énergie que le cisaillement de la dislocation pourrait emprunter. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin permet la description de structure de coeur de dislocation dont le cisaillement dévie de la direction du vecteur de Burgers. La structure de coeur de dislocation a été déterminée avec ce modèle généralisé : on peut décrire le cisaillement de la dislocation  $[001](100)$  avec la réaction suivante, aussi bien à 0 qu'à 10GPa :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{3}[001] + \frac{1}{3}[0x1] + \frac{1}{3}[0\bar{x}1] \quad (5.8)$$

avec  $x=0,07$  et  $0,37$  lorsque la dislocation est introduite pure vis et pure coin à 0GPa et  $x=0,07$  et  $0,42$  lorsque la dislocation est introduite pure vis et pure coin à 10GPa. Le code *Cod<sup>2</sup>ex* utilisé pour la détermination de cette structure de coeur ne nous permet pas de calculer la contrainte de Peierls associée de par la non-gestion des plans non-parallèles au plan de glissement permettant de définir la périodicité  $a'$  des vallées de Peierls. Cependant, nous pouvons avoir une idée de la

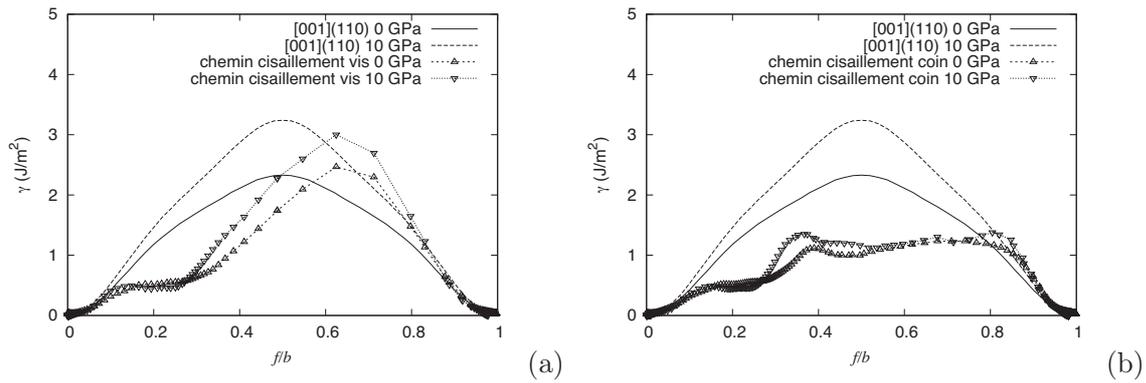


FIG 5.16 – Energies de fautes d’empilement généralisées du système de glissement  $[001](110)$  à 0 et 10GPa comparées à l’énergie de fautes d’empilement généralisées de la dislocation  $[001]$  dissociée dans le plan  $(100)$  lorsque la dislocation est introduite pure vis (a) et pure coin (b).

friction de réseau associée au glissement de cette dislocation. Nous avons comparé l’énergie de fautes d’empilement généralisées associée au chemin de cisaillement emprunté par la dislocation dans le plan  $(100)$  par rapport à l’énergie de fautes d’empilement du système de glissement  $[001](110)$ . Cette comparaison est présentée sur la figure (5.16).

Cette figure montre que l’énergie de fautes d’empilement associée au cisaillement de la dislocation est tout à fait comparable à celle du système  $[001](110)$  aussi bien à 0 et 10GPa pour la dislocation  $[001](100)$  introduite pure vis. Cette figure montre également que l’énergie de fautes d’empilement de la dislocation  $[001](100)$  introduite pure coin est clairement inférieure à l’énergie de faute du système  $[001](110)$ . L’énergie de désaccord de la dislocation  $[001](100)$  introduite pure vis doit être plus importante que pour la dislocation introduite pure coin, ce qui entraîne une mobilité de la dislocation  $[001](100)$  contrôlée par son caractère vis. Les dislocations vis  $[001](110)$  et  $[001](100)$  présentent les mêmes modules élastiques et une énergie de fautes d’empilement similaires : on s’attend à des contraintes de Peierls similaires pour les dislocations vis  $[001](110)$  et  $[001](100)$  à 0 et 10GPa. Dans ce cas, la friction du réseau cristallin du système  $[001](100)$  serait faible et pourrait rendre compte de la facilité de ce système de glissement dans les expériences de déformation réalisées à basse pression-basse température (Ingrin *et al.*, 1992).

Enfin, nous avons étudié le système de glissement  $[001](010)$ . La structure de coeur de la dislocation associé à ce système de glissement que nous avons calculé avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel montre un étalement très étroit du coeur non-dissocié de cette dislocation. Ce coeur non-dissocié est la conséquence de la forme de l’énergie de fautes d’empilement généralisées de ce système de glissement qui présente une simple bosse (figure (5.7-e), page 161). La

surface d'énergie de faute d'empilement du plan (010) (figure (5.6), page 160) ne suggère pas de dissociation avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires pour cette dislocation. Le coeur de cette dislocation est étendu sur  $1,5\text{\AA}$  pour le caractère vis et sur  $2,7\text{\AA}$  pour le caractère coin. Une dislocation avec un coeur peu étendu présente une contrainte de Peierls élevée : pour cette dislocation  $[001](010)$ , les valeurs de  $\sigma_p$  obtenues pour le caractère vis, le caractère qui contrôle la mobilité de cette dislocation, sont égales à 16 et 30 GPa à 0 et 10GPa. Ces contraintes sont bien supérieures à celles déterminées pour la dislocation  $[001](110)$  (cf. tableau (5.8), page 165).

A basse pression-basse température, Ingrin *et al.* (1992) ont mesuré les contraintes critiques projetées des systèmes de glissement  $[001](100)$ ,  $[100](010)$ ,  $1/2[110](110)$  et  $[001](010)$ . Ce dernier système de glissement présentait la contrainte critique la plus élevée, supérieures à 250MPa à comparer à la valeur de contrainte mesurée pour le système  $[001](100)$  égale à 60MPa, le système de glissement le plus facile dans cette étude expérimentale. A haute pression, les observations au microscope électronique à transmission d'Amiguet (2009) ne montrent pas d'évidence du glissement des dislocations  $[001]$  dans le plan (010). La friction de réseau élevée que nous avons déterminée avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel rend compte de ces observations expérimentales à haute et basse pression.

## 5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons déterminé les structures de coeurs des dislocations du diopside à 0 et 10GPa des systèmes de glissement  $[100](010)$ ,  $[010](100)$ ,  $[001](100)$ ,  $[001](010)$ ,  $[001](110)$  et  $1/2[110]$  avec un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Nous avons étendu la description de la dislocation  $[001](100)$  avec un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.

La plasticité du diopside est une problématique complexe. Les systèmes de glissement dominant la déformation changent avec la température. Ce changement des systèmes de glissement dominant pourrait être lié aux structures de coeurs de dislocations particulières du diopside. Le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel que nous avons utilisé ne rend pas compte de toutes les caractéristiques de la déformation du diopside mais permet cependant d'éclairer quelques points sur cette problématique complexe :

- Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers  $[001]$  dans les plans  $(010)$  présente une friction de réseau élevée par rapport au plan  $(110)$ . Dans le plan  $(100)$ , la structure de coeur est dissociée et pourrait présenter une friction de réseau similaire au système  $[001](110)$ . Ces résultats appuient l'idée que le système de glissement  $[001](010)$  est peu actif dans la plasticité du diopside.
- La structure planaire des dislocations  $[100]$  et  $[010]$  correspond à des frictions de réseau faibles, incompatibles avec les expériences de déformation. Nous proposons la possibilité pour les dislocations  $[100]$  et  $[010]$  d'adopter une configuration de dissociation de montée qui diminue fortement leur mobilité. De même, les calculs de contraintes de Peierls sur la dislocation  $1/2[110](110)$  ne reproduisent pas les observations expérimentales sur les microstructures : on suggère également que ces dislocations pourraient se dissocier en montée.
- Les résultats obtenus à 0 et 10GPa conduisent aux mêmes conclusions sur les structures de coeurs et la mobilité des dislocations dans le diopside : la pression a un effet mineur sur le glissement des dislocations dans ce minéral.

## Chapitre 6

# Modèle de Peierls généralisé et dislocations dans $Mg_2SiO_4$ forsterite



---

La rhéologie du manteau supérieur est contrôlée par la déformation de l'olivine ( $Mg_x, Fe_{1-x}$ )<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>. Ce minéral est plus abondant et plus ductile que les autres phases dans cette partie du manteau. L'abondance et la déformation plastique de cette phase ont également des implications sur l'anisotropie sismique observée dans le manteau supérieur (Zhang & Karato, 1995; Mainprice *et al.*, 2000). Les vitesses des ondes sismiques présentent également un gradient important à environ 220km de profondeur. Ce changement des vitesses de propagation des ondes est appelée discontinuité de Lehmann et n'est associé à aucune transformation de phases, contrairement aux variations brutales des vitesses des ondes sismiques observées entre les différentes enveloppes du manteau (Bina, 1991). La présence de cette discontinuité de Lehmann a été attribuée à un changement de mécanisme de déformation de l'olivine avec la profondeur, de la déformation par fluage des dislocations au fluage par diffusion (Karato, 1992).

Beaucoup d'informations sont disponibles sur la plasticité de l'olivine dans les conditions de pression-température du manteau jusqu'à 200km de profondeur à partir de l'observation et de la déformation d'échantillons naturels. Les orientations préférentielles des cristaux développées lors de la déformation font apparaître les glissements de vecteurs de Burgers [100] et [001]. Dans les conditions de basse pression ( $P < 10\text{GPa}$ ), la déformation de l'olivine monocristalline est assurée par le fluage par dislocations de vecteur de Burgers [001] à basse température ( $T < 1000^\circ\text{C}$ ) et [100] à haute température ( $T > 1000^\circ\text{C}$ ) (Karato, 1992; Karato & Wu, 1993; Hirth, 2002). Beaucoup d'interrogations persistent sur la déformation de l'olivine aux conditions de pressions et températures de la base du manteau supérieur. Karato proposa un changement de mécanisme de déformation en fonction de la profondeur pour expliquer les observations sismiques (Karato, 1992; Karato *et al.*, 1993). La déformation de l'olivine dans ces conditions serait assurée par un fluage par diffusion de défauts ponctuels d'après cet auteur.

Les efforts expérimentaux réalisés ces dix dernières années apportent de nouvelles questions sur la déformation de l'olivine. Jung & Karato (2001) montrent une influence de l'eau sur la plasticité de ce minéral. A basse pression- haute température ( $P < 2,5\text{GPa}$ ,  $T \sim 1500\text{K}$ ), les textures de déformation diffèrent entre l'olivine sèche et l'olivine hydratée, passant du système [100](010) aux systèmes [001](010) et [001](100) avec la présence d'eau. D'autres auteurs mettent en évidence un effet de pression sur la plasticité de l'olivine par fluage par dislocations. Le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] contrôlant la déformation plastique à basse pression- haute température changerait pour un glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] avec l'augmentation de pression. Ceci résulte d'observations expérimentales sur polycristaux (Couvry

*et al.*, 2004; Jung *et al.*, 2008) et sur monocristaux (Raterron *et al.*, 2007, 2009). Ce changement de système de glissement avec la pression dans les mécanismes de déformation est compatible avec les observations sismiques (Mainprice *et al.*, 2005). Les orientations préférentielles des cristaux à haute pression conduisent à une anisotropie des vitesses de propagation des ondes de compression et de cisaillement faible, du fait de la dispersion des axes de propagation rapides dans ces textures.

La première tentative d'interprétation d'un point de vue numérique de ce changement de système de glissement avec la pression a été réalisée par Durinck *et al.* (2007). Les structures de coeurs et les contraintes de Peierls des dislocations à 0 et 10GPa ont été déterminées avec un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Cette étude a montré un adoucissement du système  $[001](010)$  avec la pression et un durcissement des systèmes  $[100]\{0kl\}$ . Cependant, le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel est basé sur l'hypothèse que les structures de coeurs des dislocations restent planaires. Carrez *et al.* (2008) ont montré, à partir d'une modélisation directe de structures de coeur de dislocations à l'échelle atomique réalisée par Walker *et al.* (2005b), que la dislocation vis  $[001]$  peut adopter une structure non-planaire à 0GPa, plus stable que l'étalement planaire issu du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Cette structure de coeur tridimensionnelle peut avoir un effet important sur la mobilité de la dislocation vis  $[001]$ . Il apparaît alors nécessaire d'utiliser un modèle de Peierls-Nabarro plus évolué, tel que le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, pour étudier les dislocations planaires et non-planaires dans l'olivine.

Un des avantages de ce modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin est qu'il permet d'appliquer et de combiner différentes composantes du tenseur de contrainte sur les structures de coeur des dislocations. On peut ainsi étudier le comportement des dislocations sous l'action de composantes du tenseur de contraintes glissiles et non-glissiles. Ces composantes du tenseur de contraintes non-glissiles peuvent avoir un effet important sur la mobilité des dislocations non-planaires telles que les dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans les métaux cubiques centrées. Il convient alors de vérifier les effets d'une application de différentes composantes du tenseur de contrainte sur la structure non-planaire de la dislocation vis  $[001]$  de l'olivine.

Dans ce chapitre, nous proposons d'appliquer le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin sur les dislocations  $[100]$  et  $[001]$  de la forsterite, le pôle magnésien de l'olivine. Cette étude sera réalisée à 0GPa dans un premier temps. Nous déterminerons les structures de coeur et les contraintes de Peierls des dislocations vis et coin  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[001](100)$  et  $[001](010)$ . Nous étudierons également la réponse de la dislocation vis  $[001]$  non-planaire à différentes composantes glissiles et non-glissile du tenseur de contraintes. Dans un deuxième temps, nous effectuerons la

même étude sur la dislocation vis [001] mais à 10GPa. Nous calculerons les contraintes de Peierls et analyserons le comportement de la dislocation non-planaire sous l'action de différentes composantes du tenseur de contraintes à cette pression. La comparaison des résultats à 0 et 10GPa nous apportera des informations sur le changement de mécanisme de déformation observé dans l'olivine avec l'augmentation de pression.

## 6.1 Présentation et systèmes de glissement de la forsterite.

La structure cristalline de la forsterite peut être décrite par un empilement quasi hexagonal compact du sous-réseau anionique. L'insertion des cations  $Si^{4+}$  et  $Mg^{2+}$  brise les symétries du réseau hexagonal. Il est alors nécessaire de décrire la forsterite dans une structure orthorhombique de groupe d'espace  $Pbnm$ . Ses paramètres de maille à pression et température ambiante sont  $a = 4,756\text{\AA}$ ,  $b = 10,207\text{\AA}$  et  $c = 5,98\text{\AA}$  (Smyth & Hazen, 1973). La maille cristalline est composée de tétraèdres  $SiO_4$  isolés et de deux types de sites octaédriques  $M_1$  et  $M_2$ . Les octaèdres  $M_1O_6$  partagent deux arêtes communes avec les tétraèdres  $SiO_4$  et quatre avec les octaèdres adjacents tandis que les octaèdres  $M_2O_6$  partagent deux arêtes avec les octaèdres adjacents et une avec les tétraèdres. Des projections de la structure cristalline de la forsterite sont présentées sur la figure (6.1).

Les systèmes de glissement de la forsterite ont été proposés à partir des plus petites translations de réseau et des plans denses de la structure (règle de Chalmers-Martius) (Poirier, 1975). Les plus petites translations du réseau sont les directions [100] ( $4,76\text{\AA}$ ) et [001] ( $5,98\text{\AA}$ ). Le glissement [010] n'a pas été proposé de par son module de vecteur de Burgers important. Les plans denses ont été déterminés à partir de la description de l'olivine dans la structure hexagonale compacte du sous-réseau anionique. La conversion dans la description de la structure  $Pbnm$  conduit aux plans denses suivants : (100), (010), (001), {110}, {011} et {031}.

Contrairement à ses polymorphes de haute pression, la déformation plastique de l'olivine et de la forsterite a été étudiée expérimentalement à maintes reprises à basses pressions (Carter & Ave'Lallemant, 1970; Phakey *et al.*, 1972; Kohlstedt & Goetze, 1974; Kohlstedt *et al.*, 1976, 1980; Durham *et al.*, 1977, 1979; Gueguen & Darot, 1982; Darot & Gueguen, 1981; Mackwell *et al.*, 1985; Bai *et al.*, 1991; Bai & Kohlstedt, 1992), depuis les travaux précurseurs de Raleigh en 1968 (Raleigh, 1968). Le lecteur trouvera dans Durinck (2005) ainsi que dans Cordier (2002) des revues bibliographiques sur la déformation de l'olivine et de son pôle magnésien. A basse pression, les

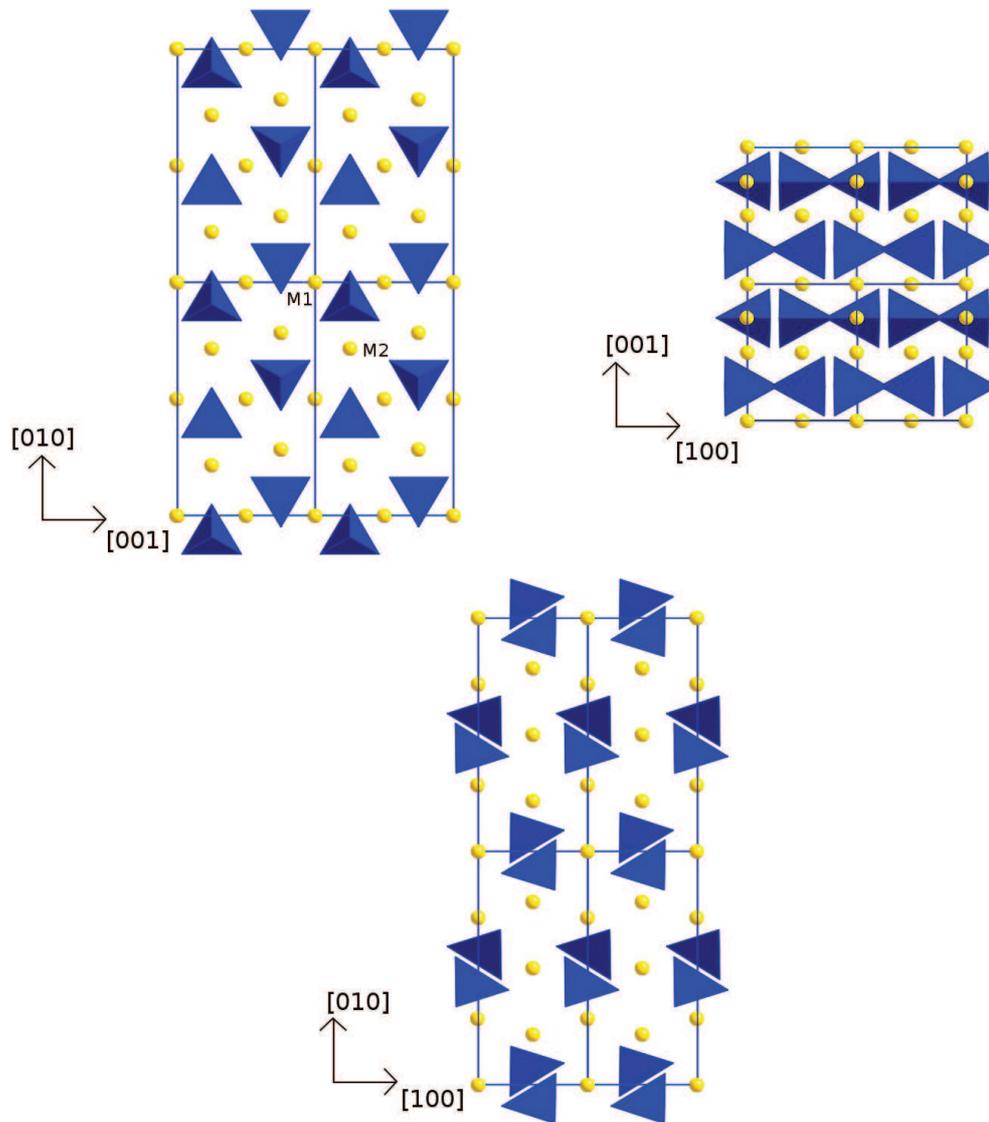


FIG 6.1 – Projections de 2\*2 mailles de la forsterite suivant les directions de réseau  $[100]$ ,  $[010]$  et  $[001]$ . Sur ces projections, les atomes de magnésium sont en jaune. Les sites octaédriques M1 et M2 sont mis en évidence. Nous représentons également les tétraèdres ( $SiO_4$ ) en bleu.

grandes tendances montrent que le glissement suivant [001] dans les plans (010), (100) et {110} est actif à basse température ( $T < 1000^\circ\text{C}$ ) et à forte contrainte. À haute température et à faible contrainte, le glissement [100] devient prépondérant dans les plans (010), (001), {021} et {031}.

Aux conditions de la base du manteau supérieur ( $P=10\text{GPa}$ ,  $T \sim 1300^\circ\text{C}$ ), les résultats expérimentaux suggèrent un changement de système de glissement avec la pression, du glissement [100] vers un glissement [001]. Cette effet a été observé pour la première fois par Couvy *et al.* (2004) sur des polycristaux de forsterite déformés en cisaillement à  $14\text{GPa}$ - $1400^\circ\text{C}$  dans une presse multi-enclumes. Ce résultat a ensuite été confirmé par Raterron *et al.* (2007) sur des monocristaux de forsterite déformés entre 2,1 et 7,5GPa, dans des gammes de température de 1373-1677K dans une machine D-DIA et par Raterron *et al.* (2009) sur des monocristaux d'olivine de San Carlos déformés entre 3,5 et 8,5GPa dans les mêmes gammes de température. Ces deux études réalisées par Raterron *et al.* consistaient à comparer l'activité du glissement [001](010) par rapport au glissement [100](010). Récemment, ce changement de système de glissement avec l'augmentation de pression a été observé sur le développement des textures de déformation des polycristaux d'olivine déformés à basse contrainte par Jung *et al.* (2008) dans une machine de Griggs. Trois mesures de textures sur ces polycristaux d'olivine ont été réalisées à  $1300^\circ\text{C}$  : à 2,5, à 3,1 et à 3,6GPa. La comparaison entre ces expériences de déformation réalisées à différente pression montre un changement d'orientations préférentielles des cristaux, passant du système [100](010) au système [001](010) aux alentours de 3GPa.

Une première explication de ce changement de système de glissement avec la pression d'un point de vue numérique a été proposée par Durinck *et al.* (Durinck *et al.*, 2005b, 2007) sur la forsterite. Les auteurs ont calculé les énergies de fautes d'empilement généralisées *ab initio* des systèmes de glissement [100](010), [100](001), [100]{021}, [001](100), [001](010) et [001]{110} à 0 et 10GPa. Les résultats montrent une augmentation de l'énergie de fautes d'empilement généralisées avec la pression pour tous les systèmes de glissement, sauf pour le système [001](010). Ces énergies de fautes ont été introduites dans un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Les structures de coeurs des dislocations et les contraintes de Peierls des six systèmes de glissement précédents ont été déterminées à 0 et 10GPa avec ce modèle. Il a ainsi été mis en évidence un durcissement des systèmes de glissement [100](0kl), [001](100) et [001](110) avec l'augmentation de pression. Le système [001](010), quant à lui, s'adoucit avec l'augmentation de pression. Cette étude, réalisée dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel, implique des structures de coeurs de dislocations planaires non-dissociées ou dissociées avec des vecteurs de Burgers

colinéaires. Recemment, Carrez *et al.* (2008) ont mis en évidence la possibilité pour la dislocation vis [001] de posséder une structure de coeur non-planaire. Dans cette étude, les auteurs ont calculé avec le potentiel empirique THB1 la structure de coeur et l'énergie de la dislocation vis [001] par modélisation directe de la structure de coeur à l'échelle atomique. L'énergie de la dislocation tridimensionnelle est inférieure à l'énergie de cette même dislocation planaire, étendue dans un plan (010).

## 6.2 Application du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin aux dislocations dans la forsterite

### 6.2.1 Méthode.

Nous proposons d'étudier les dislocations de vecteur de Burgers [100] et [001] de la forsterite à 0GPa. Les caractères vis et coin de ces dislocations seront introduits dans les plans (010) et (001) pour la dislocation [100] et les plans (100) et (010) pour la dislocation [001]. Grâce à la symétrie orthorhombique de la forsterite, les structures de coeurs de ces dislocations pourront être étudiées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Le code *Cod<sup>2</sup>ex* que nous utilisons nécessite l'introduction de plans de glissement pour la dislocation dont les vecteurs de base sont orthogonaux, ce qui est le cas des plans de glissement de la forsterite. Il faut alors mailler l'espace où nous étudions la dislocation. Ces maillages sont construits avec la méthode décrite au chapitre 1. Ils sont présentés sur la figure (6.2).

Les dislocations étudiées en fonction du maillage sont les suivantes :

- Le maillage 1 permet d'étudier la dislocation vis [001] et la dislocation [100](010)-caractère coin.
- Le maillage 2 permet d'étudier la dislocation vis [100] et la dislocation [001](010)-caractère coin.
- Le maillage 3 permet d'étudier la dislocation coin [001](100) et la dislocation [100](001)-caractère coin.

Le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin nécessite l'introduction des paramètres de maille, des constantes élastiques et des surfaces d'énergie de fautes d'empilement généralisées. Nous calculerons ces surfaces pour les plans (100), (010) et (001) car ce sont les plans où nous introduirons les dislocations. L'introduction de ces seuls plans contraint les dislocations vis [100] et [001] à ne pouvoir s'étaler que dans les plans (010) et (001) pour la dislocation vis [100] et dans les

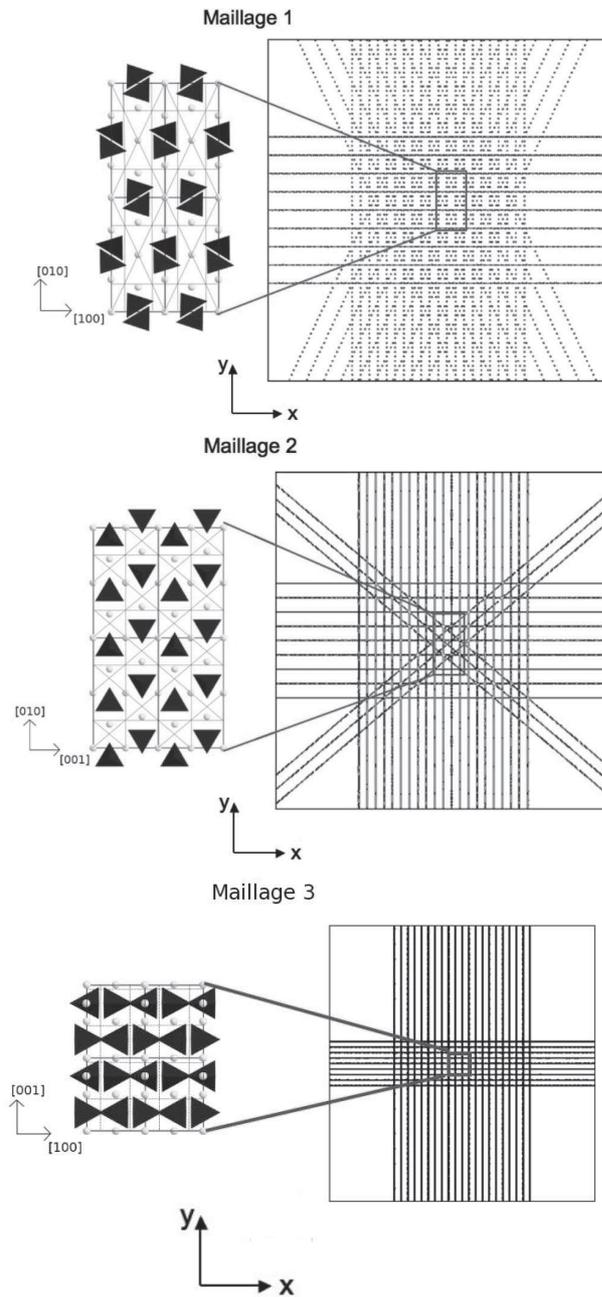


FIG 6.2 – Maillages utilisés pour l'étude des dislocations dans la forsterite avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. On représente à gauche les plans de glissement de la dislocation sur la structure cristalline. Cette géométrie est ensuite reproduite sur le maillage.

plans (100) et (010) pour la dislocation vis [001]. Pour rendre le calcul de ces dislocations vis plus réalistes avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, nous ajoutons les énergies de fautes d'empilement généralisées des plans (021) et (110) respectivement pour la dislocation vis [100] et [001]. Ces plans (021) et (110) sont caractérisés comme des plans de glissement possibles de ces dislocations (Cordier, 2002).

Nous calculerons les paramètres de maille, les constantes élastiques et les énergie de fautes d'empilement généralisées avec le potentiel THB1 décrit au chapitre 2. Outre le temps de calcul réduit par rapport au calcul *ab initio*, le potentiel THB1 a déjà été testé et validé pour l'étude de la structure et de l'élasticité de la forsterite (Price & Parker, 1984). Ce potentiel a également été utilisé pour déterminer les structures de coeurs de dislocations de la forsterite à l'échelle atomique, notamment la structure de la dislocation vis [001] non-planaire (Walker *et al.*, 2005b; Carrez *et al.*, 2008). Nous vérifierons tout de même la réponse au cisaillement plastique rigide de ce potentiel, en comparant les  $\gamma$  - *lignes* des systèmes [100](010), [100](001), [001](100) et [001](010) calculées avec ce potentiel avec des calculs *ab initio*.

Enfin, nous calculerons la contrainte de Peierls des dislocations [100](010), [100](001), [001](100) et [001](010) en appliquant à la cellule de simulation la composante du tenseur de déformation adéquate. Ces composantes du tenseur de déformations appliquées seront définies pour chaque dislocation étudiée.

## 6.2.2 Paramètres de maille et constantes élastiques à 0GPa

Nous calculons les paramètres de maille de la forsterite avec le potentiel THB1 à 0GPa. Les résultats, ainsi qu'une comparaison avec les données existantes, expérimentales et numériques, sont donnés dans le tableau (6.1).

Les paramètres de maille que nous avons calculés avec le potentiel THB1 sont plus élevés que les résultats expérimentaux de Fujino *et al.* (1981) et de Smyth & Hazen (1973) et ceux calculés *ab initio* dans l'approximation *LDA*. Ils sont moins élevés que les calculs *ab initio* réalisés dans l'approximation *GGA*.

Les constantes élastiques de la forsterite ont été déterminées par différents auteurs, aussi bien numériquement (Jochym *et al.*, 2004; Durinck *et al.*, 2005a; Brodholt, 1997; Brodholt *et al.*, 1996; Wentzcovitch & Stixrude, 1997) qu'expérimentalement (Fujino *et al.*, 1981). Nous avons calculés les constantes élastiques de ce minéral avec le potentiel THB1. Les résultats et une compilation des données existantes à 0GPa sont donnés dans le tableau (6.2)

	$a(\text{\AA})$	$b(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$
THB1 (cette étude)	4,7817	10,2456	5,9860
<i>LDA-TM</i> (Wentzcovitch & Stixrude, 1997)	4,682	9,953	5,837
<i>LDA-KB</i> (Brodholt <i>et al.</i> , 1996)	4,643	9,988	6,074
<i>GGA-KB</i> (Brodholt, 1997)	4,71	10,15	5,96
<i>GGA-US</i> (Durinck <i>et al.</i> , 2005a)	4,793	10,281	6,041
<i>GGA-PAW</i> (Jochym <i>et al.</i> , 2004)	4,7995	10,3056	6,0408
<i>exp.</i> (Fujino <i>et al.</i> , 1981)	4,7534	10,1902	5,9783
<i>exp.</i> (Smyth & Hazen, 1973)	4,756	10,207	5,98

TAB 6.1 – Paramètres de maille de la forsterite à 0GPa calculés avec le potentiel THB1. Une comparaison avec des calculs *ab initio* et les données expérimentales est également fournie (Pour les calculs *ab initio*, TM, KB, US et PAW sont respectivement les pseudopotentiels de Trouiller-Martins, de Kleinman-Bylander, UltraSoft et construit avec la méthode PAW).

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$
THB1 (cette étude)	359	207	281	44	75	84	94	96	88
<i>GGA-US</i> (Durinck <i>et al.</i> , 2005a)	301	196	224	66	78	77	61	62	65
<i>LDA-US</i> (Silva <i>et al.</i> , 1997)	367	220	233	78	89	91	78	79	81
<i>exp.</i> (Fujino <i>et al.</i> , 1981)	328	200	235	67	81	81	69	69	73

TAB 6.2 – Constantes élastiques (en GPa) de la forsterite à 0GPa. Une comparaison avec d'autres données, expérimentales et numériques, est également fournie.

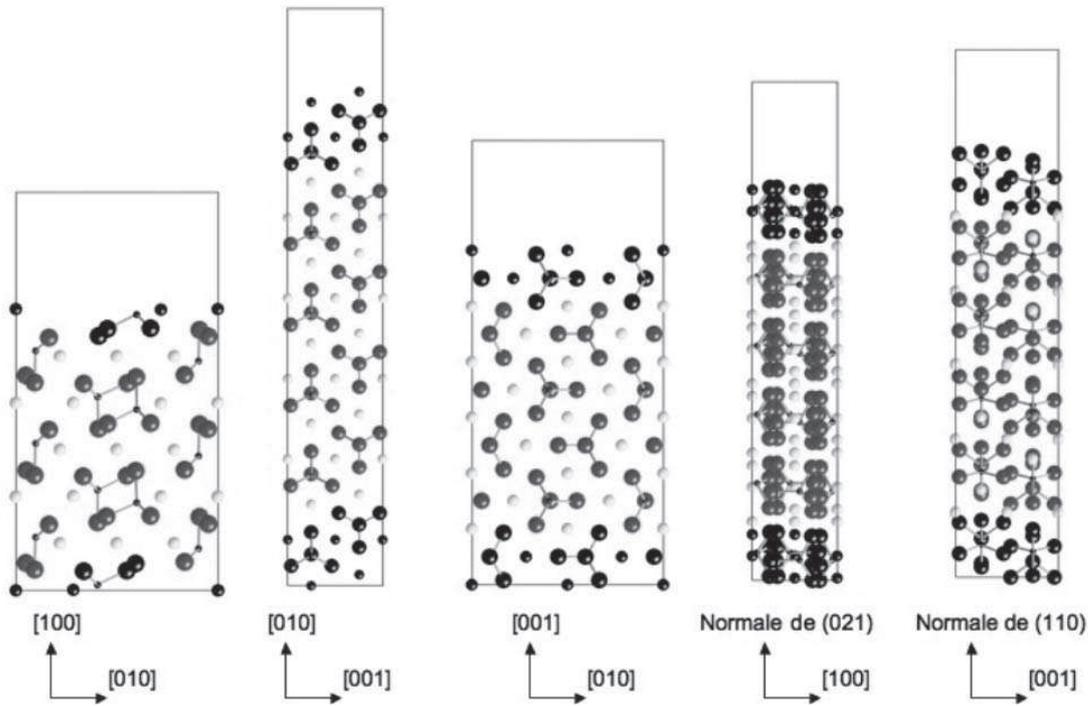


FIG 6.3 – Supercellules utilisées pour le calcul des énergies de fautes d’empilement généralisées dans le cas de la forsterite. Les atomes noirs ne sont pas autorisés à relaxer.

Les constantes élastiques que nous avons déterminées avec le potentiel THB1 sont supérieures aux constantes calculées *ab initio* dans l’approximation GGA et inférieures à celles calculées *ab initio* dans l’approximation LDA. Cette différence provient des approximations GGA et LDA qui sous-estiment et surestiment respectivement les constantes élastiques. Nos résultats sont toutefois dans l’ordre de grandeur des données expérimentales et numériques *ab initio*.

### 6.2.3 Calcul des énergies de fautes d’empilement généralisées

On calcule les surfaces d’énergies de fautes d’empilement généralisées des plans (100), (010), (001), {021} et {110} à 0GPa avec la méthode décrite dans le chapitre 2. Nous utilisons le potentiel THB1 pour calculer cette énergie. Les supercellules utilisées pour ce calcul sont présentées sur la figure (6.3).

À l’origine, le potentiel utilisé a été développé pour reproduire la structure et l’élasticité de la forsterite (Price & Parker, 1984). Comment ce potentiel reproduit-il la réponse du cristal au cisaillement plastique rigide ? Nous vérifions son comportement en comparant les calculs de fautes des systèmes de glissement effectués avec le potentiel THB1 avec des calculs *ab initio*.

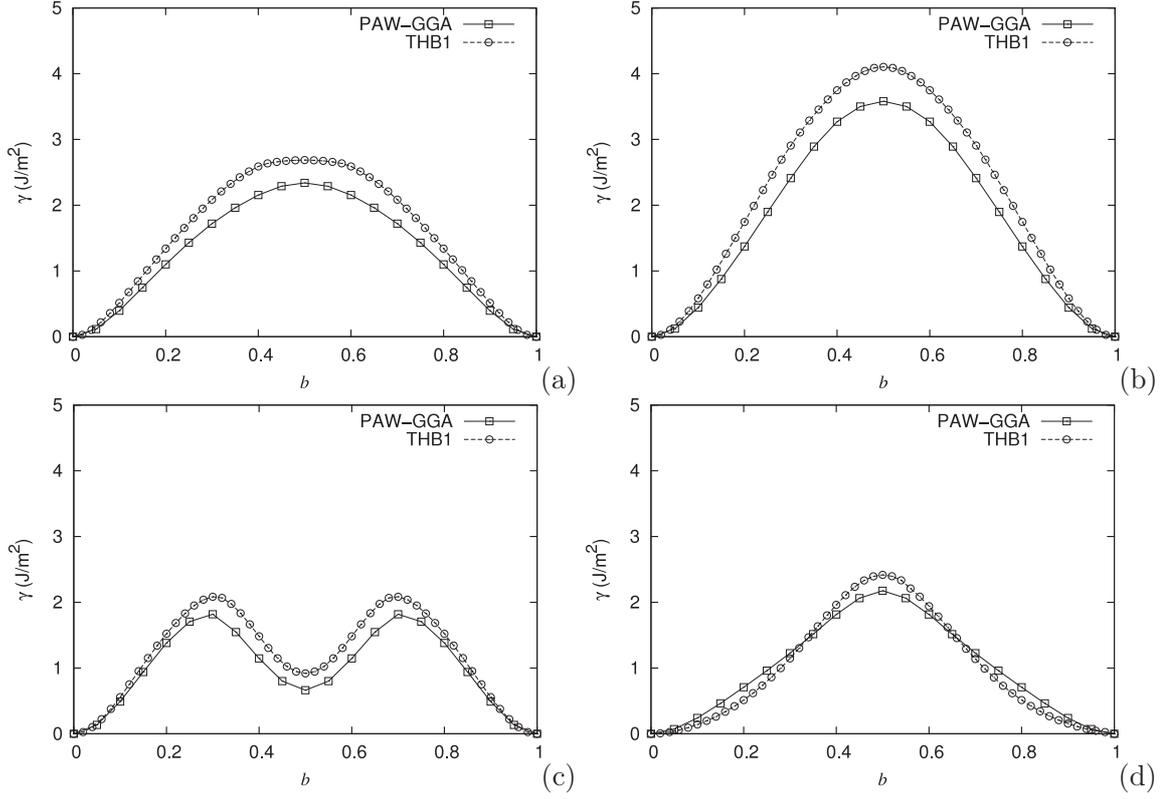


FIG 6.4 – Comparaison entre les énergies de fautes d'empilement généralisées des systèmes  $[100](010)$  (a),  $[100](001)$  (b),  $[001](100)$  (c) et  $[001](010)$  (d) calculés avec le potentiel THB1 et des calculs *ab initio* (Approximation GGA-pseudopotentiel PAW). (courbes non-lissées)

Les comparaisons sont visibles sur la figure (6.4) pour les systèmes de glissement  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[001](100)$  et  $[001](010)$ .

D'après cette figure, la réponse du cristal au cisaillement est identique pour les quatre systèmes de glissement car nous reproduisons les formes des courbes d'énergie. Cependant, l'énergie calculée avec le potentiel THB1 est toujours supérieure aux calculs *ab initio*. On peut quantifier cet effet en comparant les maximums de ces énergies pour les quatre systèmes de glissement étudiés. Les comparaisons entre ces énergies calculées avec le potentiel THB1 et *ab initio* ainsi que la différence relative entre ces deux calculs sont donnés dans le tableau (6.3). La différence d'énergie entre les calculs *ab initio* et avec le potentiel THB1 est comprise entre 9 et 17%. L'utilisation du potentiel THB1 entrainera des structures de coeurs plus étroites et des contraintes de Peierls supérieures par rapport à l'utilisation de données *ab initio*

Les résultats des calculs des surfaces d'énergie de fautes avec le potentiel THB1 sont présentés sur la figure (6.5). Le cisaillement dans la direction  $[010]$  du plan (100) est limité à 15%.

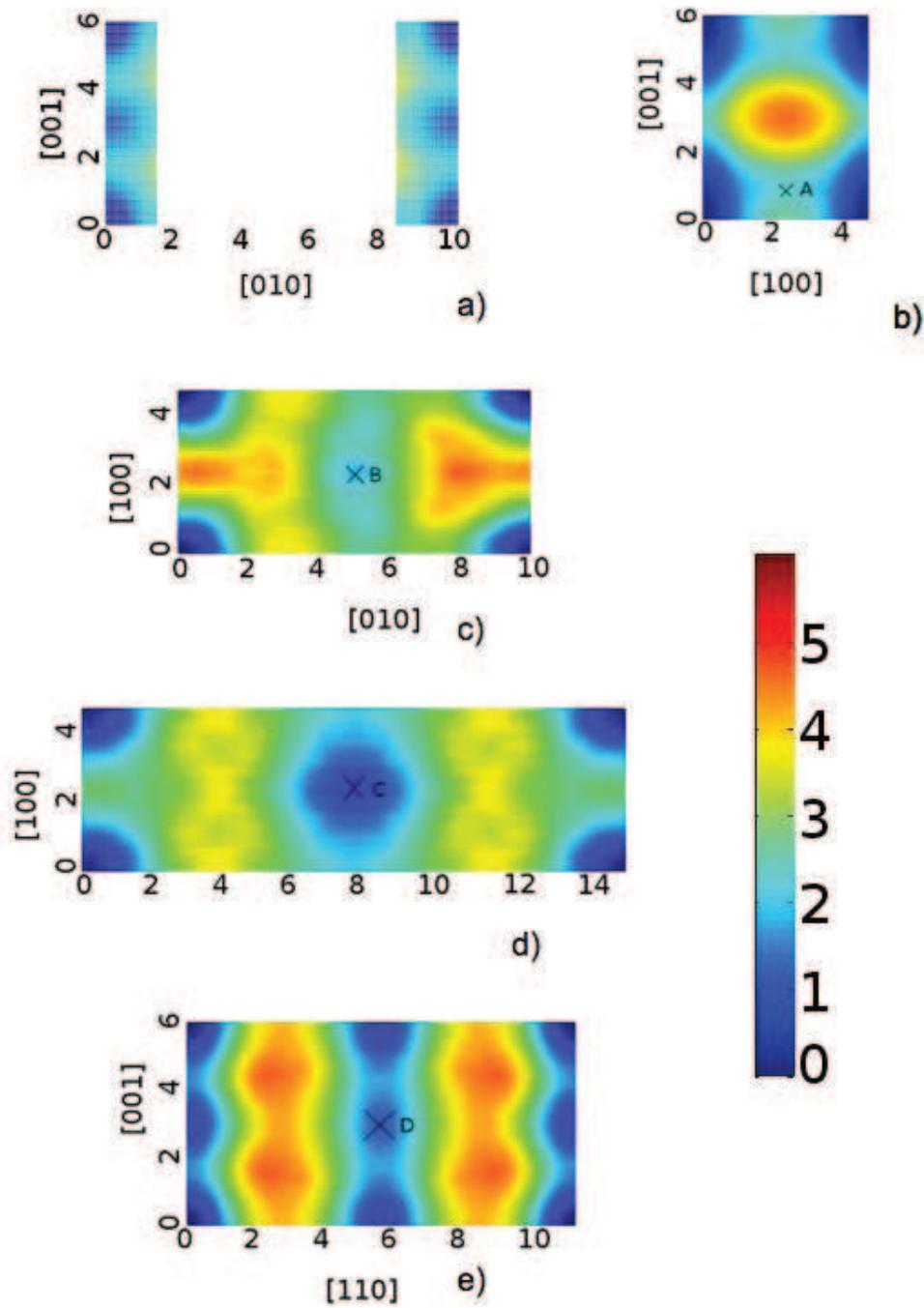


FIG 6.5 – Energies de fautes d'empilement généralisées des plans (100) (a), (010) (b), (001) (c), {021} (d) et {110} (e) calculées à 0GPa avec le potentiel THB1. Les niveaux de couleurs représentent l'intensité de l'énergie de fautes. (courbes lissées)

syst. gliss.	$\gamma_{THB1}^{max}$	$\gamma_{PAW-GGA}^{max}$	$100 * \frac{\gamma_{THB1}^{max} - \gamma_{PAW-GGA}^{max}}{\gamma_{PAW-GGA}^{max}}$
[100](010)	2,7	2,3	17
[100](001)	4,1	3,6	14
[001](010)	2,4	2,2	9
[001](100)	2,1	1,8	17

TABLE 6.3 – Maximums des énergies de fautes d'empilement généralisées (en  $J.m^{-2}$ ) des systèmes de glissement [100]{0kl} et [001]{hk0} calculées avec le potentiel THB1 et *ab initio* à 0GPa. On reporte également la différence d'énergie relative entre ces deux calculs.

plan de glissement	position	repérage
(010)	$\frac{1}{2}[100] + \frac{1}{6}[001]$	A
(001)	$\frac{1}{2}[100] + \frac{1}{2}[010]$	B
(021)	$\frac{1}{2}[100] + \frac{1}{2}[021]$	C
(110)	$\frac{1}{2}[001] + \frac{1}{2}[110]$	D

TABLE 6.4 – Positions des fautes d'empilement dans les plans de glissement de la forsterite hors des directions [100] et [001].

Les atomes d'oxygène de part et d'autre du plan de glissement se rapprochent et entraînent la divergence de l'énergie. Ces surfaces de fautes d'empilement montrent également des fautes stables situées dans les plans (010), (001), (021) et (110) hors des directions [100] et [001]. Les positions de ces fautes sont données dans le tableau (6.4) et représentées sur les surfaces d'énergie de fautes d'empilement de la figure (6.5). Suivant les directions des vecteurs de Burgers [100] et [001], les  $\gamma$ -*lignes* de la figure (6.4) montrent un minimum local à 50% de cisaillement pour les systèmes [001](100) et [001](110). Les systèmes [100](010), [100](001) et [001](010) présentent un maximum situé à 50% de cisaillement le long du vecteur de Burgers. Les niveaux d'énergie maximums sont compris entre  $2,1 J.m^{-2}$  pour le système [001](100) et  $4,1 J.m^{-2}$  pour le système [100](001). L'énergie de fautes d'empilement stable vaut  $0,9 J.m^{-2}$  pour le système [001](100).

### 6.2.4 Application du modèle de Peierls généralisé

Dans cette partie, nous decrivons les résultats obtenus sur les dislocations vis et coin  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[001](010)$  et  $[001](100)$ . Les largeurs de coeurs, les distances entre dislocations partielles lorsque les dislocations sont dissociées et les contraintes de Peierls sont résumées dans le tableau (6.5)

	vis			coin		
	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_p$ (MPa)	$\zeta$ (Å)	$\Delta$ (Å)	$\sigma_p$ (MPa)
$[100](001)$	3D	3D	$2000 \pm 100$	0,9		$190 \pm 10$
$[100](010)$	0,7		820	3,0		$290 \pm 20$
$[001](100)$	3D	3D	centre 1 : $3600 \pm 150$ centre 2 : $4500 \pm 150$	0,8	10,5	$140 \pm 20$
$[001](010)$	1,5		$520 \pm 20$	2,5		$260 \pm 20$

TAB 6.5 – Résumé des calculs des propriétés de coeur des dislocations de la forsterite à 0GPa déterminées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.  $\zeta$  est la demi-largeur à mi-hauteur de la densité de dislocation.  $\Delta$  est la distance de séparation entre dislocations partielles le cas échéant et  $\sigma_p$  est la contrainte de Peierls.

### Dislocations de vecteur de Burgers [100]

Nous avons étudié les dislocations de vecteur de Burgers [100] introduites dans les plans (010) et (001). Les centres où les dislocations sont introduites dans la structure cristalline sont repérés sur la figure (6.6). Le centre de la dislocation vis est à l'intersection des plans (010), (001) et d'un plan (021). La dislocation coin [100](001) est placée à l'intersection des plans (100) et (001). Enfin, le centre de la dislocation coin [100](010) est au croisement des plans (100), (010) et d'un plan ( $\bar{1}10$ ). Les étalements de coeur, les distances entre dislocations partielles et les contraintes de Peierls de ces dislocations sont résumés dans le tableau (6.5).

#### Système [100](001)

Les profils de densités de dislocation  $\rho$  de la figure (6.7) montrent que la dislocation [100] introduite dans le plan (001) est non-dissociée pour les deux caractères vis et coin. Le caractère vis, introduit à l'intersection des plans (010) et (001) et d'un plan (021) s'étale dans les plans (010) et (001) uniquement. Nous utilisons la terminologie utilisée par Duesbery *et al.* (1973) pour décrire cette dislocation non-planaire. On utilise le terme de *dislocations fractionnaires* pour identifier des dislocations reliées à des fautes d'empilement instables en opposition à *dislocations partielles* qui sont séparées par une faute d'empilement stable.

Le coeur de la dislocation se décompose en quatre dislocations fractionnaires, deux dans le plan (010) et deux dans le plan (001). Nous ne connaissons pas le module du vecteur de Burgers pour ces dislocations fractionnaires.

On applique une contrainte  $\sigma_{zx}$  (figure (6.6-a)) par déformation de la cellule de simulation pour faire glisser cette dislocation dans le plan (001).

Lorsque la contrainte de Peierls est atteinte, on observe une fermeture des dislocations fractionnaires dans le plan (010) et un déplacement libre de la dislocation dans le plan (001) instantanément. (le mécanisme n'est pas représenté).

Pour le caractère coin, la largeur de coeur à mi-hauteur du caractère coin vaut  $0,9\text{\AA}$ . La contrainte de Peierls de cette dislocation est déterminée par une déformation critique  $\epsilon_{xy}$  de la cellule de simulation (figure (6.6-b)) et est égale à 190MPa (cf tableau (6.5)).

#### Système [100](010)

La dislocation [100](010) est planaire pour les caractères vis et coin. Les profils de densités de dislocation  $\rho$  de la figure (6.8) montrent un seul pic : la dislocation apparaît non-dissociée et est étalée sur  $0,7\text{\AA}$  et  $3\text{\AA}$  respectivement pour la dislocation introduite pure vis et pure coin. Cependant, le cisaillement dévie de la direction [100] aussi bien lorsque la dislocation est

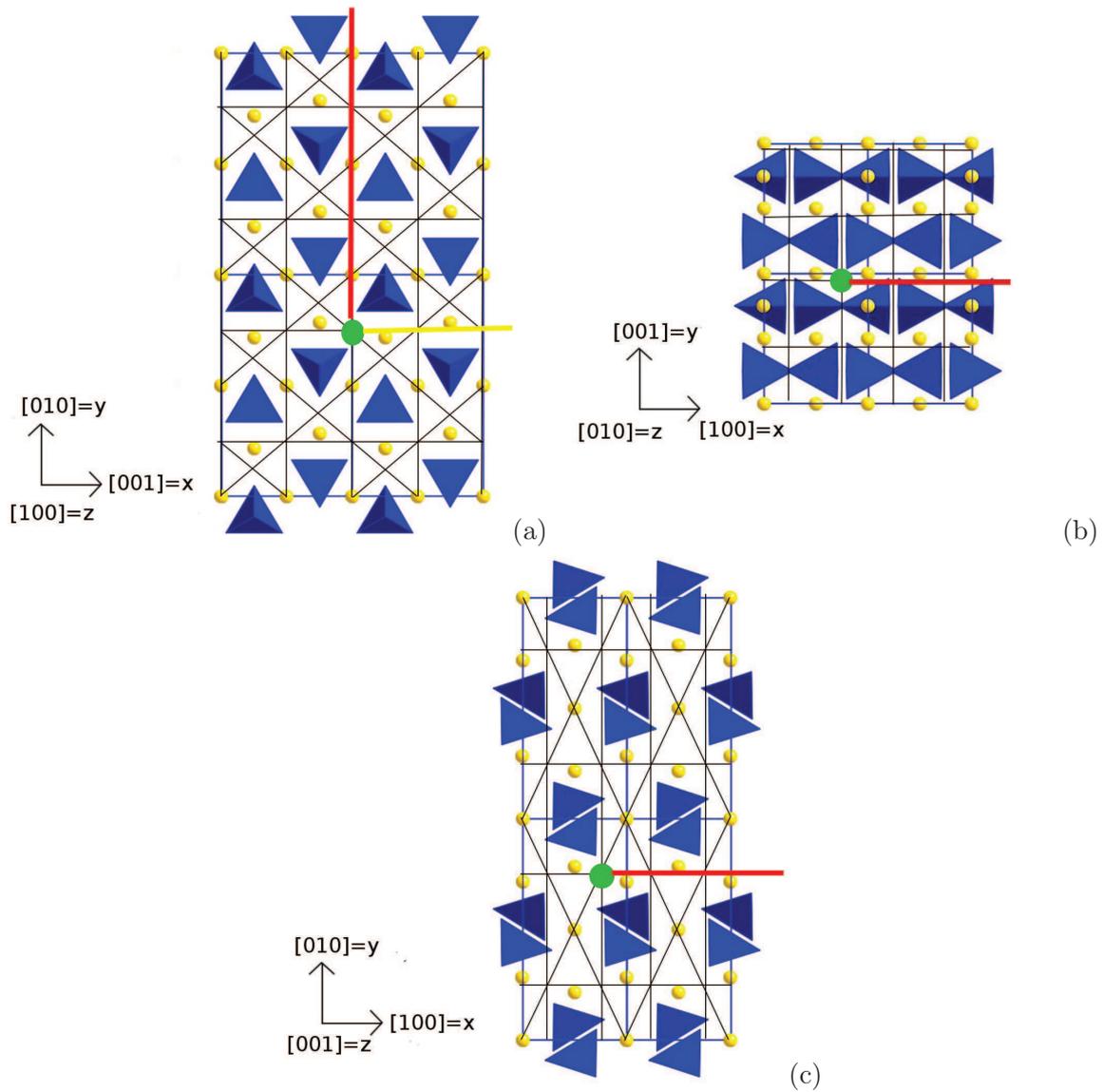


FIG 6.6 – Positions des centres de dislocation de vecteur de Burgers  $[100]$  sur la structure cristalline (point vert). (a) : vis  $[100]$  introduite dans les plans  $(010)$  (en jaune) et  $(001)$  (en rouge). (b) dislocation coin  $[100]$  introduite dans le plan  $(001)$  (en rouge). (c) : dislocation coin  $[100]$  introduite dans le plan  $(010)$  (en rouge)

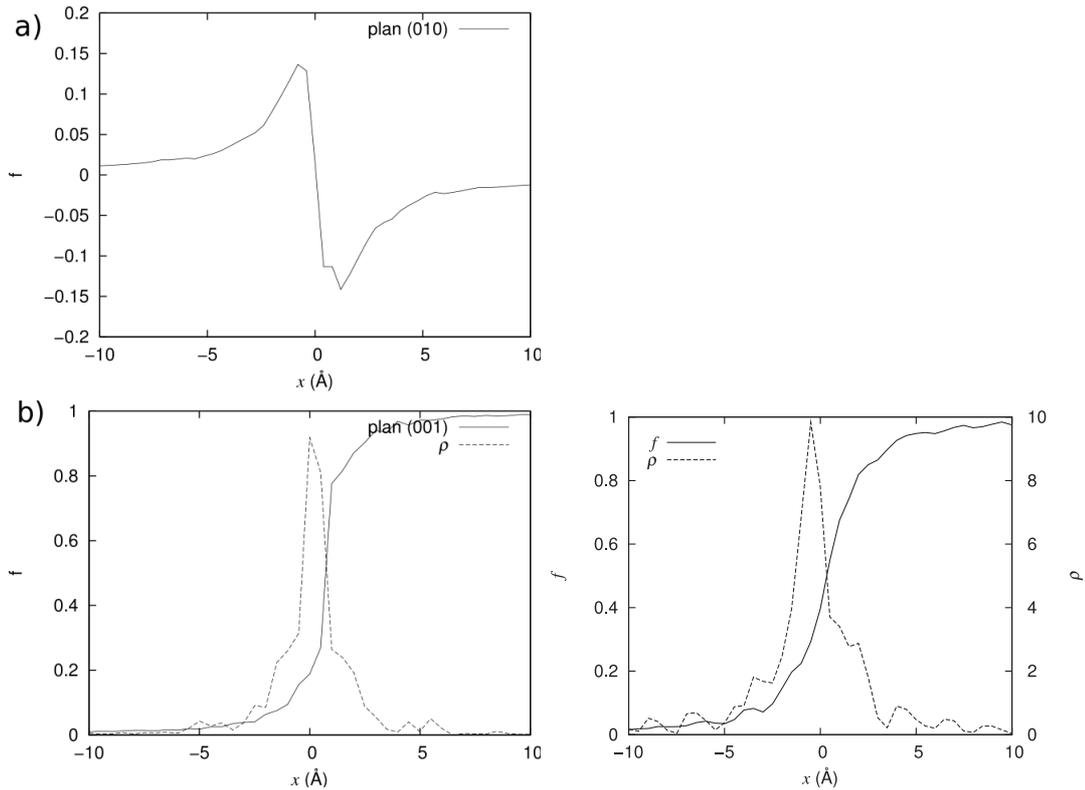


FIG 6.7 – Etalement  $f$  (trait plein) et densité de dislocation  $\rho$  (trait pointillé) de la dislocation  $[100](001)$  vis (à gauche) et coin (à droite) de la forsterite à 0GPa. Le caractère vis de cette dislocation introduite dans le plan (001) s'étale dans les plans (010) et (001). On représente alors les fonctions de cisaillement  $f$  dans les plans (010) (a) et (001) (b) pour cette dislocation. On trace également la densité de dislocation  $\rho$  dans le plan (001) (b). La dislocation coin ne s'étale que dans son plan de glissement, nous n'observons pas de composante de cisaillement dans le plan (010).

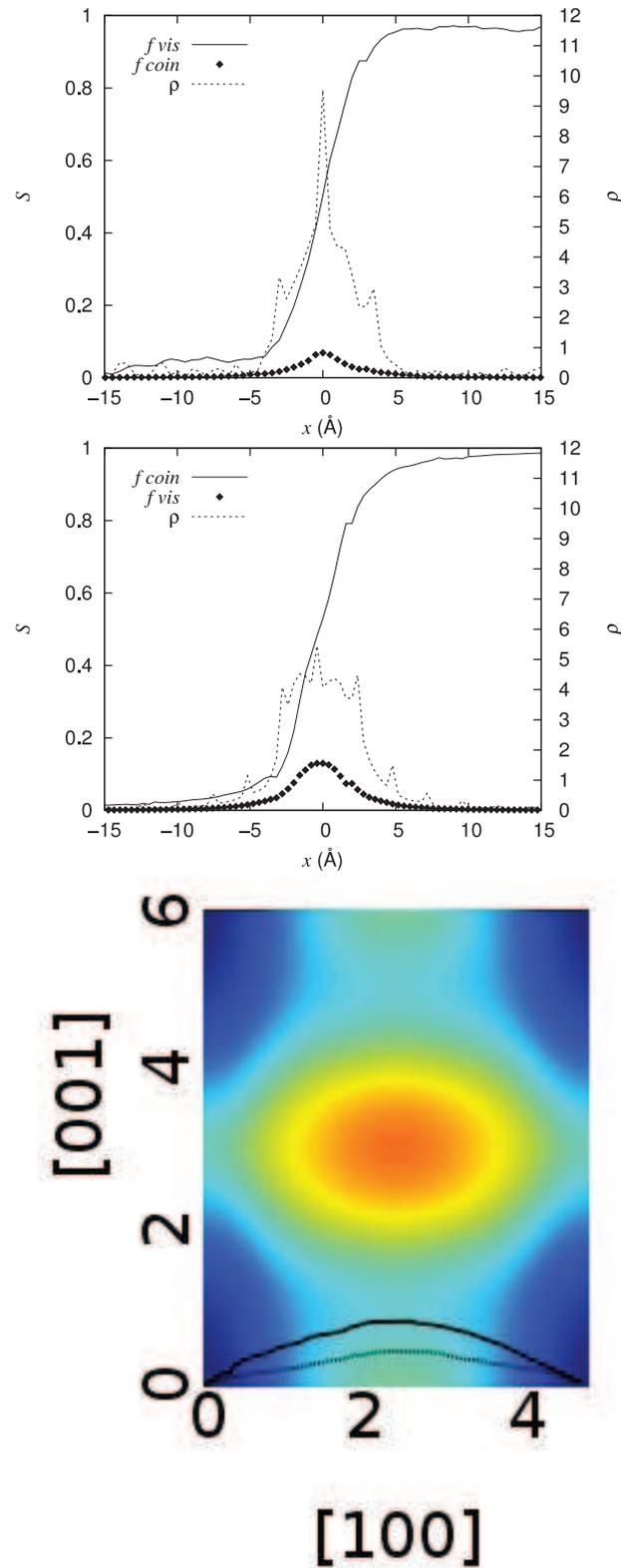


FIG 6.8 – Etalement  $f$  et densité de dislocation  $\rho$  de la dislocation  $[100](010)$  caractère vis (à gauche) et coin (à droite) à 0GPa de la forsterite. On représente également les fonctions de cisaillement  $f$  sur la surface d'énergie de faute d'empilement pour les dislocations introduites pure vis (en pointillés) et pure coin (trait plein).

introduite vis ou coin. On peut décrire la répartition du cisaillement dans le plan (010) avec la réaction suivante :

$$[100] \rightarrow \left[\frac{1}{2}0x\right] + \left[\frac{1}{2}0\bar{x}\right] \quad (6.1)$$

où  $x = 0,07$  lorsque la dislocation est introduite pure vis et  $x = 0,13$  lorsque la dislocation est introduite pure coin. On applique les composantes  $\sigma_{yz}$  et  $\sigma_{xy}$  (figure (6.6-a et c)) pour faire glisser respectivement les dislocations introduites pure vis et pure coin dans le plan (010). Les contraintes de Peierls sont égales à 820MPa et 290MPa pour ces mêmes caractères. On vérifie également que la valeur de  $x$  de la réaction (6.1) ne varie pas sous l'action d'une contrainte externe et lors du déplacement de la dislocation (non représenté).

### Dislocations de vecteur de Burgers [001]

Nous avons étudié les dislocations de vecteur de Burgers [001] introduites dans les plans (010) et (100). Les centres des dislocations sur la structure cristalline sont repérés sur la figure (6.9). Le centre de la dislocation vis est à l'intersection des plans (010), (100) et d'un plan ( $\bar{1}10$ ). La dislocation coin [001](100) est posée à l'intersection des plans (100) et (001). Enfin, le centre de la dislocation coin [001](010) est au croisement des plans (100), (010) et d'un plan (021). Les étirements de coeur, les distances entre dislocations partielles et les contraintes de Peierls de ces dislocations de vecteur de Burgers [001] sont résumés dans le tableau (6.5).

#### Systeme [001](010)

Dans le plan (010), la dislocation [001] est non-dissociée et planaire pour ses caractères vis et coin. Les fonctions de cisaillement  $f$  et les densités de vecteur de Burgers  $\rho$  sont présentées sur la figure (6.10). Les demi-largeurs de coeur  $\zeta$  sont évaluées à  $1,5\text{\AA}$  et  $2,5\text{\AA}$  pour les caractères vis et coin et les contraintes de Peierls sont égales à 520MPa et 260MPa pour ces mêmes caractères. Ces contraintes de Peierls ont été déterminées en effectuant des déformations  $\epsilon_{zy}$  et  $\epsilon_{xy}$  de la cellule de simulation (figure (6.9-a et c)) pour les caractères vis et coin respectivement

#### Systeme [001](100)

Le caractère coin de cette dislocation est dissociée en deux partielles colinéaires de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2}[001]$  séparés de  $10,5\text{\AA}$  (figure (6.11)). Les largeurs de coeurs des dislocations partielles sont données dans le tableau (6.5). La contrainte nécessaire pour déplacer cette dislocation, qui est calculée en appliquant une contrainte  $\sigma_{xy}$  (figure (6.9-b)), est basse et égale à 140MPa.

Nous posons le centre de la dislocation vis à l'intersection des plans (100), (010) et d'un plan (110) (figure (6.9-a)). Nous appellerons ce centre *centre 1*, ce centre est repéré sur la structure cristalline de la figure (6.12).

La relaxation de la dislocation posée en ce centre conduit à une structure de coeur étalée dans les plans (100) et (010). Cette structure de coeur est non-dissociée et est représentée sur la figure (6.13-a).

Nous essayons de déplacer cette dislocation dans le plan (010) et dans le plan (100). Nous appliquons la déformation  $\epsilon_{yz}$  pour déplacer cette dislocation dans le plan (010) et  $\epsilon_{zx}$  pour la déplacer dans le plan (100) (figure (6.9-a)). La déformation  $\epsilon_{yz}$  ne conduit pas au mouvement de la dislocation dans le plan (010) : la cellule de simulation n'accommode pas la déformation et casse avant le départ de la dislocation.

L'application de la déformation  $\epsilon_{zx}$  déplace la dislocation dans le plan (100) en deux temps,

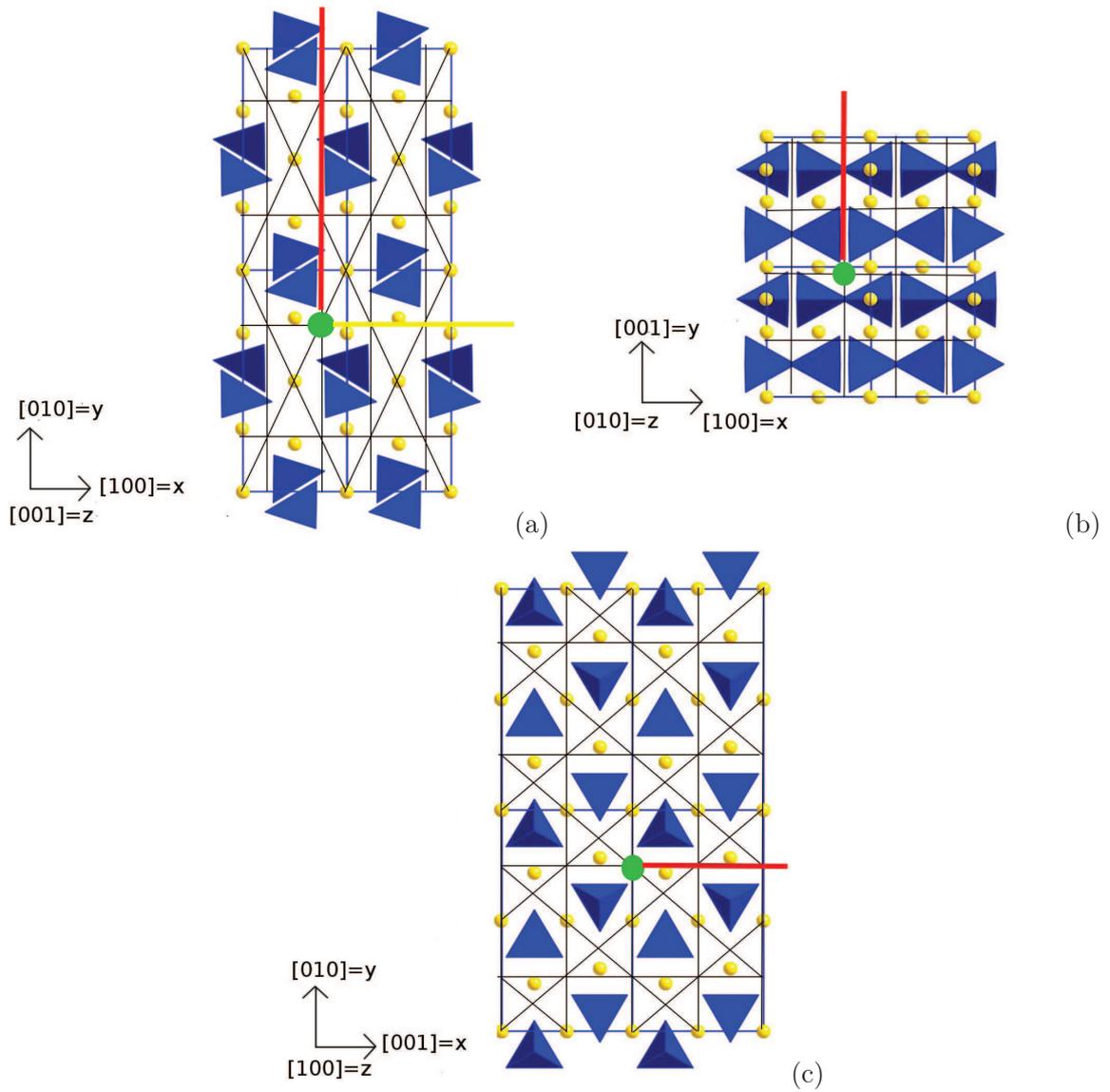


FIG 6.9 – Positions des centres de dislocation de vecteur de Burgers  $[001]$  sur la structure cristalline. (a) : vis  $[001]$  introduite dans les plans  $(010)$  et  $(100)$ . (b) dislocation coin  $[001](100)$ . (c) : dislocation coin  $[001](010)$

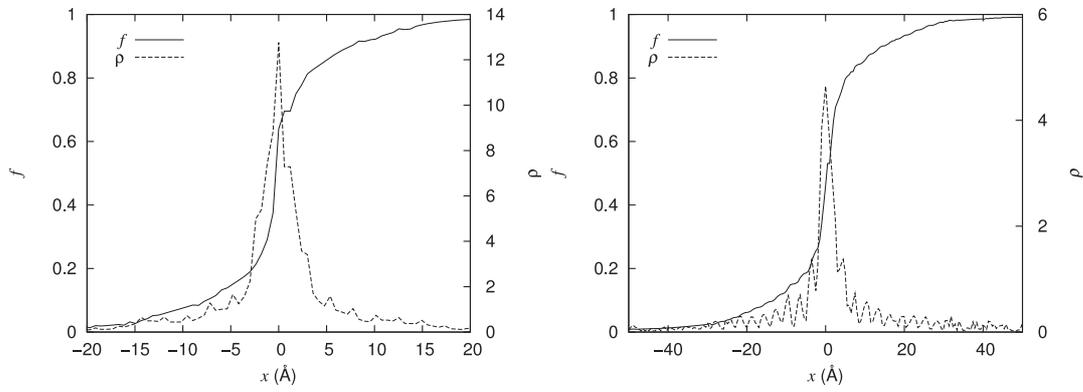


FIG 6.10 – Etalement  $f$  et densité de dislocation  $\rho$  de la dislocation  $[001](010)$  caractère vis (à gauche) et coin (à droite) à 0GPa de la forsterite.

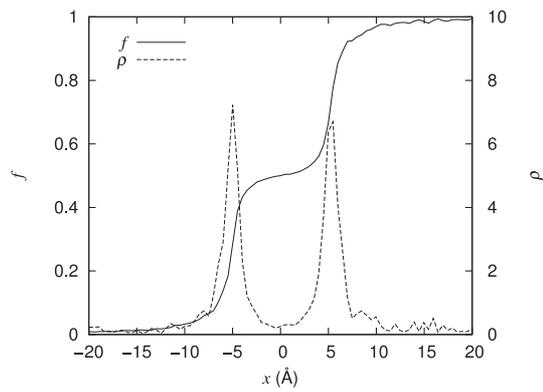


FIG 6.11 – Etalement  $f$  et densité de dislocation  $\rho$  de la dislocation  $[001](100)$ -caractère coin à 0GPa de la forsterite.

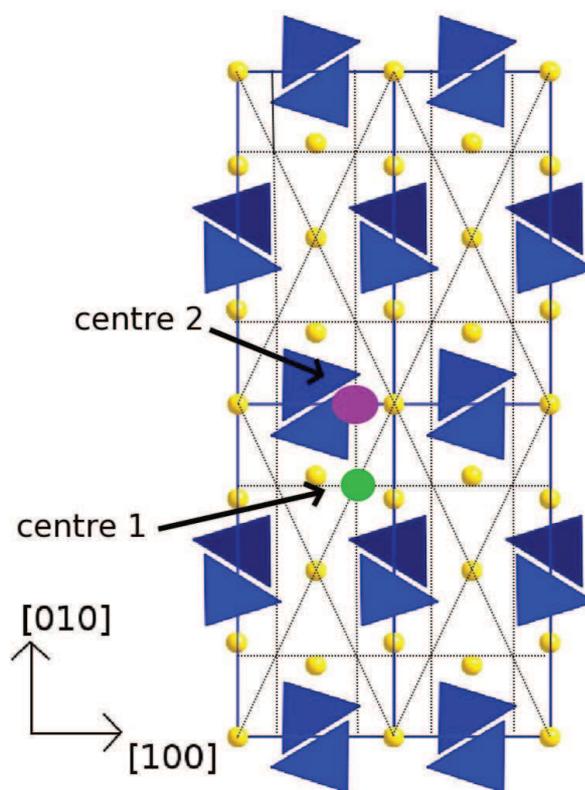


FIG 6.12 – Position du *centre 1* et du *centre 2* de la dislocation vis  $[001](100)$  sur la structure cristalline.

ce mécanisme est illustré sur la figure (6.13) :

- On observe dans un premier temps un réarrangement du coeur de la dislocation sous l'effet d'une contrainte projetée dans le plan (100) égale à 2,05GPa. Dans le plan (100), le centre de la dislocation s'est déplacé entre deux plans (010). Nous appellerons ce centre le *centre 2* qui est représenté sur la structure cristalline de la figure (6.12). La dislocation se retrouve dissociée en deux dislocations partielles  $1/2[001]$  séparées de  $5,1\text{\AA}$  dans le plan (100) (figure (6.13-b)). L'étalement de la dislocation dans le plan (010)-niveau 1 est modifié.
- L'application d'une contrainte projetée dans le plan (100) égale à 3,6GPa permet la fermeture des dislocations fractionnaires du plan (010) et permet le déplacement de la dislocation dissociée en deux dislocations partielles  $1/2[001]$  dans ce plan (figure (6.13-c)).

Le code *Cod<sup>2</sup>ex* ne permet pas d'obtenir la structure du défaut de plus basse énergie. L'application d'une contrainte sur la dislocation précédente a montré que le centre du défaut se déplace sous l'action d'une contrainte externe inférieure à la contrainte de Peierls. Nous plaçons alors le centre de la dislocation sur cette nouvelle position, le *centre 2* (figure (6.12)) qui se situe sur un plan (100), au milieu de deux plans (010). La structure de coeur relaxée est donnée sur la figure (6.14-a). Nous obtenons une structure de coeur symétrique par rapport au centre de la dislocation. La dislocation est étalée dans un plan (100) et deux plans (010). Nous observons deux dislocations partielles dans le plan (100) de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2}[001]$  séparées de  $5,1\text{\AA}$ , soit la distance entre deux plans (010) (niveaux 1 et 2). Dans les plans (010), ces deux partielles se décomposent en dislocations fractionnaires dont on ne connaît pas le module des vecteurs de Burgers.

La structure de coeur placée au *centre 2* est compatible avec la structure de coeur de la dislocation vis  $[001]$  déterminée par simulation directe à l'échelle atomique avec le potentiel THB1 par Walker *et al.* (2005b) et analysée par Carrez *et al.* (2008). Cette structure calculée à l'échelle atomique est représentée sur la figure (6.15). Le déplacement relatif des atomes voisins dans cette structure de coeur montre que la dislocation s'étale dans deux plans (010) et un plan (100).

On applique une déformation  $\epsilon_{zx}$  afin de déplacer cette dislocation dans le plan (100). Le mécanisme, illustré sur la figure (6.14), permettant à la dislocation de glisser est le suivant :

- Sous l'action d'une contrainte projetée dans le plan (100) égale à 4,1GPa, l'étalement de la dislocation dans un plan (010) (dans notre exemple, le niveau 1) se ferme. Le centre de la dislocation se déplace jusqu'à l'intersection entre le plan (100), (010) et  $(\bar{1}10)$  : le centre 1.



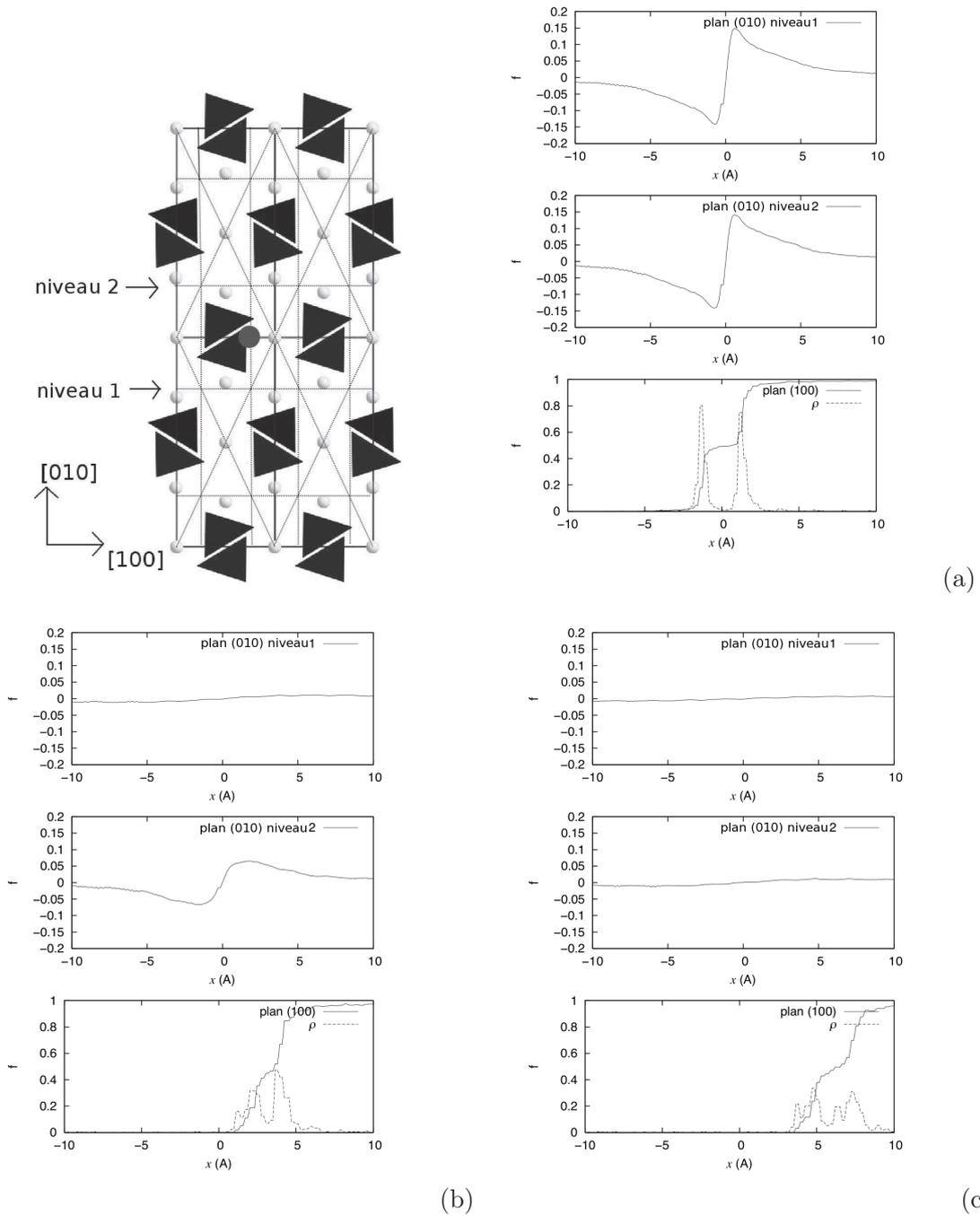


FIG 6.14 – Etalement  $f$  (traits pleins) et densités de dislocation  $\rho$  (traits pointillés) de la dislocation vis  $[001]$  introduite au *centre 2* à 0GPa. (a) sans contrainte appliquée. (b) sous l'action d'une contrainte projetée dans le plan (100) égale à 4,1GPa : l'étalement sur le niveau 1 disparaît. (c) pour une contrainte égale à 4,5GPa, la dislocation se déplace librement dans le réseau.

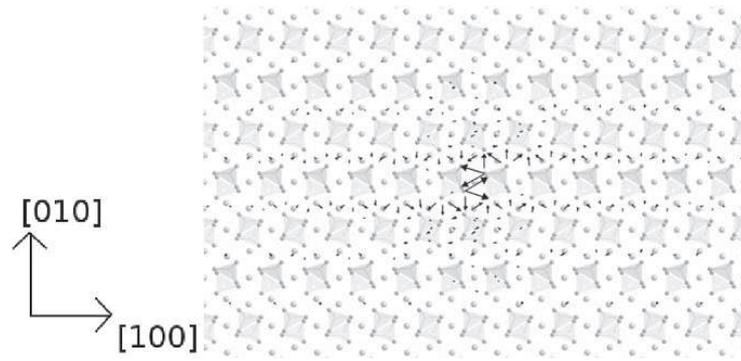


FIG 6.15 – Présentation de la structure de coeur à l'échelle atomique calculée par Walker *et al.* (2005b) avec le potentiel THB1. Sur cette représentation dite de Vitek, les flèches indiquent le déplacement relatif entre atomes voisins par rapport à leurs positions dans un cristal parfait.

On observe un changement de l'étalement de la dislocation sur le plan (010)-niveau 2. Dans le plan (100), nous gardons deux dislocations partielles colinéaires de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2}[001]$ .

- Lorsque la contrainte critique projetée est atteinte, les dislocations fractionnaires dans le plan (010) (le niveau 2 dans cet exemple) se ferment complètement et la dislocation dissociée en deux dislocations partielles glisse dans le plan (010). Cette contrainte critique est égale à 4,5GPa.

### 6.2.5 Comportement de la dislocation vis $[001](100)$ non-planaire sous l'action de différentes composantes du tenseur de contraintes à 0GPa.

Nous avons montré que la dislocation vis  $[001]$  introduite dans le plan  $(100)$  présente une structure de coeur non-planaire quel que soit le centre où elle est introduite. Cette structure de coeur non-planaire est caractérisée par l'apparition de dislocations fractionnaires dans le plan  $(010)$ . Ce type de structure de coeur non-planaire est comparable à celui observé sur les dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans les métaux cubiques centrés. Dans ces matériaux, les dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle$  s'étale sous forme de dislocations fractionnaires dans trois plans  $\{110\}$  en zone avec la direction  $\langle 111 \rangle$  (Vitek *et al.*, 1970). Des études numériques sur l'influence du cisaillement le long du vecteur de Burgers ont été réalisées pour différentes orientations par rapport au plan de glissement sur la mobilité ces dislocations (Duesbery *et al.*, 1973; Vitek, 1976). Il ressort de ces études que le déplacement de la dislocation n'est pas assujéti à la seule projection du tenseur des contraintes dans le plan de glissement le long du vecteur de Burgers : le comportement sous contrainte de ces dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dévie donc de la loi de Schmid et Boas. De plus, d'autres composantes du tenseur de contraintes, les composantes de traction-compression et les composantes agissant sur le caractère coin, combinées aux composantes agissant sur le caractère vis, peuvent avoir une influence sur la contrainte critique de cisaillement (Ito & Vitek, 2001; Gröger *et al.*, 2008a).

Nous allons étudier le comportement de la dislocation vis  $[001](100)$  non-planaire introduite au *centre 2* (la structure stable de la dislocation d'après les modélisations à l'échelle atomique de Carrez *et al.* (2008)) vis-à-vis de la loi de Schmid.

Deux types de contraintes seront appliquées sur cette dislocation en nous basant sur le repère de la figure (6.16) :

- Un cisaillement pur dans la direction du vecteur de Burgers et ceci pour différentes orientations  $\theta$  par rapport au plan  $(100)$ . Nous limitons les calculs à l'intervalle  $[-\pi/2, \pi/2]$  du fait de la symétrie du coeur de la dislocation. Ces calculs s'effectuent en combinant l'application des contraintes  $\sigma_{zx}$  et  $\sigma_{zy}$ . On s'attend, dans le cadre de la loi de Schmid à ce que la contrainte critique appliquée, projetée dans le plan de glissement soit constante lorsque l'orientation de la sollicitation varie. Si le comportement de la dislocation s'écarte de la loi de Schmid, d'autres composantes du tenseur des contraintes influent sur le glissement. Ceci est illustré sur la figure (6.17)
- Un cisaillement pur  $\sigma_{zx}$  combiné avec une contrainte s'appliquant sur les composantes coin

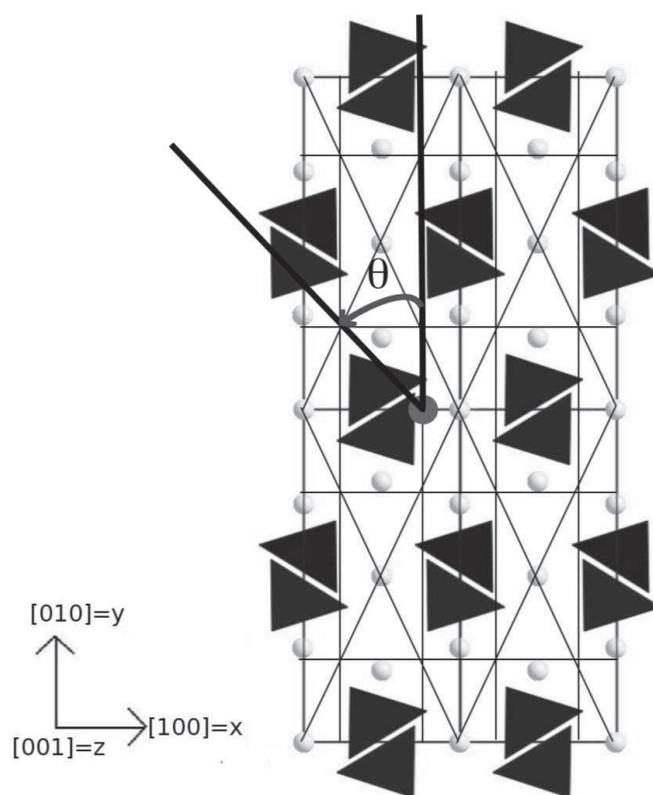


FIG 6.16 – Repère utilisé et définition de l'angle  $\theta$  entre le plan (100) et l'orientation du cisaillement pour l'étude du comportement sous contrainte de la dislocation vis  $[001]$  non-planaire posée au *centre 2*.

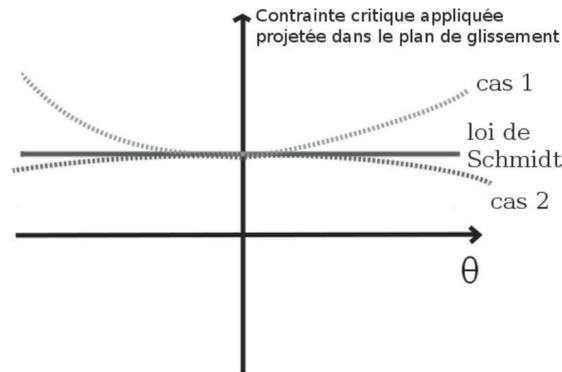


FIG 6.17 – Comportement d'une dislocation vis sous l'action d'une contrainte de cisaillement le long du vecteur de Burgers pour différentes orientations  $\theta$  par rapport au plan de glissement. Si le comportement de cette dislocation sous contrainte obéit à la loi de Schmid, alors la contrainte critique appliquée dans le plan de glissement reste constante pour tout  $\theta$ . Sinon, deux cas peuvent se produire :

- Cas 1 : l'écart de l'orientation de la contrainte par rapport au plan de glissement durcit le système.
- Cas 2 : l'écart de l'orientation de la contrainte par rapport au plan de glissement facilite le glissement.

$\sigma_{xy}$  de la dislocation. De cette façon, on peut quantifier l'effet des composantes coin de la dislocation sur sa mobilité, même si ces composantes coin sont infimes dans la description des dislocations pure vis. L'application d'une composante du tenseur de contrainte agissant sur le caractère coin combinée aux composantes agissant sur le caractère vis ne doit pas modifier la contrainte critique de cisaillement si le comportement de la dislocation sous contraintes obéit à la loi de Schmid.

L'application d'un cisaillement pur suivant la direction du vecteur de Burgers dans un plan orienté d'un angle  $\theta$  par rapport au plan (100) fait glisser la dislocation dans le plan (100) pour des orientations  $\theta$  comprises entre  $-40$  et  $+40^\circ$ . Pour les angles compris entre  $-90$  et  $-40^\circ$  et entre  $+40$  et  $+90^\circ$ , la boîte de simulation "casse" avant le glissement de la dislocation et rend la mesure de la contrainte critique appliquée projetée sur le plan de glissement impossible.

On reporte sur la figure (6.18-a), la contrainte critique appliquée, projetée sur le plan (100) que nous avons calculée en fonction de l'angle  $\theta$  pour des angles compris entre  $-40^\circ$  et  $+40^\circ$ . Cette contrainte critique est constante et égale à la contrainte de Peierls (contrainte calculée lorsque  $\theta=0$  et égale 4,5GPa dans notre cas) pour des angles compris entre  $-20$  et  $+30^\circ$ . Une déviation apparaît pour des angles de sollicitations compris entre  $-40$  et  $-20^\circ$  et  $+30$  et  $+40^\circ$ . La sollicitation dans un plan incliné de  $\theta$  correspond à l'application de composantes  $\sigma_{zy}$  dans le tenseur des contraintes (en plus de  $\sigma_{xz}$ ). L'application de ces contraintes induit, au delà d'un certain seuil proche de 1 GPa, un durcissement qui se traduit par une contrainte critique projetée

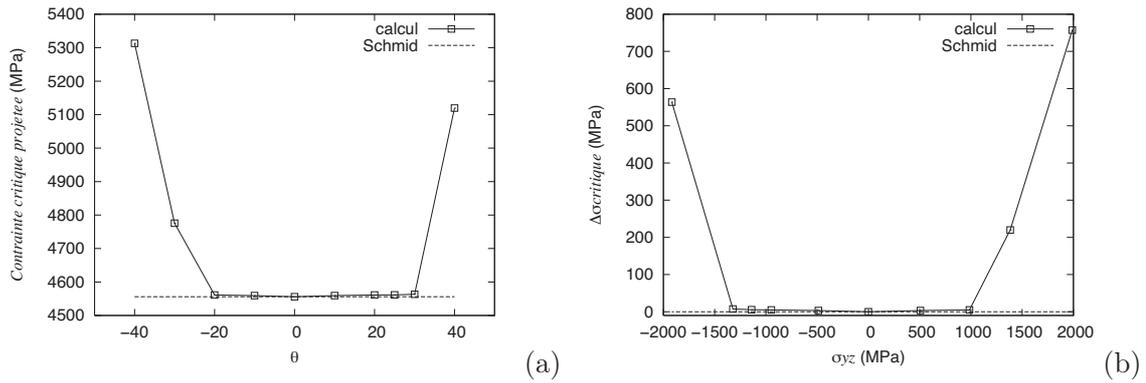


FIG 6.18 – (a) Contraite critique appliquée, projetée sur le plan (100) de la dislocation vis [001](100) introduite au *centre*  $\mathcal{Q}$  à 0GPa pour des orientations de la contrainte par rapport au plan (100) comprises entre  $-40$  et  $+40^\circ$ . On ajoute sur ce graphe, la valeur constante donnée par la loi de Schmid, quelle que soit l'orientation de la contrainte. (b) Différence  $\Delta\sigma_{critique}$  entre la contrainte critique appliquée, projetée sur le plan (100) et la contrainte de Peierls en fonction de la contrainte  $\sigma_{yz}$  appliquée pour cette même dislocation.

plus élevée. La figure (6.18-b) montre la variation de ce durcissement en fonction des contraintes  $\sigma_{zy}$ .

On termine l'étude de la dislocation vis [001] sous contraintes en lui appliquant une composante  $\sigma_{xy}$  agissant sur le caractère coin de la dislocation. L'application d'une contrainte  $\sigma_{xy}$  seule ne permet pas de déplacer la dislocation. Nous avons combiné les contraintes  $\sigma_{xy} + \sigma_{zx}$ , c'est-à-dire une contrainte agissant sur le caractère coin combiné à une contrainte agissant sur le caractère vis. cet état de contrainte permet le déplacement de la dislocation dans le plan (100). Le mécanisme permettant le déplacement de cette dislocation est le même que celui permettant le déplacement de la dislocation sous l'action de  $\sigma_{zx}$  seule (figure (6.14)). Nous avons réalisé une seule mesure avec  $\sigma_{xy} = 2,4$  GPa. La contrainte critique projetée  $\sigma_{zx}$  permettant de déplacer la dislocation reste alors très proche de la valeur d'origine 4,4 GPa. La sensibilité du coeur de la dislocation est donc très faible vis-à-vis de ces composantes  $\sigma_{xy}$  du tenseur des contraintes.

### 6.2.6 Effet de la pression sur la dislocation vis [001]

Pour étudier l'effet de la pression sur la dislocation vis [001], nous appliquons la même méthode qu'à 0GPa. Nous utilisons les mêmes maillages que précédemment auxquels nous allons incorporer les paramètres de maille, les constantes élastiques et les énergies de fautes d'empilement généralisées des plans (100), (010) et (110) à 10GPa.

Nous utilisons encore le potentiel empirique THB1 décrit dans le chapitre 2 pour déterminer ces paramètres physiques. Les paramètres de maille, les constantes élastiques ainsi que les surfaces d'énergie de fautes d'empilement généralisées à 10GPa sont respectivement donnés dans les tableaux (6.6) et (6.7) et sur la figure (6.19).

	$a(\text{Å})$	$b(\text{Å})$	$c(\text{Å})$
THB1	4,7269	9,943721	5,8783
<i>GGA-US</i> (Durinck <i>et al.</i> , 2005b)	4,7148	9,9799	5,8807
exp. 5,3GPa (Andrault <i>et al.</i> , 1995)	4,711	10,091	5,897
exp. 15,8GPa (Andrault <i>et al.</i> , 1995)	4,696	9,813	5,746

TAB 6.6 – Paramètres de maille de la forsterite à 10GPa calculés avec le potentiel THB1. Une comparaison avec des calculs *ab initio* et les données expérimentales est également fournie (Pour les calculs *ab initio*, US est le pseudopotentiel UltraSoft).

	$C_{11}$	$C_{22}$	$C_{33}$	$C_{44}$	$C_{55}$	$C_{66}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{23}$
THB1	409	235	322	63	82	99	138	134	124
<i>GGA-US</i> (Durinck <i>et al.</i> , 2005b)	409	255	297	90	101	107	114	117	120
exp. 8,1GPa (Zha <i>et al.</i> , 2000)	379	244	284	78	92	96	101	102	105

TAB 6.7 – Constantes élastiques (en GPa) de la forsterite à 10GPa. Une comparaison avec d'autres données expérimentales et numériques, est également fournie.

La comparaison des paramètres de maille et des constantes élastiques montre que le potentiel THB1 reproduit la structure et l'élasticité de la forsterite sous pression. Les paramètres de maille et les constantes élastiques calculés avec le potentiel empirique sont dans l'ordre de grandeur des autres données expérimentales et numériques. Les  $\gamma$  – *surfaces* des plans (100), (010) et (110) à 10GPa ont les mêmes formes que celles calculées à 0GPa mais montrent une énergie de faute supérieure. Les comparaisons des  $\gamma$  – *lignes* des glissements [001](100) et [001](010) à 0 et 10GPa sont présentées sur la figure (6.20). Sur cette figure, nous voyons que l'énergie de faute d'empilement du système [001](010) diminue avec la pression, contrairement aux deux

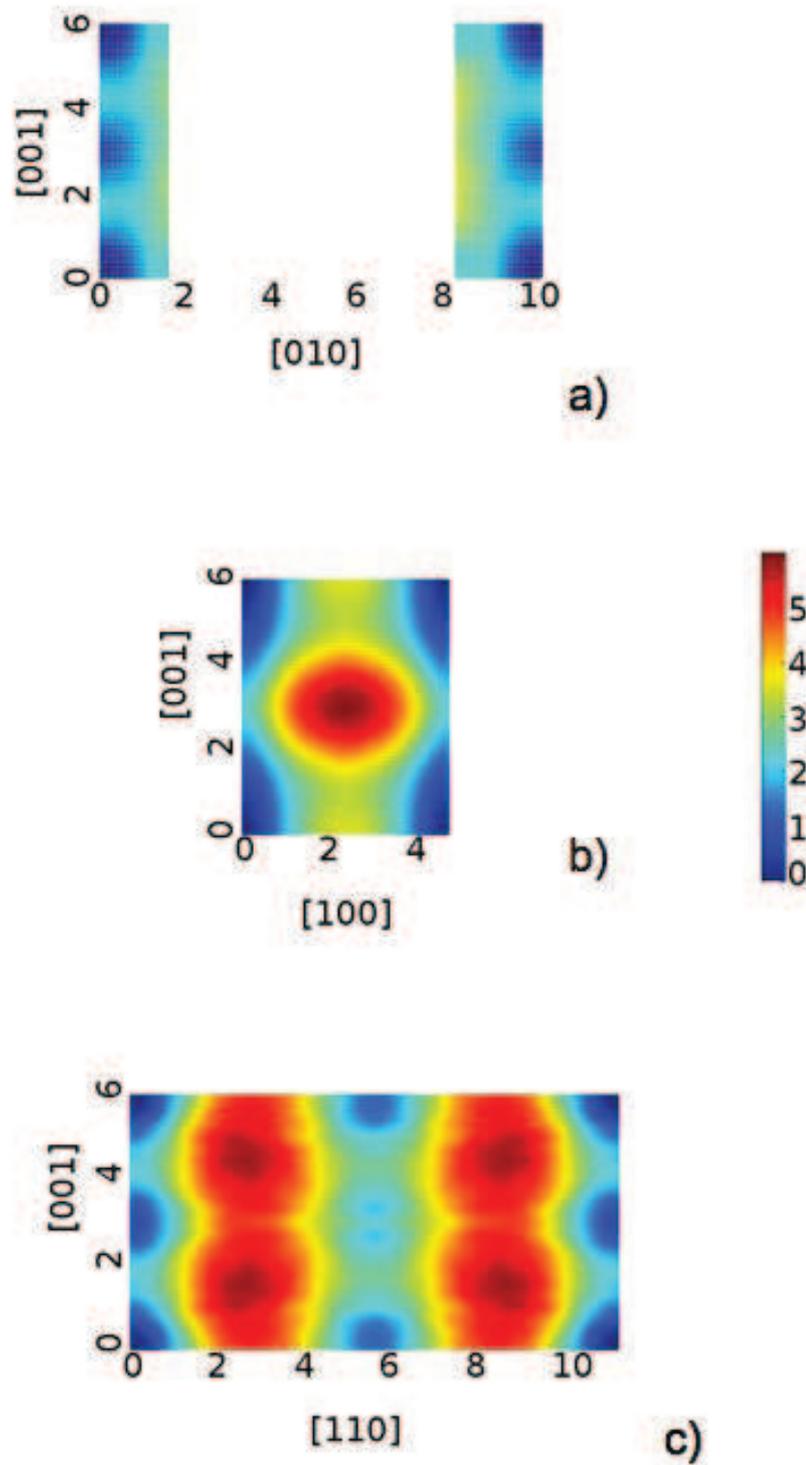


FIG 6.19 – Energies de fautes d'empilement généralisées des plans (100) (a), (010) (b) et  $\{110\}$  (c) calculées à 10GPa avec le potentiel THB1. Les niveaux de couleurs représentent l'intensité de l'énergie de fautes. (courbes lissées)

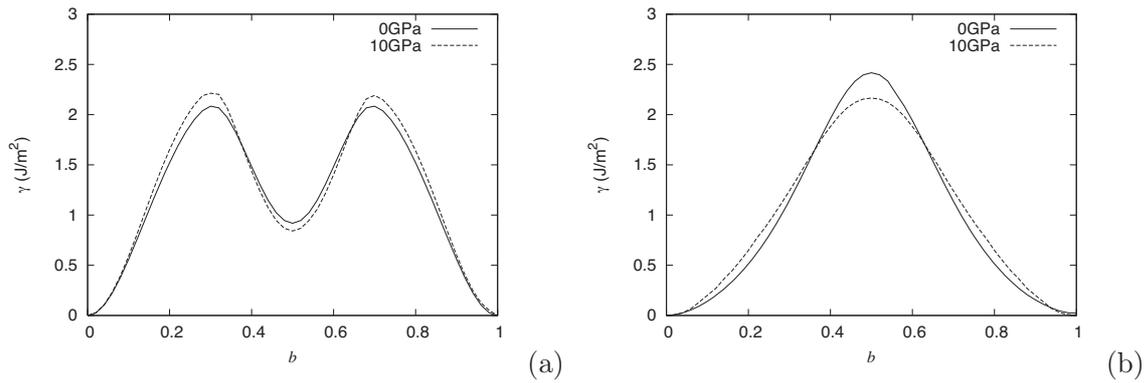


FIG 6.20 – Comparaison 0-10GPa des  $\gamma$  – lignes des systèmes de glissement  $[001](100)$  (a),  $[001](010)$  (b). (courbes lissées)

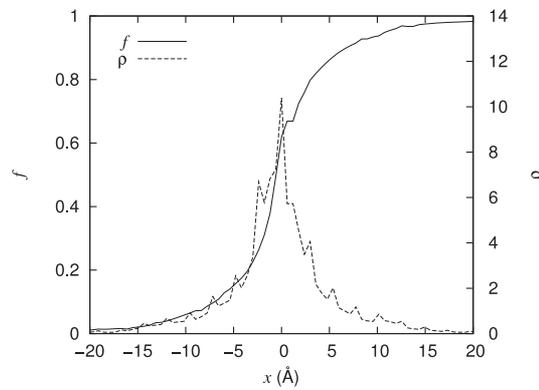


FIG 6.21 – Etirement  $f$  et densité de dislocation  $\rho$  de la dislocation  $[001](010)$ -caractère vis à 10GPa.

autres systèmes qui présentent des énergies de fautes supérieures à 10GPa. On note également une légère diminution de l'énergie de faute stable du système  $[001](100)$ .

Nous appliquons tout d'abord le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin sur la dislocation vis  $[001]$  introduite dans le plan  $(010)$ . L'étalement  $f$  et le profil de densités de dislocations  $\rho$  à 10 GPa sont montrés sur la figure (6.21). Comme à 0GPa, cette dislocation est planaire et non-dissociée. Cette dislocation s'étale sur une distance de  $1,8\text{\AA}$  et présente une contrainte de Peierls égale à 425MPa. On observe un adoucissement avec l'augmentation de pression : à 0GPa, la contrainte de Peierls de cette dislocation est égale à 510MPa (cf. tableau (6.5, page 198)).

L'étude de la dislocation vis  $[001]$  introduite dans le plan  $(100)$  est effectuée en introduisant la dislocation au *centre 1* et au *centre 2*, tels qu'ils ont été définis sur la figure (6.12).

Lorsque la dislocation est introduite au *centre 1*, nous obtenons le même type de structure de coeur de la dislocation qu'à 0GPa (figure (6.22-a)). La dislocation s'étale dans les plans  $(100)$

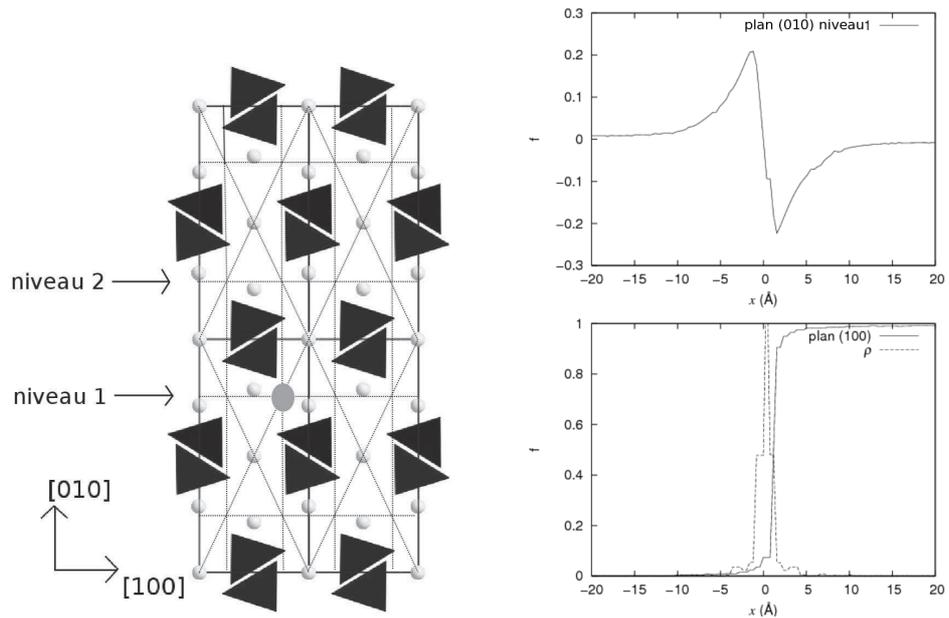


FIG 6.22 – Etalement  $f$  (traits pleins) et densités de dislocation  $\rho$  (traits pointillés) de la dislocation vis  $[001]$  introduite au *centre 1* à 10GPa.

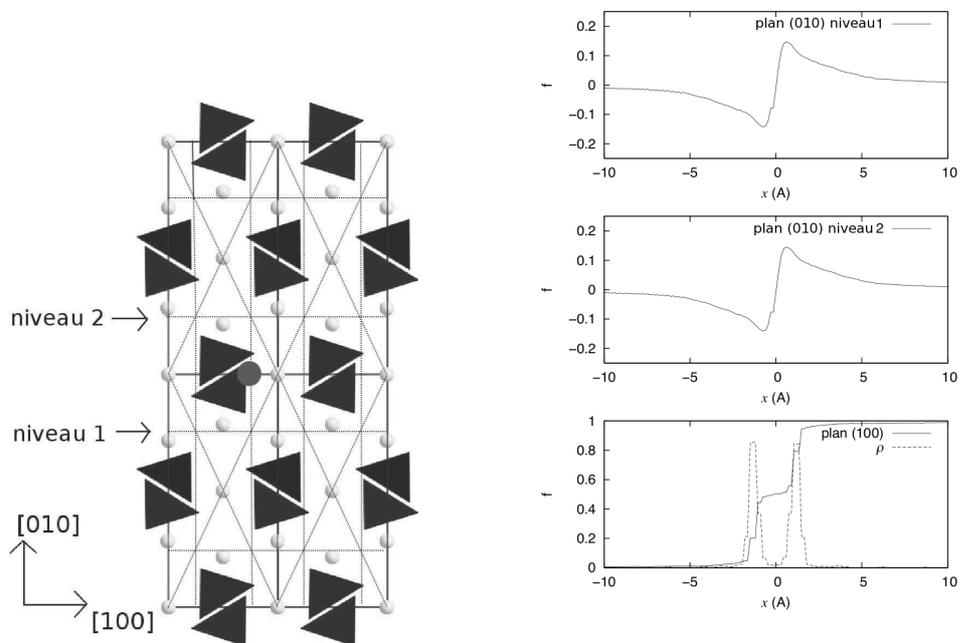


FIG 6.23 – Etalement  $f$  (traits pleins) et densités de dislocation  $\rho$  (traits pointillés) de la dislocation vis  $[001]$  introduite au *centre 2* à 10GPa.

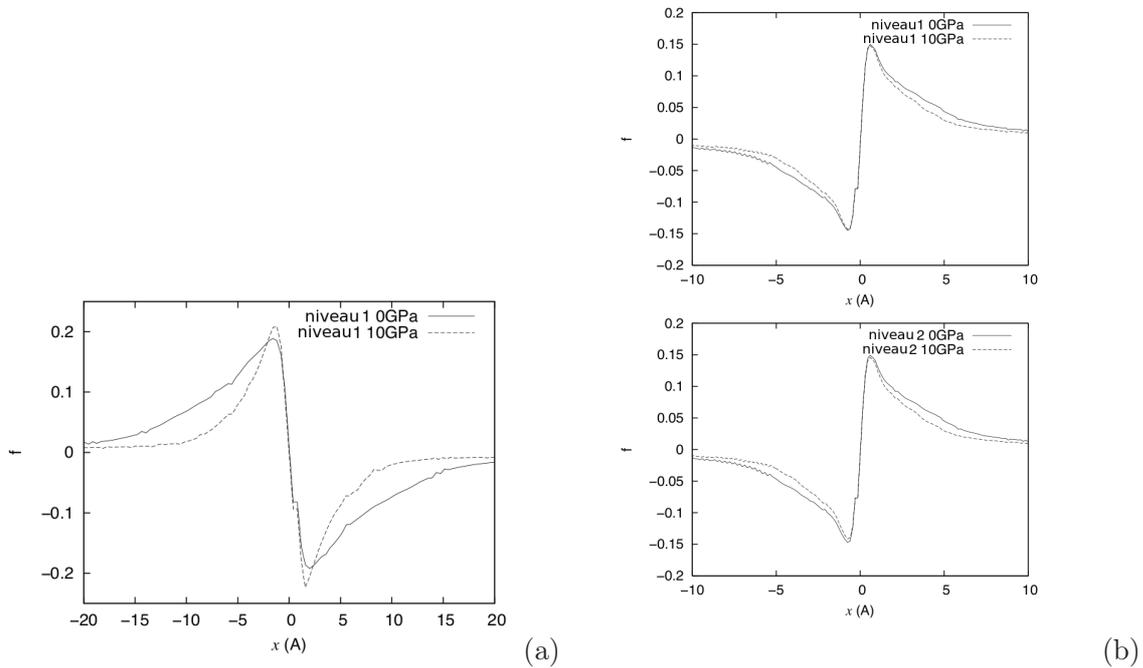


FIG 6.24 – Comparaison 0-10GPa des etalements des dislocations fractionnaires dans les plans (010) placées au *centre 1* (a) et au *centre 2* (b)

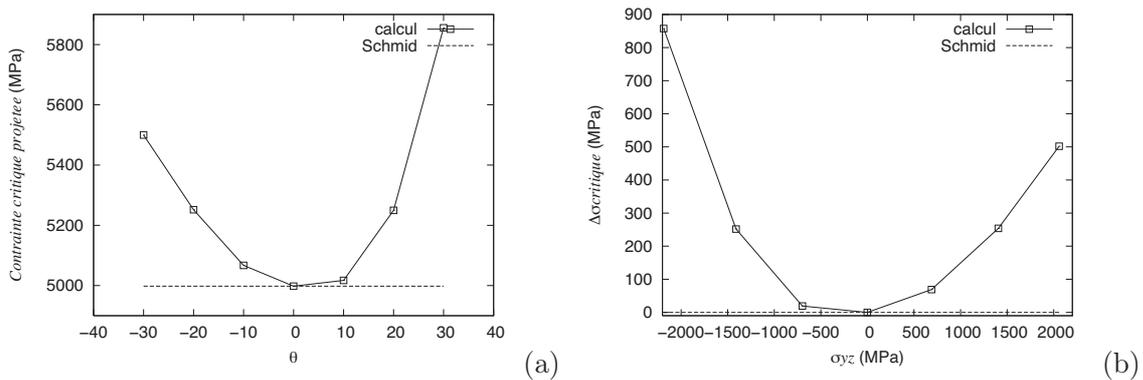


FIG 6.25 – (a) Contrainte critique appliquée, projetée sur le plan (100) de la dislocation vis  $[001](100)$  introduite au *centre 2* à 10GPa pour des orientations de la contrainte par rapport au plan (100) comprises entre  $-30$  et  $+30^\circ$ . On ajoute sur ce graphe, la valeur constante donnée par la loi de Schmid, quelle que soit l'orientation de la contrainte. (b) Différence  $\Delta\sigma_{critique}$  entre la contrainte critique appliquée, projetée sur le plan (100) et la contrainte de Peierls en fonction de la contrainte  $\sigma_{yz}$  appliquée pour cette même dislocation.

et (010). Les dislocations fractionnaires dans le plan (010) sont moins étalées qu'à 0GPa. On reporte sur la figure (6.24) les fonctions de cisaillement  $f$  des dislocations fractionnaires dans le plan (010) à 0 et 10GPa pour cette dislocation. On y voit que les fonctions d'étalements  $f$  à 10GPa décroissent plus rapidement avec  $x$  qu'à 0GPa : ces dislocations fractionnaires sont moins étendues à 10GPa. L'application d'une contrainte  $\sigma_{zx}$  sur la cellule de simulation déplace la dislocation dans le plan (100) suivant un mécanisme différent de celui observé à 0GPa : on n'observe pas de réarrangement du coeur sous contrainte et l'application d'une contrainte projetée égale à 5GPa ferme les dislocations fractionnaires dans le plan (010) et permet à la dislocation de se déplacer librement dans le plan (100).

L'introduction de la dislocation au *centre 2* donne une structure de coeur symétrique, également du même type que celle déterminée à 0GPa. On représente cette structure de coeur sur la figure (6.23). La dislocation s'étale dans les deux plans (010) et le plan (100). Dans le plan (100), la dislocation se dissocie en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers  $1/2[001]$ , séparées d'une distance  $[010]/2$ . Une fois de plus, les étalements des dislocations fractionnaires dans les plans (010) sont plus étroits qu'à 0GPa (figure (6.24)).

On applique une contrainte  $\sigma_{zx}$  pour faire glisser la dislocation dans le plan (100) et déterminer sa contrainte de Peierls. Le mécanisme de réarrangement du coeur de cette dislocation sous contrainte est différent du mécanisme observé à 0GPa. Comme pour la dislocation vis  $[001]$  introduite au *centre 1* à cette pression, on n'observe pas de réarrangement du coeur de la dislocation sous contrainte. L'application de la contrainte de Peierls sur cette dislocation ferme les dislocations fractionnaires dans le plan (010) et fait glisser la dislocation dans le plan (100). La contrainte de Peierls est la même que pour la dislocation posée au *centre 1* à cette pression : 5GPa.

Nous testons la validité de la loi de Schmid à 10GPa en appliquant les mêmes contraintes de cisaillement sur la dislocation qu'à 0GPa en nous basant sur le repère de la figure (6.16) : un cisaillement pur dans la direction du vecteur de Burgers pour différentes orientations par rapport au plan (100) (combinaison  $\sigma_{zx} + \sigma_{zy}$ ) et un cisaillement pur suivant la direction du vecteur de Burgers dans le plan (100) combiné avec un cisaillement agissant uniquement sur les composantes coin de la dislocation ( $\sigma_{zx} + \sigma_{xy}$ ).

A 10GPa, la dislocation glisse dans le plan (100) pour des angles  $\theta$  de la sollicitation compris entre  $-30^\circ$  et  $+30^\circ$  : les contraintes appliquées pour des angles compris entre  $-90^\circ$  et  $-30^\circ$  et entre  $+30^\circ$  et  $+90^\circ$  ne sont pas accommodées par la cellule de simulation.

Nous reportons la contrainte critique appliquée, projetée dans le plan (100) que nous avons calculé en fonction de l'angle  $\theta$  du cisaillement pur par rapport au plan (100) à 10GPa sur la figure (6.25-a). Cette figure montre que que les contraintes calculées ne suivent pas du tout la loi de Schmid : l'écart de la sollicitation par rapport au plan (100) durcit le système. Nous avons quantifié l'augmentation de la contrainte critique nécessaire au glissement en fonction de la composante  $\sigma_{zy}$  sur la figure (6.25-b). Cette figure montre que l'écart à la loi de Schmid est plus important à 10 GPa qu'à 0 GPa. Nous pouvons modéliser cet écart par une fonction du quatrième ordre :

$$\Delta\sigma_{critique} = 8.10^{-12}\sigma_{yz}^4 - 2.10^{-8}\sigma_{yz}^3 + 1.10^{-4}\sigma_{yz}^2 + 0,049\sigma_{yz} \quad (6.2)$$

Tous les termes de contraintes de cette équation sont exprimés en MPa.

Nous avons réalisé un seul calcul afin de tester la sensibilité aux composantes  $\sigma_{xy}$  du tenseur des contraintes. L'application de  $\sigma_{xy} = 2,9$  GPa n'affecte pas significativement la contrainte critique projetée dans le plan (100) qui vaut 4,9 GPa, valeur indiscernable de la valeur nominale 5 GPa. Comme à 0 GPa, nous ne mettons pas en évidence une quelconque sensibilité du glissement dans (100) aux composantes  $\sigma_{xy}$  du tenseur des contraintes.

## 6.3 Discussion

### 6.3.1 Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [100] à 0GPa.

Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [100] est celui observé lorsque l'olivine est déformée à basse pression-haute température ( $T > 1000^\circ \text{C}$ ) (Durham *et al.*, 1977; Darot & Gueguen, 1981; Gueguen & Darot, 1982; Bai & Kohlstedt, 1992)). Il est absent à basse température au profit du glissement [001].

#### Système [100](010)

Les résultats obtenus sur la dislocation [100](010) montrent une dissociation possible de la dislocation [100] en deux dislocations partielles suivant la réaction :

$$[100] \rightarrow \left[\frac{1}{2}0x\right] + \left[\frac{1}{2}0\bar{x}\right] \quad (6.3)$$

où  $x = 0,07$  lorsque la dislocation est introduite pure vis et  $x = 0,13$  lorsque la dislocation est introduite pure coin. La dislocation [100](010) reste planaire, quel que soit son caractère d'introduction. La structure de coeur de cette dislocation est alors contrôlée par la forme de la  $\gamma$  - *surface* du plan (010). Cette surface présente une faute d'empilement stable en  $1/2[100] + 1/6[001]$  (point A sur la figure (6.5), page 196) qui entraîne la dissociation de cette dislocation en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers non-colinéaires. Cependant, les profils de densité de dislocations de la figure (6.8, page 202) montrent un coeur large, non-dissocié : nous parlerons ici d'un effet de coeur plutôt que d'une véritable dissociation de cette dislocation. La différence entre les valeurs  $x$  de la réaction de dissociation (6.3) entre les caractères vis et coin est un effet de l'élasticité. On peut observer cet effet de l'élasticité en calculant les coefficients énergétiques  $K$  des caractères vis et coin de la dislocation [100](010) avec le logiciel *DisDi* :  $K_{vis} = 79 \text{GPa}$  et  $K_{coin} = 135 \text{GPa}$ . Ce coefficient énergétique  $K$  est plus grand pour le caractère coin que pour le caractère vis et entraîne une déviation du cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers plus grande dans le cas d'une dislocation introduite pure coin (Schoeck, 2005).

Une réaction complexe de dissociation de cette dislocation [100](010) a été envisagée par Poirier à partir d'un modèle de sphères dures (Poirier & Vergobbi, 1978; Poirier, 1975). Cette étude a été réalisée en considérant la structure cristalline de la forsterite dans la structure hexagonale

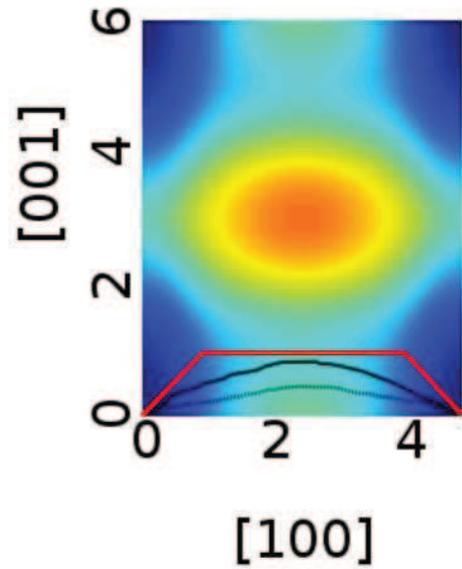


FIG 6.26 – Dissociation de la dislocation  $[100](010)$ . On reporte la répartition du cisaillement  $f$  que nous avons calculé pour la dislocation introduite pure vis (en pointillé) et pur coin (trait plein) sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan  $(010)$  à 0GPa. En rouge, on représente le chemin de dissociation planaire de la dislocation  $[100]$  dans le plan  $(010)$  proposée par Poirier (1975)

compacte du sous-réseau anionique. La réaction de dissociation en trois dislocations partielles proposée s'écrit, dans la forsterite orthorhombique  $Pbnm$  :

$$[100] \rightarrow \left[\frac{1}{6}, \frac{\bar{1}}{36}, \frac{1}{4}\right] + \left[\frac{2}{3}, 0, 0\right] + \left[\frac{1}{6}, \frac{1}{36}, \frac{\bar{1}}{4}\right] \quad (6.4)$$

Ce schéma de dissociation fait intervenir une composante hors du plan de glissement des dislocations partielles d'une translation  $\frac{1}{36}e$  de  $[010]$ . On représente le chemin de dissociation planaire dans le plan  $(010)$  sur la figure (6.26).

Une dissociation de la dislocation  $[100](010)$  en deux dislocations partielles non-colinéaires a été observée par Vander Sande & Kohlstedt (1976) au microscope électronique en transmission sur de l'olivine déformée. Ces auteurs se sont appuyés sur la réaction en trois dislocations partielles proposée par Poirier pour analyser leur résultats. La non-visibilité de la troisième dislocation a été attribuée à un problème d'observation au microscope électronique. Nos calculs sont une explication possible de leurs observations de la dissociation de la dislocation  $[100]$  en deux dislocations partielles non-colinéaires.

Les contraintes de Peierls associées à la dislocation  $[100](010)$  valent respectivement 820 et 290MPa pour les dislocations introduites pure vis et pure coin. Le caractère contrôlant la mobilité de cette dislocation est alors le caractère vis. Ce caractère vis des dislocations gouvernant la mobilité des dislocations  $[100](010)$  a également été mis en évidence par Durinck *et al.* (2007). Ces auteurs ont utilisé la formulation unidimensionnelle du problème de Peierls et Nabarro pour déterminer les structures de coeur et les contraintes de Peierls des dislocations dans la forsterite. Dans le cas de la dislocation  $[100](010)$ , les contraintes de Peierls issues de ce modèle valent respectivement 6,3 et 1,9GPa pour les caractères vis et coin pour des structures de coeur de la dislocation  $[100](010)$  non-dissociées. La formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro ne permet pas la détermination de dissociation de dislocation avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires.

### Système $[100](001)$

Le système  $[100](001)$  est le second système de glissement faisant intervenir le glissement  $[100]$  que nous avons étudié. Les résultats montrent deux structures de coeur différentes selon que cette dislocation est introduite pure vis ou pure coin :

- un coeur de dislocation planaire et non-dissocié : la dislocation coin  $[100](001)$ .
- Un coeur de la dislocation vis  $[100](001)$  non-planaire qui s'étale dans les plans (010) et (001).

La dislocation coin  $[100](001)$ , de par son caractère coin, est contrainte à rester planaire. La surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan (001) présente une faute d'empilement stable en son centre (repérée B sur la figure (6.5), page 196). La dissociation de la dislocation  $[100]$  dans son plan

$$[100] \rightarrow \frac{1}{2}[110] + \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0] \quad (6.5)$$

n'est pas stable d'après le critère de Frank. La structure de coeur de la dislocation coin  $[100](001)$  est alors contrôlée par la forme de la  $\gamma$  – *ligne* du système  $[100](001)$ . Cette courbe présente une simple bosse (cf. figure (6.4), page 195), caractéristique d'une non-dissociation de la dislocation  $[100](001)$ .

Comme dans le cas de la dislocation  $[100](010)$ , Poirier a proposé une dissociation de la dislocation  $[100](001)$ , à partir de l'examen de la structure de la forsterite (Poirier & Vergobbi, 1978) :

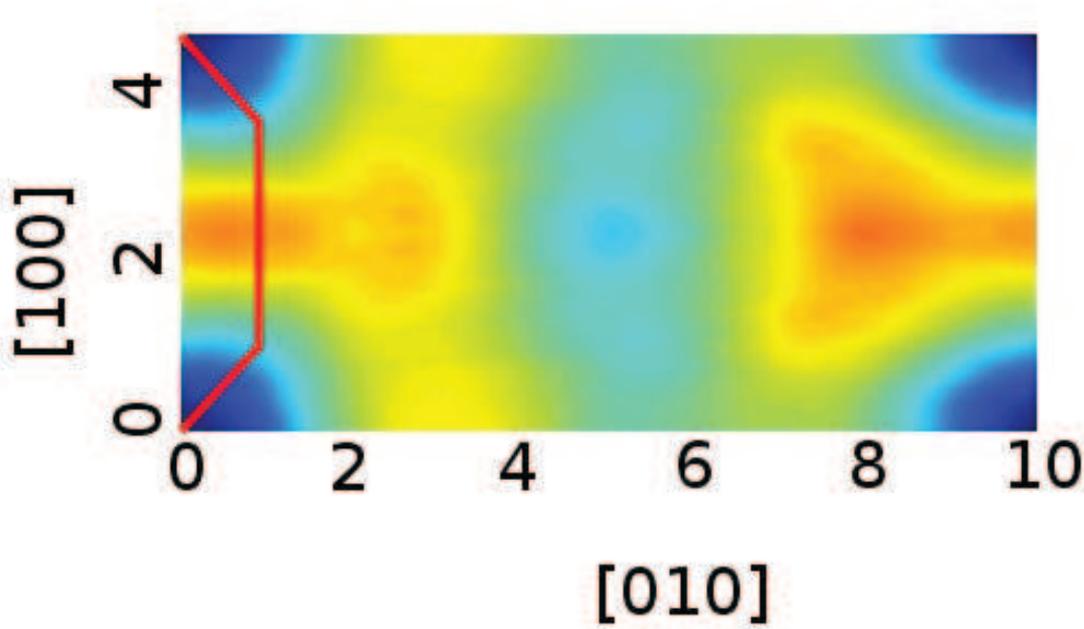


FIG 6.27 – Dissociation de la dislocation  $[100](001)$  proposée par Poirier & Vergobbi (1978) représentée sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan  $(001)$  à 0GPa.

$$[100] \rightarrow \left[\frac{1}{6}, \frac{\bar{1}}{9}, \frac{1}{6}\right] + \left[\frac{2}{3}, 0, 0\right] + \left[\frac{1}{6}, \frac{1}{9}, \frac{\bar{1}}{6}\right] \quad (6.6)$$

Cette réaction comporte une composante hors du plan de glissement  $\frac{1}{6}[001]$ . Nous représentons la réaction de dissociation planaire sur la surface d'énergie de fautes d'empilement généralisées du plan  $(001)$  (figure (6.27)). Nous n'observons pas de dissociation planaire de cette dislocation avec nos calculs. L'examen de la structure cristalline n'est pas suffisante pour déceler d'éventuelles dissociations de dislocations : l'énergie liée au cisaillement des liaisons atomiques, les énergies de fautes d'empilement généralisées, donnent plus d'informations sur de possibles dissociations de dislocation.

La dislocation vis  $[100](001)$  que nous avons calculé présente une structure non-planaire. Cette dislocation vis s'étale dans les plans  $(010)$  et  $(001)$ . Sa structure de coeur est non-dissociée, étalée sous forme de dislocations fractionnaires dans les plans  $(010)$  et  $(001)$  dont on ne connaît pas les modules des vecteurs de Burgers. Le module des vecteur de Burgers fractionnaires est gouverné par un équilibre entre forces liées aux énergies de fautes d'empilement dans les plans  $(001)$  et  $(010)$ . Duesbery *et al.* (1973) ont montré que l'étalement dans plusieurs plans  $\{110\}$  en zone des dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans les métaux cubiques centrés est dûe à un équilibre entre forces

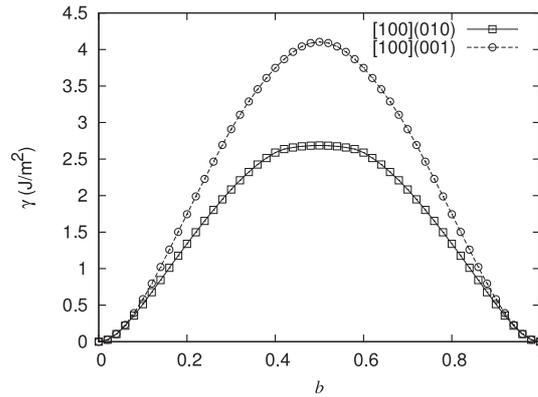


FIG 6.28 – Comparaison des énergies de fautes d’empilement généralisées des systèmes de glissement  $[100](010)$  et  $[100](001)$  à 0GPa calculées avec le potentiel THB1.

liées aux énergies de fautes d’empilement dans les plans  $\{110\}$ . On peut comparer les  $\gamma$  – lignes des systèmes de glissement  $[100](010)$  et  $[100](001)$  sur la figure (6.28) pour expliquer l’étalement de la dislocation vis  $[100](001)$  dans les plans (010) et (001). On remarque que l’énergie de fautes du système de glissement  $[100](010)$  est clairement inférieure à l’énergie du système  $[100](001)$ . La dislocation vis  $[100]$  introduite dans le plan (001) aura alors tendance à minimiser son énergie de désaccord en s’étalant dans le plan (010).

Les observations des dislocations  $[100](001)$  au microscope électronique de Durham *et al.* (1977) sur de l’olivine déformée entre 1080 et 1575 °C montrent des caractères vis plutôt rectilignes. Ceci suggère une participation importante de la friction de réseau sur cette dislocation. Cette participation importante de la friction de réseau a également été observée par Bai & Kohlstedt (1992) sur de l’olivine déformée entre 1300 et 1500 °C. Poirier & Vergobbi (1978) ont proposé des dissociations sessiles de la dislocation vis  $[100](001)$  pour rendre compte de la haute friction de réseau observée sur ces dislocations :

- une configuration énergétiquement favorable : une dissociation de la dislocation en cinq dislocations partielles réparties dans les plans (010) et (001)
- Une configuration énergétiquement défavorable : une dissociation en six dislocations partielles dans les plans (010), (011) et (0 $\bar{1}$ 1)

Ces dissociations complexes sont représentées sur la figure (6.29). Le résultat que nous avons obtenu sur la dislocation vis  $[100](001)$  montrent bien un étalement dans les plans (001) et (010) comme la dissociation énergétiquement favorable de Poirier mais une structure de coeur non-dissociée. Les dislocations partielles proposées par Poirier dans la configuration énergétiquement

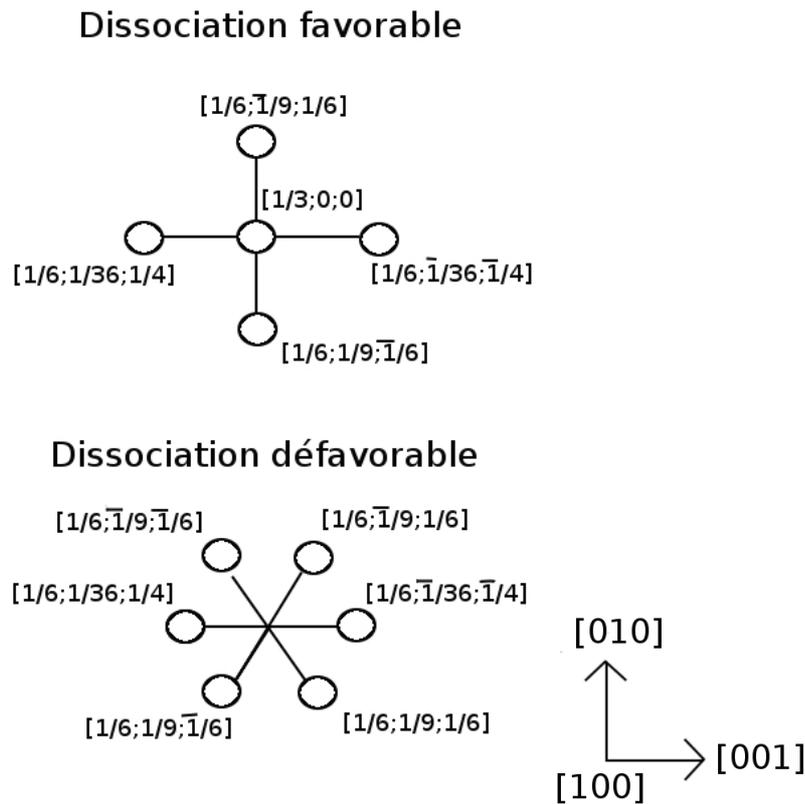


FIG 6.29 – Représentation des possibles dissociations de la dislocation vis  $[100]$  non-planaire proposées par Poirier & Vergobbi (1978). Les lignes des dislocations partielles sont représentées par des cercles.

favorable sont remplacées par des dislocations fractionnaires dans notre modélisation.

Cette configuration non-planaire pour la dislocation vis  $[100](001)$  entraîne une contrainte de Peierls élevée pour cette dislocation. La contrainte de Peierls vaut 2GPa, à comparer aux 190MPa obtenus pour la dislocation coin  $[100](001)$ . Le caractère vis de cette dislocation contrôle sa mobilité. Ce résultat est identique à celui obtenu par Durinck *et al.* (2007) avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel : les caractères vis et coin de la dislocation  $[100](001)$  présentent respectivement des contraintes de Peierls égales à 31,2 et 7,4GPa.

### Comparaison des glissements $[100](010)$ et $[100](001)$

Les calculs de contraintes de Peierls que nous avons effectué montrent que les dislocations vis contrôlent la mobilité des dislocations  $[100]$  dans les plans  $(010)$  et  $(001)$ . Les contraintes obtenues sont égales à 0,8 et 2GPa pour les systèmes  $[100](010)$  et  $[100](001)$ . On montre ici un glissement  $[100]$  plus facile dans les plans  $(010)$  que dans le plan  $(001)$ .

Ce résultat a également été mis en évidence par Durinck *et al.* (2007) avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel : les contraintes de Peierls des caractères vis des systèmes de glissement  $[100](010)$  et  $[100](001)$  valent 6,3 et 31,2 GPa. Cependant, cette mise en évidence de la facilité du glissement dans le plan (010) dans les deux études ne découle pas des mêmes structures de coeur. Les structures de coeurs des dislocations  $[100](010)$  et  $[100](001)$  calculées par Durinck *et al.* sont planaires et non-dissociées. D'après ces résultats, la dislocation  $[100](001)$  présente un coeur plus étroit que la dislocation  $[100](010)$ . Ceci conduit à des contraintes de Peierls plus élevées pour le système  $[100](001)$  que pour le système  $[100](010)$ . Dans le cadre de nos simulations avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, la dislocation vis  $[100](010)$  est planaire contrairement à la dislocation vis  $[100](001)$  : un coeur de dislocation non-planaire présente une friction de réseau plus importante qu'une dislocation planaire.

La facilité du glissement  $[100](010)$  par rapport au glissement  $[100](001)$  est compatible avec les expériences de déformation réalisées sur monocristaux de forsterite à haute température ( $T > 1400$  °C) de Darot & Gueguen (1981). Ces auteurs ont sollicité les orientations  $[110]_c$  (activation du système  $[100](010)$ ) et  $[101]_c$  (activation du système  $[100](001)$ ). Ils ont mis en évidence la dureté de l'orientation  $[101]_c$  par rapport à l'orientation  $[110]_c$  : le système de glissement  $[100](010)$  est plus facile à activer que le système  $[100](001)$  à haute température.

### 6.3.2 Le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers $[001]$ à 0 et 10GPa.

Le glissement des dislocations de vecteur de Burgers  $[001]$  est observé expérimentalement à basse pression-basse température (Phakey *et al.*, 1972; Gaboriaud *et al.*, 1981) ainsi qu'à haute pression-haute température (Couvry *et al.*, 2004; Jung *et al.*, 2008; Raterron *et al.*, 2007, 2009).

#### Système $[001](010)$

L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin pour déterminer la structure de coeur de la dislocation  $[001](010)$  conduit à une structure de coeur non-dissociée et planaire, aussi bien pour les caractères vis et coin à 0 et 10GPa.

La surface d'énergie de faute d'empilement du plan (010) à 0GPa présente une faute d'empilement stable en  $1/2[100] + 1/6[001]$  (point A sur la figure (6.5), page 196) qui ne permet pas une dissociation de la dislocation  $[001](010)$  avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires qui respecte le critère de Frank. La surface d'énergie de fautes d'empilement du plan (010) à 10GPa présente également cette faute d'empilement stable en  $1/2[100] + 1/6[001]$  et ne permet pas la dissociation

	$\zeta_{PNG}$ (Å)	$\zeta_{PN}$ (Å)	$100 * \frac{\zeta_{PNG} - \zeta_{PN}}{\zeta_{PN}}$
[001](010)-vis 0GPa	1,5	1,9	-21
[001](010)-vis 10GPa	1,8	2,5	-28
[001](010)-coin 0GPa	2,5	2,6	-4

TABLE 6.8 – Comparaison entre les résultats sur les structures de coeurs des dislocations déterminées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin (PNG) et celles données dans Durinck *et al.* (2007) avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel (PN).  $\zeta$  est la demi-largeur du coeur de la dislocation. On donne également la différence relative entre les deux résultats.

de la dislocation [001] dans ce plan avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires à cette pression.

La forme de la  $\gamma$  – *ligne* du système [001](010) à 0GPa (figure (6.4), page 195) et à 10GPa (figure (6.20), page 218) dirige alors la structure de coeur de cette dislocation. Cette  $\gamma$  – *ligne* montre une simple bosse qui conduit à la structure non-dissociée des dislocations vis et coin [001](010) à 0 et 10GPa. Les étalements de la dislocation [001](010) sont plus larges à 10 GPa par rapport à 0GPa :  $\zeta=1,5\text{Å}$  à 0GPa et  $\zeta=1,8\text{Å}$  à 10GPa. Ceci vient du fait que l'énergie de fautes d'empilement généralisées est plus faible à 10GPa qu'à 0GPa (figure (6.20), page 218)).

Cette structure de coeur planaire et non-dissociée de la dislocation [001](010) est également modélisable avec un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Les résultats que nous avons obtenus sont alors directement comparables avec les résultats obtenus par Durinck *et al.* (2007) sur la dislocation [001](010) avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Dans cette étude, les  $\gamma$  – *lignes* ainsi que les constantes élastiques nécessaires pour calculer les coefficients énergétiques  $K$  des dislocations ont été calculées *ab initio* (Approximation GGA- pseudopotentiel UltraSoft). Les comparaisons entre largeurs de coeurs issues de ce modèle et celles que nous avons calculées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin sont données dans le tableau (6.8).

D'après ce tableau, les étalements de coeurs de dislocations sont plus petits dans notre étude. Les différences entre les résultats issus de ces deux modèles peuvent atteindre 30%. Trois facteurs sont responsables de ces différences :

- Tout d'abord, les différences entre énergies de fautes d'empilement calculées *ab initio* et avec un potentiel empirique. Le potentiel empirique surestime les énergies de fautes par rapport aux calculs *ab initio* ce qui entraîne des largeurs de coeurs plus étroites.
- Les coefficients énergétiques  $K$  des caractères des dislocations varient en fonction de la technique choisie pour calculer les constantes élastiques. L'étalement du coeur est, en première approximation, proportionnelle au coefficient énergétique de la dislocation (cf. chapitre 1,

équation (1.18), page 24).

- Enfin, la structure de coeur dépend du modèle de Peierls utilisé. Dans le cas du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, nous autorisons la dislocation à s'étaler dans d'autres plans non-parallèles au plan où la dislocation a été introduite. Ceci peut influencer l'étalement du coeur car la dislocation peut alors s'accrocher sur ces autres plans.

La structure planaire de la dislocation  $[001](010)$  conduit à des contraintes de Peierls faibles à 0GPa : 510 et 260 MPa pour les caractères vis et coin. Ici, nous observons que le caractère vis de la dislocation  $[001](010)$  contrôle sa mobilité, même si les contraintes de Peierls pour les deux caractères sont du même ordre de grandeur. Ce résultat est en accord avec les calculs de Durinck *et al.* (2007) avec l'utilisation d'un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel qui montre également une mobilité contrôlée par le caractère vis pour cette dislocation à 0 et 10GPa avec un ordre de grandeur similaire pour les contraintes de Peierls des caractères vis et coin de la dislocation. Les contraintes de Peierls calculées avec ce modèle valent respectivement 3,1 et 2,9GPa pour les caractères vis et coin à basse pression et 0,7 et 0,6GPa à haute pression.

Les contraintes de Peierls calculées pour la dislocation vis  $[001](010)$  à 0 et 10GPa montrent un adoucissement de ce système de glissement passant de 520 à 425MPa avec l'augmentation de pression. Ce même adoucissement a été mis en évidence par Durinck *et al.* (2007) avec la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro. Cet adoucissement est lié à la structure de coeur planaire et non-dissociée de cette dislocation : le coeur de la dislocation est plus large à 10GPa qu'à 0GPa et conduit à une contrainte de Peierls plus basse pour la dislocation à 10GPa.

### **Système $[001](100)$**

#### Structures de coeurs des dislocations

Comme pour les dislocations de vecteur de Burgers  $[100](001)$ , les structures de coeurs des dislocations  $[001](100)$  sont différentes en fonction du caractère vis ou coin de la dislocation :

- A 0 GPa, la dislocation coin  $[001](100)$  est planaire et dissociée en deux dislocations partielles avec des vecteurs de Burgers colinéaires  $1/2[001]$ .
- La dislocation vis  $[001]$  introduite dans le plan (100) est non-planaire aussi bien à 0 qu'à 10GPa.

A 0GPa, la structure planaire de la dislocation  $[001](100)$  est justifiée par la forme de la  $\gamma$  – ligne du système de glissement  $[001](100)$ . La surface d'énergie de faute d'empilement généralisées

du plan (100) est limitée à 15% de cisaillement dans la direction [010] et ne montre pas de fautes d'empilement stables hors de la direction de vecteur de Burgers [001]. La dissociation de la dislocation coin [001](100) en deux dislocations partielles est alors due à la forme de la  $\gamma$  – ligne du système [001](100) qui présente une faute d'empilement stable pour une valeur de 50% de cisaillement dans la direction [001] (cf. figure (6.4), page 195) : la dislocation coin [001](100) se dissociera suivant la réaction :

$$[001] \rightarrow \frac{1}{2}[001] + \frac{1}{2}[001] \quad (6.7)$$

La dislocation vis [001] introduite dans le plan (100) présente une structure de coeur de dislocation tridimensionnelle aussi bien à 0 qu'à 10GPa. Dans un premier temps, cette dislocation a été introduite à l'intersection des plans (100), (010) et d'un plan (110). La structure de cette dislocation est étalée dans le plan (010) et dans le plan (100) sous forme de dislocations fractionnaires dont on ne connaît pas les modules des vecteurs de Burgers. Le module de ces dislocations fractionnaires est, comme pour la dislocation vis [100](001), contrôlé par les énergies de fautes d'empilement généralisées des systèmes de glissement [001](100) et [001](010) (Duesbery *et al.*, 1973). On reporte sur la figure (6.30), les énergies de fautes d'empilement généralisées des systèmes de glissement [001](100) et [001](010) à 0GPa. On y remarque que pour des valeurs faibles de cisaillement, la courbe du système [001](010) est bien inférieure à celle du système [001](100). Dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, on introduit de manière abrupte la dislocation dans son plan de glissement, ici le plan (100). Au début de la relaxation, la dislocation s'étale dans le plan de glissement et dans le plan présentant l'énergie de faute la plus basse, ici le plan (010). L'étalement de la dislocation dans le plan (010) sera limité par un équilibre de forces liées à l'énergie de fautes d'empilement généralisées dans le plan (010) et (100).

A 10GPa, nous obtenons le même type de structure de coeur qu'à 0GPa pour la dislocation vis [001](100) introduite à l'intersection des plans (100), (010) et d'un plan (110). La dislocation s'étale dans les plans (100) et (010) sous forme de dislocations fractionnaires. Ces dislocations fractionnaires sont moins étalées qu'à 0GPa. Ceci est visible sur la figure (6.24, page 220) qui montre une décroissance plus rapide de la fonction de cisaillement  $f$  dans le plan (010) à 10GPa. Cet étalement plus étroit peut être expliqué par l'augmentation et la diminution de l'énergie de fautes d'empilement généralisées des systèmes de glissement [001](100) et [001](010) avec la pression (cf. figure (6.20), page 218) qui modifiera l'équilibre entre forces dans les plans (100) et (010).

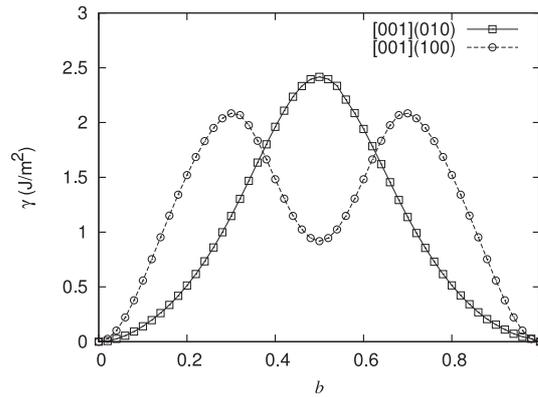


FIG 6.30 – Comparaison des énergies de fautes d’empilement généralisées des systèmes  $[001](010)$  et  $[001](100)$  à 0GPa calculées avec le potentiel THB1.

Cette structure pour la dislocation vis  $[001](100)$  introduite à l’intersection des plans (100), (010) et d’un plan (110) n’est pas compatible avec la structure de coeur stable de la dislocation vis  $[001]$  non-planaire déterminée par Carrez *et al.* (2008). Cette structure de dislocation, déterminée par simulation directe de la structure de coeur de la dislocation vis  $[001]$  montre un étalement de la dislocation dans un plan (100) et deux plans (010). Cette structure stable pour le coeur de dislocation est obtenue lorsque le centre du défaut est placé dans le plan (100), au milieu de deux plans (010). La structure de coeur que nous avons déterminée avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin est dissociée en deux dislocations partielles de vecteurs de Burgers  $1/2[001]$  dans le plan (100). Ces deux dislocations partielles s’étalent dans le plan (100) et un plan (010) sous formes de dislocations fractionnaires.

Comme pour la dislocation introduite à l’intersection des plans (100), (010) et d’un plan (110), la pression a un effet sur l’étalement des dislocations fractionnaires. Ces dislocations fractionnaires sont plus étroites à 10GPa qu’à 0GPa (cf. figure (6.24, page 220)) : ceci est lié, comme précédemment, à la différence d’énergie de fautes d’empilement des systèmes  $[001](100)$  et  $[001](010)$ .

#### Contrainte de Peierls et comportement de la dislocation vis-à-vis de la loi de Schmid.

Nous avons appliqué une contrainte permettant le déplacement de la dislocation  $[001]$  dans le plan (100). Pour le caractère coin planaire et dissocié en deux dislocations partielles, la dislocation glisse pour une contrainte appliquée égale à 140MPa. Par contre, nous avons observé un mécanisme plus complexe pour déplacer la dislocation vis  $[001]$  non-planaire dans son plan de glissement. Ce mécanisme dépend de la pression.

A 0GPa, on peut rapprocher le mécanisme observé sur ces dislocations non-planaires au mécanisme observé sur la dislocation vis  $1/2\langle 111 \rangle$  dans les métaux cubiques centrées (Duesbery *et al.*, 1973; Vitek & Yamaguchi, 1981). Dans ces matériaux, deux contraintes critiques de cisaillement peuvent exister. La *première contrainte critique de cisaillement* est la plus petite contrainte pour laquelle le coeur de la dislocation effectue une translation irréversible dans le réseau. Après cette première étape, aucun mouvement n'est possible jusqu'à ce que la contrainte appliquée atteigne la *seconde contrainte critique de cisaillement* qui permet à la dislocation de se déplacer librement dans le cristal. On associe la contrainte de Peierls à cette *seconde contrainte critique de cisaillement*.

A basse pression, ces deux contraintes critiques de cisaillement sont observées sur les dislocations vis [001] sous l'action d'une contrainte appliquée quel que soit le centre où la dislocation a été introduite :

- Pour la dislocation introduite à l'intersection des plans (100), (010) et d'un plan (110) (*centre 1*), la *première contrainte critique de cisaillement* égale à 2,05GPa fait se déplacer la dislocation dans le plan (100) jusqu'au milieu de deux plans (010) (*centre 2*). L'application de la *seconde contrainte critique de cisaillement*, la contrainte de Peierls, égale à 3,6GPa permet le déplacement libre de la dislocation dans le cristal.
- On observe le même mécanisme pour la dislocation introduite dans le plan (100), au milieu de deux plans (010) (*centre 2*). La *première contrainte critique de cisaillement* égale à 4,1GPa fait se déplacer la dislocation dans le plan (100) jusqu'à l'intersection des plans (100), (010) et d'un plan (110) (*centre 1*). Lorsque la contrainte appliquée atteint la *seconde contrainte critique de cisaillement*, c'est-à-dire la contrainte de Peierls qui est égale à 4,5GPa, la dislocation se déplace librement dans le cristal.

A 10GPa, nous n'observons plus ces deux contraintes critiques de cisaillement. L'application de la contrainte de Peierls sur la dislocation vis [001] introduite au *centre 1* et au *centre 2* transforme le coeur non-planaire en un coeur planaire et permet à la dislocation de se déplacer, sans passer par une étape intermédiaire comme à 0GPa. Quel que soit le centre où la dislocation a été posée, la contrainte de Peierls est égale à 5GPa.

Les dislocations vis non-planaires peuvent présenter un comportement sous contraintes appliquées qui dévie de la loi de Schmid. C'est le cas des dislocations vis  $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$  dans les métaux cubiques centrés : le déplacement de la dislocation n'est pas assujéti à la seule projection du tenseur des contraintes dans le plan de glissement le long du vecteur de Burgers. De plus,

toutes les composantes du tenseur des contraintes peuvent avoir un effet sur la mobilité de telles dislocations vis (Vitek, 1976; Duesbery, 1984; Duesbery *et al.*, 1973).

Nous avons étudié le comportement de la dislocation vis [001] vis-à-vis de la loi de Schmid. Pour cela, nous avons appliqué des contraintes de cisaillement le long du vecteur de Burgers pour différentes orientations de la contrainte par rapport au plan de glissement, le plan (100). Les résultats obtenus aux deux pressions montrent un comportement différent de la dislocation vis-à-vis de la loi de Schmid.

A 0GPa, on observe sur la figure (6.18) que les valeurs de contraintes critiques projetées calculées dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin sont en accord avec la loi de Schmid et Boas pour des angles de sollicitations compris entre  $-20$  et  $+30^\circ$ . On peut alors penser que le comportement de cette dislocation sous contraintes suit le comportement de cette loi. Pour valider cette assertion, nous avons complété l'étude en combinant l'effet d'un cisaillement agissant sur les composantes coin de cette dislocation avec un cisaillement pur le long du vecteur de Burgers dans le plan (100). Les composantes coin de cette dislocation sont négligeables dans la description de la structure de coeur et l'ajout d'un cisaillement agissant sur ces composantes ne doit pas influencer la contrainte de Peierls si on obéit à la loi de Schmid (Ito & Vitek, 2001). C'est le cas ici, où les contraintes de Peierls sont équivalentes pour les deux cas, valant environ 4,5GPa lorsque  $\sigma_{xy}=2,4$ GPa. Cependant, l'absence des tests des contraintes de traction-compression ne nous permet pas, à l'heure actuelle, de conclure de manière définitive sur la validité de la loi de Schmid et Boas sur le comportement de la dislocation vis [001] non-planaire à 0GPa.

Par contre à 10GPa, les contraintes critiques projetées et données par la loi de Schmid ne concordent plus quel que soit l'angle de la sollicitation (figure (6.25), page 220). Le comportement de la dislocation vis [001] dévie de la loi de Schmid et Boas à 10GPa. L'application des composantes du tenseur des contraintes de cisaillement pur le long du vecteur de Burgers non-parallèles au plan de glissement durcissent le système. Par contre l'ajout d'une contrainte qui s'applique sur les composantes coin de la dislocation ne semble pas avoir d'influence sur la contrainte critique de cisaillement. Nous n'avons réalisé qu'une seule mesure : les contraintes de Peierls avec et sans l'ajout d'une contrainte  $\sigma_{xy}$  valent respectivement 4,9 et 5GPa à cette pression.

La différence de comportement de la dislocation vis [001] à 0 et 10GPa vis-à-vis de la loi de Schmid est peut être liée à la différence de mécanisme pour la fermeture du coeur de dislocation.

**Glissement des dislocations [001] dans le plan (100) et dans le plan (010) à 0 et 10GPa.**

A basse pression, les expériences de fluage sur de l'olivine monocristalline à 1000 °C de Phakey *et al.* (1972) mettent en évidence qu'il est plus difficile d'activer le glissement [001](010) par rapport au glissement [001](100). Ceci est en accord avec les calculs de Durinck *et al.* sur les structures de coeur planaire des dislocations [001](010) et [001](100). Les contraintes de Peierls des caractères vis de ces dislocations [001](010) et [001](100) ont été évaluées à 3,1 et 1,3GPa. Ce résultat s'explique par une dissociation planaire de la dislocation [001](100) qui entrainera une mobilité plus importante de cette dislocation par rapport à la dislocation [001](010) non-dissociée.

Les calculs de contraintes de Peierls pour ces dislocations vis [001](100) et [001](010) calculées dans le formalisme du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin ne sont pas en accord avec les expériences de Phakey *et al.* et les résultats de Durinck *et al.*. La structure non-planaire de la dislocation vis [001](100) présente des contraintes de Peierls toujours supérieures par rapport à la contrainte déterminée pour la dislocation vis [001](010) planaire. Carrez *et al.* (2008) suggèrent que la structure non-planaire de la dislocation vis [001] est plus stable que la structure planaire étalée dans le plan (010). De ce fait, pour que la dislocation vis non-planaire glisse dans le plan (010), le coeur de cette dislocation doit se recombinaison sous l'action de la contrainte et de la température. Cette recombinaison nécessaire du coeur de la dislocation peut être une piste d'explication sur la dureté du système [001](010) par rapport au système [001](100) observé expérimentalement.

A haute pression, les expériences de fluage de Raterron *et al.* sur monocristaux d'olivine et de forsterite (Raterron *et al.*, 2007, 2009) ont mis en évidence la facilité du glissement [001](010) par rapport au glissement [100](010) seulement. A l'heure actuelle, le manque de données rhéologiques ne nous donne pas d'informations sur la dureté relative des systèmes de glissement [001](100) et [001](010) à haute pression.

Les calculs de contraintes de Peierls que nous avons réalisé sur les dislocations vis [001] ont montré que le glissement de la dislocation vis [001](010) est facilité avec l'augmentation de pression. Ceci a également été mis en évidence par Durinck *et al.* (2007). Dans ces deux études, la dislocation [001] glissant dans le plan (010) est planaire et non-dissociée à haute pression. De même, notre étude réalisée avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin et celle de Durinck *et al.* avec la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro montrent un durcissement du glissement [001] dans le plan (100) avec l'augmentation de pression. Ce durcissement du

système  $[001](100)$  a pour origine l'augmentation de l'énergie de faute d'empilement généralisées du système de glissement  $[001](100)$  avec la pression : les structures de coeurs des dislocations sont plus étroites à cette pression et conduisent à des contraintes de Peierls plus élevées quel que soit le modèle utilisé. Notre étude montre que le glissement  $[001](100)$  est plus difficile que le glissement  $[001](010)$  quelle que soit la pression : ceci est dû aux structures de coeur planaires et non-planaires des dislocations  $[001](010)$  et  $[001](100)$ .

## 6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé les propriétés de coeurs ainsi que les contraintes de Peierls des dislocations  $[100](010)$ ,  $[100](001)$ ,  $[001](100)$  et  $[001](010)$  de la forsterite, le pôle magnésien de l'olivine  $\alpha - (Mg_x, Fe_{1-x})_2SiO_4$  à 0GPa. Nous avons étendu le calcul à 10GPa pour la dislocation  $[001]$ -caractère vis. Nous avons utilisé un modèle de Peierls-Nabarro généralisé couplé à des calculs de surfaces d'énergies de fautes d'empilement généralisées avec le potentiel empirique THB1. Nous avons mis en évidence les points suivants :

- Le glissement dans le plan (010) est toujours planaire. Les structures de coeur des dislocations  $[100](010)$  et  $[001](010)$  restent confinées dans leur plan de glissement. De ce fait, ces dislocations présentent des frictions de réseau faible. On peut noter de plus que le glissement des dislocations vis  $[001](010)$  est facilité avec l'augmentation de pression.
- Les dislocations vis  $[001](100)$  et  $[100](001)$  présentent des structures de coeur non-planaires. Ces dislocations présentent des frictions de réseau plus élevées que les dislocations glissant dans le plan (010).
- Le comportement de la dislocation vis  $[001](100)$  non-polaire vis-à-vis de la loi de Schmid est différent entre 0 et 10GPa. La dislocation sous contrainte de cisaillement dévie de cette loi à 10GPa. Ceci peut être relié à des mécanismes différents de fermeture du coeur de la dislocation à ces deux pressions.



# Conclusion



Au cours de ce travail, nous avons déterminé des structures de coeur de dislocations dans des minéraux du manteau terrestre à l'aide du modèle de Peierls-Nabarro dans sa formulation unidimensionnelle et dans une formulation généralisée couplée aux éléments diffus de Galerkin. Les structures de coeur issues de ce modèle sont le résultat d'une compétition entre l'énergie élastique et l'énergie de désaccord de la dislocation. Cette énergie de désaccord a été déterminée à partir des énergies de fautes d'empilement généralisées qui consistent à calculer des barrières d'énergies associées au cisaillement du cristal dans un plan cristallographique donné pour une, deux ou toutes les directions du plan. L'énergie de fautes d'empilement généralisées a été calculée avec des techniques *ab initio* ou à partir de potentiels empiriques développés pour les oxydes. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro permet également d'évaluer la contrainte de Peierls, contrainte nécessaire pour mettre en mouvement la dislocation à 0K.

Nous résumons ici les principaux résultats obtenus au cours de ce travail :

- L'étude des structures de coeur des dislocations et le calcul des contraintes de Peierls avec la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro dans les phases  $MgGeO_3$  à 120GPa et  $CaIrO_3$  à 0GPa nous a permis d'évaluer l'approche des analogues isostructuraux stables à basse pression pour étudier la plasticité de la phase  $MgSiO_3$  post-perovskite. Ce silicate est susceptible d'être présent à la frontière noyau-manteau et n'est stable qu'à des pressions et températures extrêmes. Les énergies de fautes d'empilement généralisées introduites dans le modèle de Peierls-Nabarro ont été calculées *ab initio*. Les structures de coeurs que nous avons déterminées sont similaires dans les trois phases. Par contre, les contraintes de Peierls calculées montrent que le système de glissement le plus facile dépend de la phase étudiée. Nous avons mis ici en évidence l'influence de la cristalochimie sur la plasticité des phases de structure post-perovskite. Les orientations préférentielles des polycristaux déformés ont été prédites avec un modèle visco-plastique auto-cohérent (VPSC) dans lequel nous avons introduit les contraintes de Peierls afin de traduire le comportement relatif des différents systèmes de glissement. L'utilisation de ce type de simulation a montré que les textures de déformation développée par  $MgSiO_3$  et  $CaIrO_3$  seraient similaires. Néanmoins, les textures calculées avec le modèle VPSC sont différentes des textures observées expérimentalement. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel ne permet pas de révéler de possibles dissociations des dislocations avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ainsi que des étalements non-planaires pour les dislocations. L'application d'un modèle généralisé, qui tient compte de ces possibles structures de coeurs

pourrait alors modifier notre vision de la plasticité de la phase post-perovskite et mieux rendre compte des observations expérimentales.

- La première application d'un modèle de Peierls-Nabarro généralisé, en l'occurrence le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, pour l'étude des dislocations dans les minéraux a été réalisée sur la wadsleyite  $\beta - Mg_2SiO_4$  à 15GPa. La wadsleyite est une phase majeure dans la partie supérieure de la zone de transition. Les surfaces d'énergies de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  utilisées pour calculer l'énergie de désaccord des dislocations dans le cadre du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin ont été calculées avec un potentiel empirique. Le calcul des  $\gamma - surfaces$  a mis en évidence la réponse facile d'un plan cristallographique face à un cisaillement plastique rigide : le plan (101). Six systèmes de glissement ont été étudiés pour ce minéral et les dislocations associées ont été comparées aux microstructures observées en microscopie électronique en transmission. Avec cette technique d'observation, deux systèmes de glissement faciles ont été identifiés qui participent à un niveau équivalent à la plasticité de la wadsleyite. Les calculs de contraintes de Peierls que nous avons effectués sur ces dislocations ont également permis de mettre en évidence le système de glissement le plus facile : le système  $1/2[111](101)$ . Enfin, l'étude de la wadsleyite se place dans la problématique plus globale de l'étude des structures de coeur de dislocations présentant un grand module de vecteur de Burgers. Ces dislocations présentent une énergie élastique très importante. La dislocation de vecteur de Burgers [010] de la wadsleyite présente un module supérieur à 1nm et minimise son énergie élastique en se dissociant en quatre dislocations partielles ayant des vecteurs de Burgers colinéaires, distribuées dans plusieurs plans cristallographiques. L'exemple de la wadsleyite montre que des dislocations possédant un grand vecteur de Burgers peuvent participer à la déformation plastique en se dissociant pour diminuer leur énergie élastique.
- Les structures de coeur des dislocations du diopside  $CaMgSi_2O_6$ , un représentant de la famille des clinopyroxènes, ont été déterminées à 0 et 10GPa avec le modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. La description de la dislocation de vecteur de Burgers [001] glissant dans le plan (100) a été étendue avec un modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Les énergies de fautes d'empilement généralisées ont été calculées avec un potentiel empirique pour ce minéral. Les structures de coeur des dislocations calculées avec le modèle ont été confrontées aux observations réalisées en microscopie électronique en transmission. Les résultats obtenus ne permettent pas de rendre compte de toutes les microstructures

observées mais éclairent cependant certains aspects de la plasticité du diopside. Nous touchons toutefois les limites du choix du modèle utilisé. Nous avons suggéré la possibilité pour les dislocations  $[100]$ ,  $[010]$  et  $1/2[110]$  d'adopter une configuration de dissociation de montée, plus compatible avec les observations. De même, l'utilisation de la formulation unidimensionnelle du modèle de Peierls-Nabarro suggère une friction de réseau élevée sur la dislocation  $[001](100)$  qui n'explique pas la facilité de ce système de glissement observée expérimentalement. Nous avons utilisé le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin pour décrire ces dislocations et mis en évidence une déviation du cisaillement de la direction du vecteur de Burgers. L'effet de la pression a été testé en effectuant les calculs à 0 et 10GPa : elle semble avoir peu d'effet sur le glissement des dislocations du diopside.

- La forsterite  $\alpha - Mg_2SiO_4$  a également été étudiée avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin. Ce minéral avait fait l'objet précédemment d'une modélisation des structures de coeur des dislocations avec un modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel. Nous avons déterminé les structures de coeurs et les contraintes de Peierls de quatre systèmes de glissement à 0GPa. Nous avons étendu le calcul à 10GPa pour les dislocations vis de vecteurs de Burgers  $[001]$ . L'apport du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin a clairement été mis en évidence par rapport à l'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel grâce à la détermination de structures de coeur de dislocations dissociées avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires et la modélisation de structures de coeur non-planaires, notamment la dislocation vis  $[001]$ . La réponse de cette dislocation vis à l'action de différentes composantes du tenseur de contraintes a également été testée : nous avons montré une déviation du comportement de la dislocation vis-à-vis de la loi de Schmid et Boas en fonction de la pression. Nous pouvons alors nous poser la question de la pertinence des modélisations de type VPSC basés sur la validité de la loi de Schmid lorsque la réponse de la dislocation sous l'action d'une contrainte appliquée dévie de cette loi.

La modélisation des structures de coeur des dislocations dans les minéraux a déjà été réalisée à plusieurs reprises avec le modèle de Peierls-Nabarro mais uniquement dans la formulation unidimensionnelle du modèle. Cette formulation unidimensionnelle ne permet que la description de dislocations dont le cisaillement se développe dans une seule direction cristallographique. Les dislocations étudiées dans cette formulation ne peuvent être que planaires non-dissociées ou dissociées avec des vecteurs de Burgers colinéaires. L'originalité de ce travail réside dans l'utilisation d'un modèle de Peierls-Nabarro généralisé, le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin,

pour déterminer les structures de coeur des dislocations dans les minéraux. Le cisaillement induit par la dislocation peut se répartir sur l'ensemble du plan de glissement ou même dans plusieurs plans. Ainsi, nous avons pu mettre en évidence la possibilité pour les dislocations de se dissocier avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ou bien d'adopter une structure de coeur non-planaire. Il faut noter que les structures des dislocations planaires non-dissociées ou dissociées avec des vecteurs de Burgers colinéaires obtenues avec le modèle généralisé sont similaires à celles obtenues avec le modèle unidimensionnel. Quelle que soit la formulation utilisée, le modèle de Peierls-Nabarro nécessite l'introduction des énergies de fautes d'empilement généralisées  $\gamma$  pour obtenir une description générale des coeurs de dislocations. Ces énergies ont été calculées avec des techniques *ab initio* ou avec des potentiels empiriques. Ces potentiels empiriques reproduisent les formes des courbes  $\gamma$  en fonction du cisaillement, mais présentent des énergies supérieures par rapport à des calculs d'énergie *ab initio*. Ceci entraîne des structures de coeur de dislocations plus étroites et des contraintes de Peierls plus élevées qu'avec l'utilisation exclusive de techniques *ab initio* pour calculer l'énergie de fautes d'empilement généralisées.

Nous avons toujours tenu durant ce travail à mettre en parallèle les résultats obtenus par simulation numérique avec des observations expérimentales. Les comparaisons modèles/expériences ont été effectuées à deux niveaux :

- Tout d'abord, nous avons comparé les structures de coeur de dislocation calculées avec le modèle de Peierls-Nabarro avec les microstructures observées en microscopie électronique en transmission. Cette comparaison se base sur le caractère dissocié ou non de la dislocation. Le calcul de la structure de coeur de la dislocation permet d'obtenir des informations supplémentaires, notamment sur l'extension du coeur ainsi que sur d'éventuelles dissociations avec une distance de séparation entre dislocations partielles inférieure à la résolution des images accessibles en microscopie électronique en transmission en contraste de diffraction. Notons cependant que la comparaison directe entre les structures de coeurs et la microscopie électronique peut se faire maintenant à partir de clichés obtenus en microscopie électronique à haute résolution. Ces données sont assez peu nombreuses aujourd'hui.

Il faut noter que le modèle de Peierls-Nabarro ne permet pas la détermination de toutes les configurations de structures de coeur. Ce modèle révèle les structures de coeurs dans des configurations de glissement uniquement. Dans certains cas, d'autres structures de dislocations peuvent apparaître, comme les configurations de dissociation de montée.

- Le modèle que nous avons utilisé permet d'estimer l'activité des systèmes de glissement

des minéraux en supposant que celle-ci est contrôlée par la friction de réseau. La caractérisation d'un système de glissement en microscopie électronique en transmission témoigne de sa participation dans la plasticité. Les valeurs de contraintes de Peierls que nous avons calculées permettent de classer les systèmes de glissement en fonction de leurs facilités respectives. Nous pouvons alors mettre en parallèle ce classement des systèmes de glissement avec celui déduit des observations en microscopie électronique en transmission. Dans le cas des polycristaux, nous pouvons comparer les textures de déformation observées avec celles calculées à partir de modèles visco-plastiques auto-cohérents (VPSC). Dans ces modèles, les données d'entrée sont les contraintes critiques d'activation des systèmes de glissement que nous estimons à partir des contraintes de Peierls. Il faut alors faire attention à bien utiliser un modèle de Peierls-Nabarro généralisé pour déterminer la contrainte de Peierls de dislocations dont la structure de coeur est complexe. La contrainte de Peierls des dislocations est dépendante de la structure de coeur et peut avoir une influence non-négligeable sur les textures de déformation obtenue à partir de modèles VPSC

Ce travail ouvre sur une nouvelle vision des structures de coeurs et des mécanismes de mobilité des dislocations dans les minéraux de la Terre profonde. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin a mis en évidence la possibilité pour les dislocations des minéraux du manteau d'adopter des structures de coeurs complexes. L'application de ce modèle peut être réalisée sur d'autres minéraux, tels que les phases perovskites ou le périclase  $MgO$  où l'application du modèle unidimensionnel a déjà été réalisé. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin permettrait d'obtenir une description plus complète des mécanismes de mobilité des dislocations dans ces phases. A l'avenir, ces structures de coeurs déterminées avec le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin seront à rapprocher des structures de coeur obtenues par simulations directes à l'échelle atomique. Cette dernière technique permet la détermination de la structure du défaut de plus basse énergie, donnée inaccessible avec le modèle de Peierls-Nabarro. La comparaison entre les deux méthodes permettra de confirmer les résultats établis dans ce travail et d'étudier de nouvelles structures de coeurs possibles pour les dislocations.

La facilité relative des systèmes de glissement des minéraux que nous avons déterminée à partir du calcul de la contrainte de Peierls des dislocations a des implications géophysiques. Comme nous l'avons réalisé dans l'étude des phases post-perovskite, les contraintes de Peierls peuvent être introduites dans des modèles visco-plastiques qui simulent les orientations préférentielles des cristaux déformés. Ces orientations préférentielles des cristaux sont une cause possible de

---

l'anisotropie sismique observée dans le manteau terrestre.

# Bibliographie

- C Agee. *Phase transformations and seismic structure in the upper mantle and transition zone*, volume **37** des *Reviews in Mineralogy*, chapitre 5, pages 166–203. Mineralogical Society of America, 1998.
- E Amiguet. *Déformation expérimentale de diopside dans les conditions de pression et température du manteau supérieur*. Thèse de doctorat, Université Lille 1 - Sciences et Technologie, 2009.
- D Andrault, M Bouhifd, J Itie, & P Richet. Compression and amorphization of  $(Mg, Fe)_2SiO_4$  olivines : An X-ray diffraction study up to 70 GPa. *Physics and Chemistry of Minerals*, **22** : 99–107, 1995.
- Q Bai & D Kohlstedt. High-temperature creep of olivine single crystals. 2. dislocation structures. *Tectonophysics*, **206** :1–29, 1992.
- Q Bai, S Mackwell, & D Kohlstedt. High-temperature creep of olivine single crystals 1. mechanical results for buffered samples. *Journal of Geophysical Research*, **96**(B2) :2441–2463, 1991.
- J Bascou, A Tommasi, & D Mainprice. Plastic deformation and development of clinopyroxene lattice preferred orientations in eclogites. *Journal of Structural Geology*, **24** :1357–1368, 2002.
- C Bina. Mantle discontinuities. *Reviews of Geophysics Supplement*, pages 783–793, 1991.
- P Blöchl. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, **50**(24) :17953–17979, 1994.
- J Bolland & T Tullis. *Deformation behavior of wet and dry clinopyroxenite in the brittle to ductile transition region*, volume **36** des *Geophysical Monograph*, pages 35–49. AGU, 1986.
- P Bretheau, J Castaing, J Rabier, & P Veyssiere. Mouvement des dislocations et plasticité à haute température des oxydes binaires et ternaires. *Advances in Physics*, **28** :835–1014, 1979.

- J Brodholt. *Ab initio* calculations on point defects in forsterite  $Mg_2SiO_4$  and implications for diffusion and creep. *American Mineralogist*, **82** :1049–1053, 1997.
- J Brodholt, A Patel, & K Refson. An *ab initio* study of the compressional behavior of forsterite. *American Mineralogist*, **81** :257–260, 1996.
- F Brunet, D Andrault, & G Chazot. *La Terre interne*. Vuibert, 2007.
- V Bulatov & W Cai. *Computer simulations of dislocations*. Oxford University press, 2006.
- V Bulatov, W Cai, & R Baran. Geometric aspects of the ideal shear resistance in simple crystal lattices. *Philosophical Magazine*, **86** :3847–3859, 2006.
- V Bulatov & E Kaxiras. Semidiscrete variational Peierls framework for dislocation core properties. *Physical Review Letters*, **78**(22) :4221–4224, 1997.
- J Cai, C Lu, P Yap, & Y Wang. How to affect stacking fault energy and structure by atom relaxation. *Applied Physics Letters*, **81**(19) :3543–3545, 2002.
- W Cai, V Bulatov, J Chang, J Li, & S Yip. *Dislocation core effects on mobility*, volume **12** des *Dislocations in solids*, chapitre 64, pages 3–78. Elsevier, 2004.
- M Cameron, S Sueno, C Prewitt, & J Papike. High temperature crystal chemistry of acmite, diopside, hedenbergite, jadeite, spodumene and ureyite. *American Mineralogist*, **58** :594–618, 1973.
- P Carrez, P Cordier, D Mainprice, & A Tommasi. Slip systems and plastic shear anisotropy in  $Mg_2SiO_4$  ringwoodite : insights from numerical modelling. *European Journal of Mineralogy*, **18** :149–160, 2006.
- P Carrez, D Ferré, & P Cordier. Implications for plastic flow in the deep mantle from modelling dislocations in  $MgSiO_3$  minerals. *Nature*, **446** :68–70, 2007a.
- P Carrez, D Ferré, & P Cordier. Peierls-Nabarro model for dislocations in  $MgSiO_3$  post-perovskite calculated at 120 GPa from first principles. *Philosophical Magazine*, **87**(22) :3229–3247, 2007b.
- P Carrez, D Ferré, & P Cordier. Peierls-Nabarro modelling of dislocation in  $MgO$ . *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **17** :035010, 2009.

- P Carrez, A Walker, A Metsue, & P Cordier. Evidence from numerical modelling for 3D spreading of [001] screw dislocations in  $Mg_2SiO_4$  forsterite. *Philosophical Magazine*, **88**(16) :2477–2485, 2008.
- N Carter & H Ave'Lallemant. High temperature flow of dunite and peridotite. *Bulletin of the Geological Society of America*, **81** :2181–2202, 1970.
- O Castelnau, D Blackman, R Lebensohn, & P Castaneda. Micromechanical modeling of the viscoplastic behavior of olivine. *Journal of Geophysical Research*, **113** :B09202, 2008.
- D Ceperley & B Alder. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Physical Review Letters*, **45**(7) :566–569, 1980.
- J Christian & V Vitek. Dislocations and stacking faults. *Reports on Progress in Physics*, **33** : 307–411, 1970.
- P Cordier. *Dislocations and slip systems of mantle minerals*, volume **51** des *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, chapitre 6, pages 137–179. Mineralogical Society of America, 2002.
- P Cordier, H Couvy, S Merkel, & D Weidner. *Plastic deformation of minerals at high pressure :Experimental techniques*, volume **7** des *EMU Notes in mineralogy*, chapitre 14, pages 339–355. EMU, 2005.
- A Cottrell. *Dislocations and plastic flow in crystals*. Oxford at the Clarendon press, 1953.
- H Couvy, D Frost, F Heidelbach, K Nylas, T Ungar, S Mackwell, & P Cordier. Shear deformation experiments of forsterite at 11 GPa-1400 °C in the multianvil apparatus. *European Journal of Mineralogy*, **16** :877–889, 2004.
- M Darot & Y Gueguen. High-temperature creep of forsterite single crystals. *Journal of Geophysical Research*, **86** :6219–6234, 1981.
- C Denoual. Dynamic dislocation modeling by combining Peierls-Nabarro and Galerkin methods. *Physical Review B*, **70** :024106, 2004.
- C Denoual. Modeling dislocation by coupling Peierls-Nabarro and element-free Galerkin methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **196** :1915–1923, 2007.
- B Dick & A Overhauser. Theory of the dielectric constants of alkali halide crystals. *Physical Review*, **112**(1) :90–103, 1958.

- J-C Doukhan, N Doukhan, L Nazé, & J Van Duysen. Défauts de réseau et plasticité cristalline dans les pyroxènes : Une revue. *Bulletin de minéralogie*, **109** :377–394, 1986.
- M Duesbery. On non-glide stresses and their influence on the screw dislocation core in body-centred cubic metals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, **392** :175–197, 1984.
- M Duesbery & V Vitek. Plastic anisotropy in BCC transition metals. *Acta Materialia*, **46** : 1481–1492, 1998.
- M Duesbery, V Vitek, & D Bowen. The effect of shear stress on the screw dislocation core structure in body-centred cubic lattices. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, **332** :85–111, 1973.
- C Dupas, N Doukhan, & J-C Doukhan. Analytical electron microscopy of a synthetic peridotite experimentally deformed in the  $\beta$  olivine stability field. *Journal of Geophysical Research*, **99** : 15821–15832, 1994.
- C Dupas-Bruzek, T Sharp, D Rubie, & W Durham. Mechanisms of transformation and deformation in  $Mg_{1.8}Fe_{0.2}SiO_4$  olivine and wadsleyite under non-hydrostatic stress. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **108** :33–48, 1998.
- W Durham, C Froidevaux, & O Jaoul. Transient and steady-state creep of pure forsterite at low stress. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **19**(3) :263–274, 1979.
- W Durham, C Goetze, & B Blake. Plastic flow of oriented single crystals of olivine 2. observations and interpretations of the dislocation structure. *Journal of Geophysical Research*, **82** :5755–5770, 1977.
- J Durinck. *Modélisation de la plasticité de la forsterite par calculs à l'échelle atomique et par dynamique des dislocations*. Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologie de Lille, 2005.
- J Durinck, P Carrez, & P Cordier. Application of the Peierls-Nabarro model to dislocations in forsterite. *European Journal of Mineralogy*, **19** :631–639, 2007.
- J Durinck, A Legris, & P Cordier. Influence of crystal chemistry on ideal plastic shear anisotropy in forsterite : First principle calculations. *American Mineralogist*, **90** :1072–1077, 2005a.

- J Durinck, A Legris, & P Cordier. Pressure sensitivity of olivine slip systems : first-principle calculations of generalised stacking faults. *Physics and Chemistry of Minerals*, **32** :646–654, 2005b.
- A Dziewonski & D Anderson. Preliminary reference Earth model. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **25** :297–356, 1981.
- J Eshelby. Lxxxii. edge dislocations in anisotropic materials. *Philosophical Magazine (Series 7)*, pages 903–913, 1949.
- Y Fei, S Saxena, & A Navrotsky. Internally consistent thermodynamic data and equilibrium phase relations for compounds in the system  $MgO - SiO_2$  at high pressure and high temperature. *Journal of Geophysical Research*, **95** :6915–6928, 1990.
- D Ferré, P Carrez, & P Cordier. First principles determination of dislocations properties of  $MgSiO_3$  perovskite at 30gpa based on the Peierls-Nabarro model. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **163** :283–291, 2007.
- D Ferré, P Cordier, & P Carrez. Dislocation modeling in calcium silicate perovskite based on the Peierls-Nabarro model. *American Mineralogist*, **94** :135–142, 2009.
- J Friedel. *Dislocations*. Pergamon press, 1964.
- K Fujino, S Sasaki, Y Takeuchi, & R Sadanaga. X-ray determination of electron distributions in forsterite, fayalite and tephroite. *Acta Crystallographica Section B : Structural Science*, **37** : 513–518, 1981.
- R Gaboriaud, M Darot, Y Gueguen, & J Woïrgard. Dislocations in olivine indented at low temperatures. *Physics and Chemistry of Minerals*, **7** :100–104, 1981.
- J Gale. GULP : A computer program for the symmetry-adapted simulation of solids. *Journal of the Chemical Society*, **93**(4) :629–637, 1997.
- A Gatzemeier & K Wright. Computer modelling of hydrogen defects in the clinopyroxenes diopside and jadeite. *Physics and Chemistry of Minerals*, **33** :115–125, 2006.
- D Green & A Ringwood. Mineral assemblages in a model mantle composition. *Journal of Geophysical Research*, **68**(3) :937–945, 1963.

- R Gröger, A Bailey, & V Vitek. Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten : I. atomistic studies of the and glide of  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  screw dislocations at 0K. *Acta Materialia*, **56**(19) :5401–5411, 2008a.
- R Gröger, V Racherla, J Bassani, & V Vitek. Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten : II. yield criterion for single crystals base on atomistic studies of  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  screw dislocations. *Acta Materialia*, **56**(19) :5412–5425, 2008b.
- Y Gueguen & M Darot. Les dislocations dans la forsterite déformée à haute température. *Philosophical Magazine A*, **45** :419–442, 1982.
- J Hartford, B von Sydow, G Wahnström, & B Lundqvist. Peierls barriers and stresses for edge dislocations in Pd and Al calculated from first principles. *Physical Review B*, **58**(5) :2487–2496, 1998.
- G Helffrich & B Wood. The Earth's mantle. *Nature*, **412** :501–507, 2001.
- K Hirose & Y Fujita. Clapeyron slope of the post-perovskite phase transition in  $CaIrO_3$ . *Geophysical Research Letters*, **32** :L13313, 2005.
- K Hirose, K Kawamura, Y Ohishi, S Tateno, & N Sata. Stability and equation of state of  $MgGeO_3$  post-perovskite phases. *American Mineralogist*, **90** :262–265, 2005.
- G Hirth. *Laboratory constraints on the rheology of the upper mantle*, volume **51** des *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, chapitre 4, pages 97–120. Mineralogical Society of America, 2002.
- J Hirth & J Lothe. *Theory of dislocations*. 1968.
- P Hohenberg & W Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, **136** :864–871, 1964.
- H Horiuchi & H Sawamoto.  $\beta - Mg_2SiO_4$ ; single-crystal x-ray diffraction study. *American Mineralogist*, **66** :568–575, 1981.
- J Ingrin, N Doukhan, & J-C Doukhan. Dislocation glide systems in diopside single crystals deformed at 800-900 ° C. *European Journal of Mineralogy*, **4** :1291–1302, 1992.
- K Ito & V Vitek. Atomistic study of non-Schmid effects in the plastic yielding of bcc metals. *Philosophical Magazine A*, **81** :1387–1407, 2001.

- J Jaffe, J Snyder, Z Lin, & A Hess. LDA and GGA calculations for high-pressure phase transitions in ZnO and MgO. *Physical Review B*, **62**(3) :1660–1665, 2000.
- C Jia, A Thust, & K Urban. Atomic-scale analysis of the oxygen configuration at a  $SrTiO_3$  dislocation core. *Physical Review Letters*, **95** :225506, 2005.
- P Jochym, K Parlinski, & P Krzywiec. Elastic tensor of the forsterite ( $Mg_2SiO_4$ ) under pressures. *Computational Materials Science*, **29** :414–418, 2004.
- B Joós & M Duesbery. The Peierls stress of dislocations : An analytic formula. *Physical Review Letters*, **78**(2) :266–269, 1997.
- B Joós, Q Ren, & M Duesbery. Peierls-Nabarro model of dislocations in silicon with generalized stacking-fault restoring forces. *Physical Review B*, **50**(9) :5890–5898, 1994.
- H Jung & S Karato. Water-induced fabric transitions in olivine. *Science*, **293** :1460–1463, 2001.
- H Jung, W Mo, & H Green. Upper mantle seismic anisotropy resulting from pressure-induced slip transition in olivine. *Nature Geoscience*, **2** :73–77, 2008.
- S Karato. Plasticity-crystal structure systematics in dense oxides and its implications for the creep strength of the Earth's deep interior : A preliminary result. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **55** :234–240, 1989.
- S Karato. On the Lehmann discontinuity. *Geophysical Research Letters*, **19**(22) :2255–2258, 1992.
- S Karato, D Rubie, & H Yan. Dislocation recovery in olivine under deep upper mantle conditions-implications for creep and diffusion. *Journal of Geophysical Research*, **98**(B6) :9761–9768, 1993.
- S Karato & P Wu. Rheology of the upper mantle : a synthesis. *Science*, **260** :771–778, 1993.
- B Kiefer, L Stixrude, J Hafner, & G Kresse. Structure and elasticity of wadsleyite at high pressures. *American Mineralogist*, **86** :1387–1395, 2001.
- S Kirby & J Christie. Mechanical twinning in diopside  $Ca(Mg, Fe)Si_2O_6$  : Structural mechanism and associated crystal defects. *Physics and Chemistry of Minerals*, **1** :137–163, 1977.
- D Kohlstedt & C Goetze. Low-stress high-temperature creep in olivine single crystals. *Journal of Geophysical Research*, **79** :2045–2051, 1974.

- D Kohlstedt, C Goetze, W Durham, & J Sande. New technique for decorating dislocations in olivine. *Science*, **191** :1045–1046, 1976.
- D Kohlstedt, H Nichols, & P Hornack. The effect of pressure on the rate of dislocation recovery in olivine. *Journal of Geophysical Research*, **85** :31223130, 1980.
- W Kohn & L Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, **140**(4A) :1133–1138, 1965.
- H Koizumi, Y Kamimura, & T Suzuki. Core structure of a screw dislocation in a diamond-like structure. *Philosophical Magazine A*, **80**(3) :609–620, 2000.
- J Kolle & J Blacic. Deformation of single-crystal clinopyroxenes : 1. mechanical twinning in diopside and hedenbergite. *Journal of Geophysical Research*, **87**(B5) :4019–4034, 1982.
- J Kolle & J Blacic. Deformation of single-crystal clinopyroxenes (2) : Dislocation-controlled flow processes in hedenbergite. *Journal of Geophysical Research*, **88**(B3) :2381–2393, 1983.
- G Kresse & J Furthmüller. Efficiency of *ab initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, **6** :15–50, 1996a.
- G Kresse & J Furthmüller. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, **54**(16) :11169–11186, 1996b.
- F Kroupa & L Lejček. Splitting of dislocations in the Peierls-Nabarro models. *Czechoslovak Journal of Physics*, 1972.
- A Kubo, B Kiefer, G Shen, V Prakapenka, & R Cava. Stability and equation of state of the post-perovskite phase in  $MgGeO_3$  to 2 Mbar. *Geophysical Research Letters*, **33**(10) :699–709, 2006.
- H Avé Lallemant. Experimental deformation of diopside and websterite. *Tectonophysics*, **48** : 1–27, 1978.
- T Lay & E Garnero. *Reconciling the post-perovskite phase with seismological observations of lowermost mantle structure*, volume **174** des *Geophysical Monograph*, pages 129–153. AGU, 2007.

- T Lay, Q Williams, & E Garnero. The core-mantle boundary layer and deep Earth dynamics. *Nature*, **392** :461–468, 1998.
- R Lebensohn & C Tome. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals : application to zirconium alloys. *Acta Metallurgica Et Materialia*, **41**(9) :2611–2624, 1993.
- L Lejček & F Kroupa. Peierls-Nabarro model of non-planar screw dislocation cores. *Czechoslovak Journal of Physics*, **26** :528–537, 1976.
- L Levien, D Weidner, & C Prewitt. Elasticity of diopside. *Physics and Chemistry of Minerals*, **4** :105–113, 1979.
- G Lewis & C Catlow. Potential models for ionic oxides. *J. Phys. C : Solid State Phys*, **18** : 1149–1161, 1985.
- G Lu. *The Peierls-Nabarro model of dislocations : A venerable theory and its current development*, volume **1** des *Handbook of materials modeling*, pages 1–19. Springer, 2005.
- G Lu, V Bulatov, & N Kioussis. Dislocation constriction and cross-slip : An *ab initio* study. *Physical Review B*, **66** :144103, 2002.
- G Lu, V Bulatov, & N Kioussis. A non-planar Peierls-Nabarro model and its application to dislocation cross-slip. *Philosophical Magazine*, **83**(31-34) :3539–3548, 2003.
- G Lu, N Kioussis, V Bulatov, & E Kaxiras. Generalized-stacking-fault energy surface and dislocation properties of aluminum. *Physical Review B*, **62**(5) :3099–3108, 2000.
- S Mackwell, D Kohlstedt, & M Paterson. The role of water in the deformation of olivine single crystals. *Journal of Geophysical Research*, **90**(B13) :11319–11333, 1985.
- M Madon & J-P Poirier. Transmission electron microscope observation of  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$   $(Mg, Fe)_2SiO_4$  in shocked meteorites : planar defect and polymorphic transitions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **33** :31–44, 1983.
- D Mainprice, G Barruol, & W Ben Ismail. *The seismic anisotropy of the Earth's mantle : From single crystal to polycrystal*, volume **117** des *Geophysical Monograph*, pages 237–264. AGU, 2000.

- D Mainprice, A Tommasi, H Couvy, & P Cordier. Pressure sensitivity of olivine slip systems and seismic anisotropy of Earth's upper mantle. *Nature*, **433** :731–733, 2005.
- H Mao & R Hemley. *New windows on the Earth's deep interior*, volume **37** des *Reviews in Mineralogy*, chapitre 1, pages 1–32. Mineralogical Society of America, 1998.
- M Matsui & W Busing. Calculation of the elastic constants and high-pressure properties of diopside,  $CaMgSi_2O_6$ . *American Mineralogist*, **69** :1090–1095, 1984.
- D McKenzie & R Parker. The North Pacific : an example of tectonics on a sphere. *Nature*, **216** : 1276–1281, 1967.
- S Merkel, A Kubo, L Miyagi, S Speziale, T Duffy, H Mao, & H Wenk. Plastic deformation of  $MgGeO_3$  post-perovskite at lower mantle pressures. *Science*, **311** :644–646, 2006.
- S Merkel, A McNamara, A Kubo, & S Speziale. Deformation of  $(Mg, Fe)SiO_3$  post-perovskite and D'anisotropy. *Science*, **316** :1729–1732, 2007.
- A Metsue, P Carrez, D Mainprice, & P Cordier. Numerical modelling of dislocations and deformation mechanisms in  $CaIrO_3$  and  $MgGeO_3$  post-perovskites- Comparison with  $MgSiO_3$  post-perovskites-. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **174** :165–173, 2009.
- C Miranda & S Scandolo. Computational materials science meets geophysics : dislocations and slip planes of MgO. *Computer Physics Communications*, **169**(1-3) :24–27, 2005.
- TE Mitchell & AH Heuer. *Dislocations and mechanical properties of ceramics*, volume **12** des *Dislocations in Solids*, pages 339–402. Elsevier, 2004.
- L Miyagi, N Nishiyama, Y Wang, A Kubo, D West, R Cava, T Duffy, & H Wenk. Deformation and texture development in  $CaIrO_3$  post-perovskite phase up to 6GPa and 1300K. *Earth and Planetary Science Letters*, **268** :515–525, 2008.
- N Miyajima, K Ohgushi, M Ichihara, & T Yagi. Crystal morphology and dislocation microstructures of  $CaIrO_3$  : A TEM study of an analogue of the  $MgSiO_3$  post-perovskite phase. *Geophysical Research Letters*, **33** :L12302, 2006.
- N Miyajima & N Walte. Burgers vector determination in deformed perovskite and post-perovskite of  $CaIrO_3$  using thickness fringes in weak-beam dark-field images. *Ultramicroscopy*, **109** :683–692, 2009.

- A Molinari, G Canova, & S Azhy. A self-consistent approach of the large deformation crystal polycrystal viscoplasticity. *Acta Metallurgica*, **35** :2983–2994, 1987.
- H Monkhorst & J Pack. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, **13** (12) :5188–5192, 1976.
- J Montagner & L Guillot. *Seismic anisotropy and global geodynamics*, volume **51** des *Reviews in Mineralogy and Geochemistry*, chapitre 12, pages 353–385. Mineralogical Society of America, 2002.
- J Montagner & B Kennett. How to reconcile body-wave and normal-mode reference Earth models. *Geophysical Journal International*, **125**(1) :229–248, 1996.
- J Morgan & P Shearer. Seismic constraints on mantle flow and topography of the 660-km discontinuity : evidence for whole-mantle convection. *Nature*, **365** :506–511, 1993.
- O Mryasov, Y Gornostyrev, & A Freeman. Generalized stacking-fault energetics and dislocation properties : Compact versus spread unit-dislocation structure in TiAl and CuAu. *Physical Review B*, **58**(18) :11927–11932, 1998.
- M Murakami, K Hirose, K Kawamura, N Sata, & Y Ohishi. Post-perovskite phase transition in  $MgSiO_3$ . *Science*, **304** :855–858, 2004.
- F Nabarro. Dislocations in a simple cubic lattice. *Proceedings of the Physical Society*, **59** : 256–272, 1947.
- A Ngan. A generalized Peierls-Nabarro model for nonplanar screw dislocation cores. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**(6) :903–921, 1997.
- K Niwa, T Yagi, K Ohgushi, S Merkel, & N Miyajima. Lattice preferred orientation in  $CaIrO_3$  perovskite and post-perovskite formed by plastic deformation under pressure. *Physics and Chemistry of Minerals*, **34** :679–686, 2007.
- A Oganov, R Martonak, A Laio, & P Raiteri. Anisotropy of Earth's D'' layer and stacking faults in the  $MgSiO_3$  post-perovskite phase. *Nature*, **438** :1142–1144, 2005.
- A Oganov & S Ono. Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of  $MgSiO_3$  in Earth's D'' layer. *Nature*, **430** :445–448, 2004.

- M Payne, M Teter, D Allan, & T Arias. Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations : molecular dynamics and conjugate gradients. *Reviews of Modern Physics*, **64**(4) :1045–1097, 1992.
- R Peierls. The size of a dislocation. *Proceedings of the Physical Society*, **52** :34–37, 1940.
- J Perdew, K Burke, & M Ernzerhof. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, **77**(18) :3865–3868, 1996.
- J Perdew, J Chevary, S Vosko, K Jackson, M Pederson, D Singh, & C Fiolhais. Atoms, molecules, solids, and surfaces : Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*, **46**(11) :6671–6687, 1992.
- J Perdew & Y Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, **45**(23) :13244–13249, 1992.
- P Phakey, G Dollinger, & J Christie. *Transmission electron microscopie of experimentally deformed olivine crystals*, volume **16** des *Geophysical monograph*, pages 117–133. AGU, 1972.
- L Pizzagalli & P Beauchamp. First principles determination of the Peierls stress of the shuffle screw dislocation in silicon. *Philosophical Magazine Letters*, **84**(11) :729–736, 2004.
- L Pizzagalli, P Beauchamp, & J Rabier. Undissociated screw dislocations in silicon : calculations of core structure and energy. *Philosophical Magazine*, **83** :1191–1204, 2003.
- J-P Poirier. On the slip systems of olivine. *Journal of Geophysical Research*, **80** :4059–4061, 1975.
- J-P Poirier & G-D Price. Primary slip system of  $\epsilon$ -iron and anisotropy of the Earth's inner core. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **110** :147–156, 1999.
- J-P Poirier & B Vergobbi. Splitting of dislocations in olivine, cross-slip-controlled creep and mantle rheology. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **16** :370–378, 1978.
- D Presnall. *Phase diagrams of Earth-forming minerals*, pages 248–268. Mineral Physics and Crystallography : a handbook of physical constants. AGU, 1995.
- G-D Price. The nature and significance of stacking faults in wadsleyite, natural  $\beta$  ( $Mg, Fe$ )<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> from the peace river meteorite. *Physics of the Earth Planetary Interiors*, **33** :133–147, 1983.

- G-D Price & S Parker. Computer simulations of the structural and physical properties of the olivine and spinel polymorphs of  $Mg_2SiO_4$ . *Physics and Chemistry of Minerals*, **10** :209–216, 1984.
- G-D Price, A Putnis, S Agrell, & D Smith. Wadsleyite, natural  $\beta - (Mg, Fe)_2SiO_4$  from the Peace River meteorite. *Canadian Mineralogist*, **21** :29–35, 1983.
- C Raleigh. Mechanisms of plastic deformation of olivine. *Journal of Geophysical Research*, **73** (14) :5391–5406, 1968.
- C Raleigh & J Talbot. Mechanical twinning in naturally and experimentally deformed diopside. *American Journal of Science*, **265** :151–165, 1967.
- P Raterron, E Amiguet, J Chen, L Li, & P Cordier. Experimental deformation of olivine single crystals at mantle pressures and temperatures. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **172** :74–83, 2009.
- P Raterron, J Chen, L Li, D Weidner, & P Cordier. Pressure-induced slip-system transition in forsterite : Single-crystal rheological properties at mantle pressure and temperature. *American Mineralogist*, **92** :1436–1445, 2007.
- P Raterron, N Doukhan, O Jaoul, & J-C Doukhan. High temperature deformation of diopside IV : predominance of {110} glide above 1000 ° C. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **82** :209–222, 1994.
- P Raterron & O Jaoul. High-temperature deformation of diopside single crystal 1. mechanical data. *Journal of Geophysical Research-Solid Earth*, **96**(B9) :14277–14286, 1991.
- A Ringwood. Mineralogical constitution of the deep mantle. *Journal of Geophysical Research*, **67**(10) :4005, 1962a.
- A Ringwood. A model for the upper mantle. *Journal of Geophysical Research*, **67**(2) :857, 1962b.
- A Ringwood & A Major. Some high-pressure transformations in olivines and pyroxenes. *Journal of Geophysical Research*, **71**(18) :4448, 1966.
- M Sanders, M Leslie, & C Catlow. Interatomic potentials for  $SiO_2$ . *Journal of the Chemical Society. Chemical communications*, pages 1270–1271, 1984.

- G Schoeck. The generalized Peierls-Nabarro model. *Philosophical Magazine A*, **69**(6) :1085–1095, 1994.
- G Schoeck. The Peierls dislocation : Line energy, line tension, dissociation and deviation. *Acta Materialia*, **45**(6) :2597–2605, 1997.
- G Schoeck. The dissociation energy of extended dislocations in fcc lattices. *Philosophical Magazine A*, **79**(5) :1207–1215, 1999a.
- G Schoeck. Peierls energy of dislocations : A critical assessment. *Physical Review Letters*, **82**(11) :2310–2313, 1999b.
- G Schoeck. The Peierls energy revisited. *Philosophical Magazine A*, **79**(11) :2629–2636, 1999c.
- G Schoeck. The core structure of dislocations. Peierls model vs. atomic simulations in Pd. *Computational Materials Science*, **21** :124–134, 2001a.
- G Schoeck. The core structure of dissociated dislocations in NiAl. *Acta Materialia*, **49** :1179–1187, 2001b.
- G Schoeck. The core structure, recombination energy and Peierls energy for dislocations in Al. *Philosophical Magazine A*, **81**(5) :1161–1176, 2001c.
- G Schoeck. The Peierls model : Progress and limitations. *Materials Science And Engineering A*, **400-401** :7–17, 2005.
- G Schoeck, J Ehmann, & M Fahnle. Planar dissociations of  $[10\bar{1}]$  superdislocations in *TiAl* : *ab initio* electron theory and generalized Peierls-Nabarro model. *Philosophical Magazine Letters*, **78**(4) :289–295, 1998.
- G Schoeck, S Kohlhammer, & M Fahnle. Planar dissociations and recombination energy of  $[1\bar{1}0]$  superdislocations in *Ni<sub>3</sub>Al* : generalized Peierls model in combination with *ab initio* electron theory. *Philosophical Magazine Letters*, **79**(11) :849–857, 1999.
- G Schoeck & W Püschl. Dissociated dislocations in the Peierls potential. *Materials science & engineering. A*, **189** :61–67, 1994.
- U Schröder. A new model for lattice dynamics ("breathing shell model"). *Solid state communications*, **4** :347–349, 1966.

- D Shanno. Conditioning of quasi-newton methods for function minimization. *Mathematics of Computation*, **24**(111) :647, 1970.
- T Sharp, G Bussod, & T Katsura. Microstructures in  $\beta$ - $Mg(1.8)Fe(0.2)SiO_4$  experimentally deformed at transition-zone conditions. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **86** : 69–83, 1994.
- I Sidorin, M Gurnis, & D Helmberger. Evidence for a ubiquitous seismic discontinuity at the base of the mantle. *Science*, **286** :1326–1331, 1999.
- C Da Silva, L Stixrude, & R Wentzcovitch. Elastic constants and anisotropy of forsterite at high pressure. *Geophysical Research Letters*, **24**(15) :1963–1966, 1997.
- J Smyth & R Hazen. The crystal structure of forsterite and hortonolite at several temperatures up to 900 ° C. *American Mineralogist*, **58** :620–626, 1973.
- J W Steeds. *Introduction to anisotropic elasticity theory of dislocations*. Clarendon Press, 1973.
- S Stolen & R Tronnes. The perovskite to post-perovskite transition in  $CaIrO_3$  : Clapeyron slope and changes in bulk and shear moduli by density functionnal theory. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, **164** :50–62, 2007.
- P Szelestey, M Patriarca, & K Kaski. Computational study of core structure and Peierls stress of dissociated dislocations in nickel. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **11** :883–895, 2003.
- R Thompson & R Downs. The crystal structure of diopside at pressure to 10 GPa. *American Mineralogist*, **93** :177–186, 2008.
- E Thurel. *Etude par microscopie électronique en transmission des mécanismes de déformation de la wadsleyite et de la ringwoodite*. Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologie de Lille, 2001.
- E Thurel & P Cordier. Plastic deformation of wadsleyite : I. high-pressure deformation in compression. *Physics and Chemistry of Minerals*, **30** :256–266, 2003.
- E Thurel, P Cordier, D Frost, & S Karato. Plastic deformation of wadsleyite : II. high-pressure deformation in shear. *Physics and Chemistry of Minerals*, **30** :267–270, 2003a.

- E Thurel, J Douin, & P Cordier. Plastic deformation of wadsleyite : III. interpretation of dislocations and slip systems. *Physics and Chemistry of Minerals*, **30** :271–279, 2003b.
- A Tommasi, D Mainprice, G Canova, & Y Chastel. Viscoplastic self-consistent and equilibrium-based modeling of olivine lattice preferred orientations : Implications for the upper mantle seismic anisotropy. *Journal of Geophysical Research*, **105** :7893–7908, 2000.
- A Tommasi, D Mainprice, P Cordier, C Thoraval, & H Couvy. Strain-induced seismic anisotropy of wadsleyite polycrystals and flow patterns in the mantle transition zone. *Journal of Geophysical Research*, **109** :B12405, 2004.
- T Tsuchiya, J Tsuchiya, K Umemoto, & R Wentzcovitch. Phase transition in  $MgSiO_3$  perovskite in the Earth's lower mantle. *Earth and Planetary Science Letters*, **224** :241–248, 2004.
- V Urusov. Semi-empirical groundwork on the bond-valence model. *Acta crystallographica. Section B*, **51** :641–649, 1995.
- J Vander Sande & D Kohlstedt. Observation of dissociated dislocations in deformed olivine. *Philosophical Magazine*, **34**(4) :653–658, 1976.
- P Vashishta, R Kalia, J Rino, & I Ebbsjö. Interaction potential for  $SiO_2$  : A molecular-dynamics study of structural correlations. *Physical Review B*, **41**(17) :12197–12209, 1990.
- L Ventelon & F Willaime. Core structure and peierls potential of screw dislocations in  $\alpha - Fe$  from first principles : cluster versus dipole approaches. *Journal of Computer-Aided Material Design*, **14** :85–94, 2007.
- V Vitek. Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals. *Philosophical Magazine*, pages 773–786, 1968.
- V Vitek. Computer simulation of the screw dislocation motion in bcc metals under the effect of the external shear and uniaxial stresses. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, **352** :109–124, 1976.
- V Vitek, R Perrin, & D Bowen. The core structure of-iron  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$  screw dislocations in bcc crystals. *Philosophical Magazine*, pages 1049–1073, 1970.
- V Vitek & M Yamaguchi. *Atomistic studies of dislocations*, pages 223–248. The Metallurgical Society of AIME, 1981.

- B von Sydow, J Hartford, & G Wahnström. Atomistic simulations and Peierls-Nabarro analysis of the Shockley partial dislocations in palladium. *Computational Materials Science*, **15** :367–379, 1999.
- A Walker, S Demouchy, & K Wright. Computer modelling of the energies and vibrational properties of hydroxyl groups in  $\alpha$ - and  $\beta$ - $Mg_2SiO_4$ . *European Journal of Mineralogy*, **18**(5) : 529–543, 2006.
- A Walker, J Gale, B Slater, & K Wright. Atomic scale modelling of the cores of dislocations in complex materials part 1 : methodology. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **7** :3227–3234, 2005a.
- A Walker, J Gale, B Slater, & K Wright. Atomic scale modelling of the cores of dislocations in complex materials part 2 : applications. *Physical Chemistry Chemical Physics*, **7** :3235–3242, 2005b.
- A Walker, B Slater, J Gale, & K Wright. Predicting the structure of screw dislocations in nanoporous materials. *Nature Materials*, **3** :715–720, 2004.
- A Walker, R Tyer, R Bruin, & M Dove. The compressibility and high pressure structure of diopside from first principles simulation. *Physics and Chemistry of Minerals*, **35** :359–366, 2008.
- A Walker, K Wright, & B Slater. A computational study of oxygen diffusion in olivine. *Physics and Chemistry of Minerals*, **30** :536–545, 2003.
- N Walte, F Heidelberg, N Miyajima, & D Frost. Texture development and TEM analysis of deformed  $CaIrO_3$  : Implications for the D" layer at the core-mantle boundary. *Geophysical Research Letters*, **34**(8) :L08306, 2007.
- N Walte, F Heidelberg, N Miyajima, D Frost, D Rubie, & D Dobson. Transformation textures in post-perovskite : understanding mantle flow in the D" layer of the Earth. *Geophysical Research Letters*, **36** :L04302, 2009.
- J N Wang. A new modification of the formulation of Peierls stress. *Acta Materialia*, **44**(4) : 1541–1546, 1996.
- H Wenk. *Texture and anisotropy*, volume **51** des *Reviews in mineralogy and geochemistry*, chapitre 10, pages 291–330. Mineralogical Society of America, 2002.

- R Wentzcovitch & L Stixrude. Crystal chemistry of forsterite : A first-principles study. *American Mineralogist*, **82** :663–671, 1997.
- C Woodward. First-principles simulations of dislocation cores. *Materials Science & Engineering A*, **400-401** :59–67, 2005.
- C Woodward & S Rao. Flexible *ab initio* boundary conditions : simulating isolated dislocations in bcc Mo and Ta. *Physical Review Letters*, **88** :216402, 2002.
- C Woodward, D Trinkle, L Hector Jr, & D Olmsted. Prediction of dislocation cores in aluminum from density functional theory. *Physical Review Letters*, **100** :045507, 2008.
- J Wookey & J Kendall. *Seismic anisotropy of post-perovskite and the lowermost mantle*, volume **174** des *Geophysical Monograph*, pages 171–189. AGU, 2007.
- J Wookey, S Stackhouse, J Kendall, J Brodholt, & G-D Price. Efficacy of the post-perovskite phase as an explanation for lowermost-mantle seismic properties. *Nature*, **438** :1004–1007, 2005.
- K Wright & C Catlow. A computer simulation study of (OH) defects in olivine. *Physics and Chemistry of Minerals*, **20** :515–518, 1994.
- D Yamazaki, T Yoshino, H Ohfuji, J Ando, & A Yoneda. Origin of seismic anisotropy in the D'' layer inferred from shear deformation experiments on post-perovskite phase. *Earth and Planetary Science Letters*, **252** :372–378, 2006.
- J Yan, C Wang, & S Wang. Generalized-stacking-fault energy and dislocation properties in bcc Fe : A first-principles study. *Physical Review B*, **70**(17) :174105, 2004.
- C Zha, T Duffy, R Downs, H Mao, R Hemley, & D Weidner. *Single-crystal elasticity of the  $\alpha$  and  $\beta$  of  $Mg_2SiO_4$  polymorphs at high pressures*, volume **101** des *Geophysical Monograph*, pages 9–16. AGU, 2000.
- J Zhang, H Green, & K Bozhilov. Rheology of omphacite at high temperature and pressure and significance of its lattice preferred orientations. *Earth and Planetary Science Letters*, **246** : 432–443, 2006.
- L Zhang, H Ahsbahs, S Hafner, & A Kutoglu. Single-crystal compression and crystal structure of clinopyroxene up to 10 GPa. *American Mineralogist*, **82** :245–258, 1997.

- 
- S Zhang & S Karato. Lattice preferred orientation of olivine aggregates deformed in simple shear.  
*Nature*, **375** :774–777, 1995.



## Résumé

La déformation plastique des minéraux des roches mantelliques joue un rôle-clé dans les phénomènes de convection globale à l'intérieur de la Terre. Cependant, les mécanismes de déformation des minéraux sont encore mal compris.

Généralement, la déformation plastique est assurée par le mouvement des dislocations qui sont des défauts linéaires du cristal. La mobilité des dislocations est déterminée par la structure de coeur des défauts.

Le modèle de Peierls-Nabarro auquel nous avons recours est un concept fondamental qui décrit la résistance qu'oppose le cristal au mouvement des dislocations au travers du calcul de la contrainte de Peierls et qui fournit également l'étalement du coeur de la dislocation dans le cristal. Développé il y a plus d'un demi-siècle, ce modèle connut un regain d'intérêts dans les années 70 avec l'introduction du concept de fautes d'empilement généralisées qui permet une description plus générale des coeurs de dislocations. La détermination de ces fautes consiste à calculer *ab initio* ou à l'aide de potentiels empiriques des barrières d'énergie associées au cisaillement d'un plan cristallographique donné dans une, deux ou toutes les directions.

L'étude menée durant cette thèse s'est portée sur la détermination des structures de coeur des dislocations de la phase post-perovskite présente à la base du manteau mais également de la wadsleyite, de la forsterite et du diopside, trois minéraux majeurs entre la croûte et 520km de profondeur. L'utilisation du modèle de Peierls-Nabarro unidimensionnel dans un premier temps a été étendue aux trois dimensions de l'espace dans le but de modéliser des structures de coeur de dislocations de plus en plus complexes.

## Summary

Plastic deformation of minerals in rocks plays an important role in the global convection of the Earth's mantle. However, the deformation mechanisms of minerals are not well-known.

In general, plastic deformation is due to the dislocation motion. The dislocations are linear defects of the crystal. The mobility of the dislocation is governed by the dislocation core structure.

Here, we used the Peierls-Nabarro model that is a theoretical model to address the issue of dislocation core modelling. This model provides also the lattice friction of the crystal against the dislocation motion through the calculation of the Peierls stress. Developed more than 50 years, the model has a great interest since the 70's with the introduction of the generalized stacking fault (GSF) concept that provides a general description of the dislocation core. The determination of the GSF consists in the calculations of energy barriers associated with the shearing of the crystal in a crystallographic plane in one or more directions.

In this study, we have determined the dislocation core structures of the post-perovskite phase present at the core-mantle boundary and of the wadsleyite, diopside and forsterite, major minerals from the crust to 510Km deep. We used the one-dimension formulation of the Peierls-Nabarro model in a first time that has been extended to three dimensions in order to model much more complex dislocation cores.