

THESE

Université de Lille 1 Sciences et Technologies

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

Pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université

Spécialité : Sciences des Matériaux

Par

Jonathan AMODEO

**Modélisation multi-échelle de la déformation plastique de
MgO monocristallin : du laboratoire au manteau terrestre**

Soutenue le 15 Décembre 2011

devant le jury composé de

L. Kubin

R. Caracas

D. Rodney

B. Devincere

C. Fressengeas

Ph. Carrez

P. Cordier

Président

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

Co-encadrant de thèse

Directeur de thèse

*Seulement, on n'est jamais sûr d'être assez fort,
puisque'on n'a pas de système, on n'a que des lignes et des mouvements.*

Gilles Deleuze & Félix Guattari, *Mille Plateaux*

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier Razvan Caracas et David Rodney d'avoir été les rapporteurs de ce manuscrit ainsi que Benoît Devindre, Claude Fressengeas et Ladislav Kubin qui ont accepté d'examiner ce travail.

Un grand merci à Patrick Cordier, mon directeur de thèse, merci pour tout ce que j'ai appris à tes côtés et pour ta confiance. Tu as été au-dessus de toutes les attentes que je pouvais avoir d'un directeur de thèse.

Merci à Philippe Carrez, mon co-encadrant de thèse, je me souviendrai toujours de nos discussions passionnées (je pense que c'est le terme). Je te remercie pour ton soutien, ton amitié et pour ta contribution à ce travail. J'ai beaucoup appris à vos côtés et vous en suis très reconnaissant.

Si aujourd'hui je dispose de quelques connaissances en Dynamique des Dislocations, je le dois en grande partie à Benoît Devindre. Tu m'as accordé beaucoup (peut être trop) de ton temps ces dernières années, et sans toi, ce travail n'aurait sûrement pas vu le jour. *Un fuoriclasse* comme on dit chez nous. Merci aussi à Ladislav Kubin pour ses conseils et son inébranlable soutien ainsi qu'à Ronan Madec qui s'est toujours montré très disponible pour mes moindres questions.

Ma thèse s'est effectuée dans les meilleures conditions pour un doctorant. Je pense que cela est en grande partie dû aux différentes personnalités qui animent l'UMET. En ce sens, j'aimerais particulièrement en remercier certains membres : Matthieu et Mathieu, Sébastien (mon roommate de conf, merci pour tes conseils), Nadège, Denise, Damien, Ahmed ainsi que les nombreux doctorants (ou ex-doctorants) que j'ai pu côtoyer avec une pensée toute particulière pour Elodie (merci pour ton soutien pendant toutes ces années), Carole (here we are !), Stödi (forza Ferrari !), Caroline (courage !) et Nils (n'oublie pas, tu resteras à jamais un membre du 212).

Merci à Chewie, à 'Wen, ainsi qu'aux autres musiciens que j'ai pu croiser ces dernières années. Chacune de vos notes résonne encore au cœur de ce travail.

Merci à mes amis, qui m'ont suivi de près ou de loin dans cette aventure, merci à ceux qui savent et peut être plus à ceux qui ne savent pas.

Merci à Delphine, merci d'être là et d'être toi.

J'aimerais ponctuer ces remerciements par une intention envers ma famille. Merci à mon père et à ma mère, qui m'ont permis de faire des études dans les meilleures conditions. Je vous serais éternellement reconnaissant de m'avoir donné cette chance. Merci à ma sœur, Merry, merci à Benoît, d'avoir toujours été là pour moi, merci pour tous ces bons moments qui me donnent tant de force.

Merci aux différentes personnes qui ont œuvré à la correction de ce manuscrit.

Enfin, merci à ceux que j'ai oublié de ne pas me haïr toute mon existence durant. Merci à tous.

Résumé

Modélisation multi-échelle de la déformation plastique de MgO monocristallin : du laboratoire au manteau terrestre

Les évènements géologiques de surface, comme le volcanisme ou les séismes, sont le fruit d'une dynamique qui vise à dissiper la chaleur interne de notre planète. Dans le manteau terrestre, les roches sont déformées plastiquement dans des conditions extrêmes de pression, de température et de vitesse de déformation. Malgré les récentes avancées expérimentales, il est impossible de reproduire de telles conditions de déformation en laboratoire.

C'est pourquoi nous proposons, dans ce travail de thèse, une approche numérique, basée sur la modélisation multi-échelle de la plasticité, des conditions du laboratoire à celles qui caractérisent le manteau terrestre. Nous avons choisi d'appliquer cette méthode à MgO, phase importante du manteau inférieur.

À partir des propriétés de cœur des dislocations, nous avons utilisé la théorie des double-décrochements afin de décrire la mobilité d'une dislocation isolée en fonction de la température et de la contrainte. Nous avons ensuite implémenté, dans un code de Dynamique des Dislocations (DD), les paramètres de mobilité des différents défauts afin de décrire le comportement collectif des dislocations lors d'essais numériques de déformation.

Les résultats montrent que les propriétés mécaniques de MgO dépendent fortement de la pression et de la vitesse de déformation.

Mots-clés : MgO, plasticité, dislocations, modélisation multi-échelle, Dynamique des Dislocations, activation thermique, manteau terrestre.

Abstract

Multi-scale modeling of MgO single crystal plasticity : from the laboratory conditions to the Earth's mantle

Surface geological events, like volcanos and earthquakes, are due to the internal dynamics of the Earth which tends to release its internal heat. Inside the Earth's mantle, solid rocks are plastically strained under extreme conditions of pressure, temperature and strainrate. In spite of recent experimental progress, it is still impossible to reach such conditions of deformation. That is why we propose an alternative approach, based on the multi-scale modeling of plasticity, from the laboratory conditions to the Earth's mantle. We have chosen to apply our model to magnesium oxide which is a phase present in the lower mantle.

From core properties, we modeled a dislocation thermally activated mobility law based on the kink pair theory. Then, we have incorporated it inside a Dislocation Dynamics code to describe the collective behaviour of dislocations throughout numerical strain experiments.

Here we show that MgO mechanical properties depends significantly on pressure and strainrate.

Keywords : MgO, plasticity, dislocations, multi-scale modeling, Dislocation Dynamics, thermal activation, Earth's mantle.

Table des matières

INTRODUCTION	5
CHAPITRE 1 Revue bibliographique des propriétés élastiques et plastiques de MgO	13
I.1 Structure, stabilité et propriétés élastiques	14
I.1.1 Maille cristalline et volume	14
I.1.2 Équilibre de phase	15
I.1.3 Constantes élastiques	17
I.2 Déformation plastique	21
I.2.1 Les systèmes de glissement	21
I.2.2 Contraintes critiques de cisaillement et microstructure	24
I.2.3 Impuretés et traitement thermique	28
I.2.4 Durcissement	30
I.2.5 Vitesse, exposant de contrainte	32
I.2.6 Volume d'activation	35
I.2.7 Déformation de MgO en pression	39
CHAPITRE II Méthodes & Techniques : modélisation multi-échelle de la déformation de MgO	43
II.1 Introduction à la modélisation des structures de cœur des dislocations	44
II.1.1 Les simulations de dislocations à l'échelle atomique dans MgO	44
II.1.2 Le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin	46
II.2 Le glissement thermiquement activé : la mobilité par double-décrochements	48
II.2.1 Généralités	48
II.2.2 Le modèle des interactions élastiques IE	50
II.2.3 Loi de mobilité des dislocations dans le régime thermiquement activé	55
II.3 Dynamique des Dislocations	57
II.3.1 Historique	57
II.3.2 Introduction à microMegas	58

II.3.3	Discrétisation de l'espace	60
II.3.4	Calcul des forces	62
II.3.5	Vitesse et temps	64
II.3.5.1	<i>Vitesse dans le régime thermiquement activé ($T < T_a$)</i>	65
II.3.5.2	<i>Vitesse dans le régime athermique ($T > T_a$)</i>	67
II.3.6	Conditions Limites Périodiques (CLP)	68
CHAPITRE III	Modélisation des CRSS à pression ambiante	77
III.1	Les structures de cœur des dislocations dans MgO	78
III.1.1	Les γ -surfaces	78
III.1.2	Structures de cœur et contraintes de Peierls	79
III.2	Configuration critique des double-décrochements	81
III.2.1	Energie d'activation et géométrie des double-décrochements	81
III.2.2	Sensibilité de la configuration critique aux paramètres de calculs	85
III.2.2.1	<i>Influence du potentiel de Peierls V_p</i>	85
III.2.2.2	<i>Influence de la contrainte de Peierls</i>	89
III.2.2.3	<i>Influence du rayon de coupure r_c</i>	90
III.3	Vitesse des dislocations et CRSS	92
III.3.1	Vitesse dans le régime thermiquement activé	92
III.3.2	Contraintes critiques de cisaillements dans le régime thermiquement activé	94
III.3.3	Palier athermique	97
III.4	Discussion	99
III.4.1	De la structure de cœur à la mobilité des dislocations	99
III.4.2	CRSS, impuretés et lois de mélange	103
CHAPITRE IV	Microstructure et Durcissement : Analyse par Dynamique des Dislocations	111
IV.1	Interactions locales entre dislocations	112
IV.1.1	Rappels théoriques	112
IV.1.2	Matrice et cartographies des interactions	116
IV.1.2.1	<i>Interactions entre les systèmes de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$</i>	118
IV.1.2.2	<i>Interactions entre les systèmes de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$</i>	120
IV.1.2.3	<i>Interactions croisées entre les deux familles de systèmes de glissement</i>	122
IV.2	Déformation et durcissement dans le régime athermique	124

IV.2.1 Microstructure et mécanismes de déformation	124
IV.2.1.1 Densité de jonction et anisotropie plastique	124
IV.2.1.2 Influence des mécanismes de déformation sur la densité de dislocation	129
IV.2.2 Durcissement de la forêt	135
IV.2.2.1 Rappels théoriques	135
IV.2.2.1 Simulations et résultats	137
IV.3 Introduction à la déformation dans le régime de friction de réseau	141
IV.3.1 Dislocations vis et interactions locales	142
IV.3.1.1 Généralités	142
IV.3.1.2 Tests de relaxation	144
IV.3.1.3 Tests avec contrainte	145
IV.3.2 Simulations en masse dans le domaine thermiquement activé	146
IV.3.2.1 Jonctions et microstructure	146
IV.3.2.2 Application au modèle de Louchet et al. 1979	151
IV.4 Discussion	154
IV.4.1 Microstructure et durcissement dans le régime athermique	154
IV.4.2 Déformation dans le régime thermiquement activé	159
 CHAPITRE V Influence de la pression hydrostatique	 167
V.1 Elasticité et structures de cœur en pression	168
V.1.1 Constantes élastiques	168
V.1.2 Structures de cœur et contraintes de Peierls	169
V.2 Influence de la pression sur la mobilité des dislocations et les CRSS	173
V.2.1 Configuration critique des double-décrochements	173
V.2.2 Influence de la loi de mobilité sur la température de transition en pression	178
V.2.3 Contraintes critiques de cisaillement dans le régime thermiquement activé	180
V.3 Discussion	183
V.3.1 Les propriétés élastiques	183
V.3.2 Les structures de cœur des dislocations	183
V.3.3 Pression et paramètres d'activation	185
V.3.4 Les systèmes de glissements actifs en pression	187
V.3.5 Comparaison aux travaux expérimentaux	188

CHAPITRE VI Plasticité de MgO dans les conditions de vitesse de déformation, de pression et de température du manteau terrestre	191
VI.1 Faibles vitesses de déformation et mécanismes	192
VI.1.1 Mobilité des dislocations	192
VI.1.2 Influence de sur les contraintes critiques de cisaillement	193
VI.1.3 Température de transition athermique	195
VI.1.4 Densité de dislocation	196
VI.2 Déformation de MgO dans le manteau inférieur	199
VI.2.1 Extrapolation des données en base de manteau inférieur	199
VI.2.2 Régimes de déformation	201
VI.2.3 Viscosité	203
VI.3 Discussion	205
VI.3.1 La vitesse de déformation : des conditions du laboratoire au manteau inférieur	206
VI.3.2 Les incertitudes sur la température de transition	209
VI.3.3 Le régime athermique	209
VI.3.4 Le glissement de dislocations et les autres mécanismes	210
CONCLUSION	213
BIBLIOGRAPHIE	217
ANNEXE Base de vecteurs MgO	239

INTRODUCTION

La Terre est une machine thermique. 98% du volume de notre planète se trouve à des températures supérieures à 1000 °C. Le flux de chaleur qui émane de la Terre n'est pas uniforme ; Il est principalement dissipé au niveau des dorsales océaniques (Pacifique, Indienne et Atlantique). Cette chaleur interne trouve sa source en diverses origines dont la plus importante est la désintégration spontanée d'isotopes radioactifs comme le potassium 40, l'uranium 238 et 235 ou encore le thorium 232. Les événements géologiques visibles en surface, tels que le volcanisme, les séismes ou la tectonique des plaques sont le fruit d'une dynamique terrestre qui tend vers la libération de cette chaleur interne. Les mécanismes de convection qui animent le manteau terrestre en sont le moteur.

Architecture terrestre

Notre planète est constituée de deux grandes enveloppes, le manteau et le noyau, subdivisées en plusieurs couches. Cette différenciation a été mise en évidence grâce à l'étude des ondes sismiques qui traversent la planète, lors de tremblements de Terre. Les vitesses des ondes de cisaillement et de compression (respectivement V_S et V_P) sont liées aux propriétés élastiques et à la masse volumique ρ des matériaux traversés (*Fig. 1*). Les principales couches de notre planète peuvent donc être identifiées à partir des perturbations et discontinuités observées sur les profils de vitesse sismique (modèle PREM, *Dziewonski & Anderson 1981*).

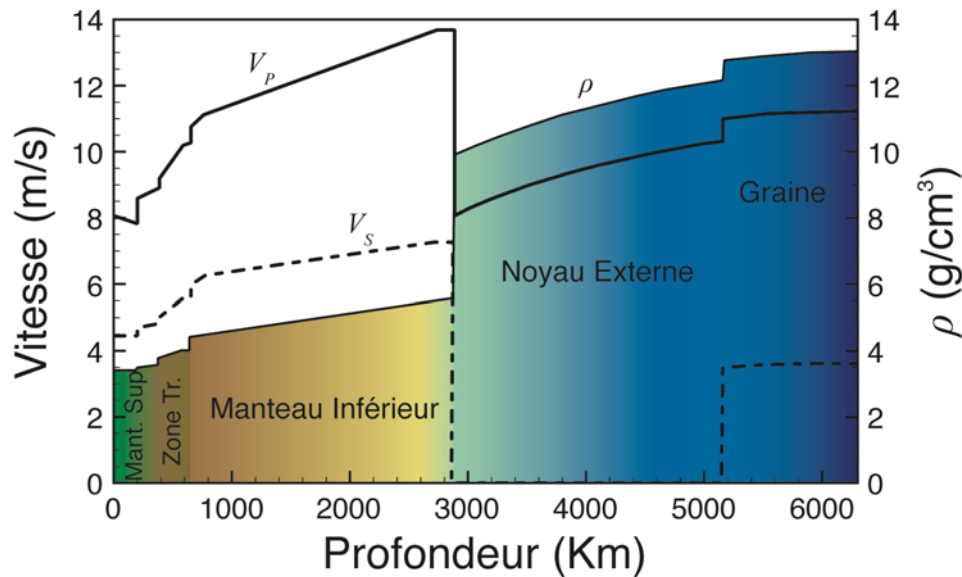


Fig. 1 Vitesses des ondes sismiques et masse volumique en fonction de la profondeur. Modèle PREM, d'après Dziewonski & Anderson 1981.

L'intérieur de la Terre est composé des enveloppes et couches suivantes :

- La croûte terrestre. Elle a une épaisseur variable, comprise entre 5 Km et 60 Km, selon qu'elle soit océanique ou continentale.
- Le manteau terrestre. Il est divisé en deux couches. Sa partie haute, appelée manteau supérieur, s'étend jusqu'à 670 Km de profondeur. Il est séparé de la croûte par la discontinuité de Mohorovicic (plus communément appelée le Moho). Le manteau inférieur est situé à des profondeurs comprises entre 770 Km et 2900 Km. Les deux parties du manteau sont séparées par une zone dite de transition dont l'épaisseur est de l'ordre de 300 Km.
- Le noyau. Il est composé d'une couche externe liquide (les ondes de cisaillement ne s'y propagent pas) comprise entre 2900 Km et 5100 Km et d'une graine solide. Le noyau est séparé du manteau inférieur par la couche D'' , à 2750 Km de profondeur.

Les conditions de température et de pression dans les différentes couches varient en fonction de la profondeur (Fig. 2). La température augmente tout d'abord très rapidement avec la profondeur (~ 30 K/Km) de telle sorte qu'elle est déjà de l'ordre de 1000 K dans la partie haute du manteau supérieur. À partir des données issues de PREM, on prévoit des

pressions comprises entre 2 et 15 GPa pour le manteau supérieur et entre 15 et 25 GPa pour la zone de transition. Le manteau inférieur est caractérisé par des températures comprises entre 2000 et 3000 K et des pressions pouvant aller jusqu'à 135 GPa. Si le gradient radial de température est relativement bien contraint par les différents géothermes présentés dans la littérature (*Brown & Shankland 1981*; *Anderson 1982*; *Ono 2008*), des hétérogénéités latérales, pouvant aller jusqu'à 1000 K de température, ont été calculées dans *Schuberth et al. 2009*. Dans la graine, la pression approche 400 GPa, pour des températures de l'ordre de 5000 K.

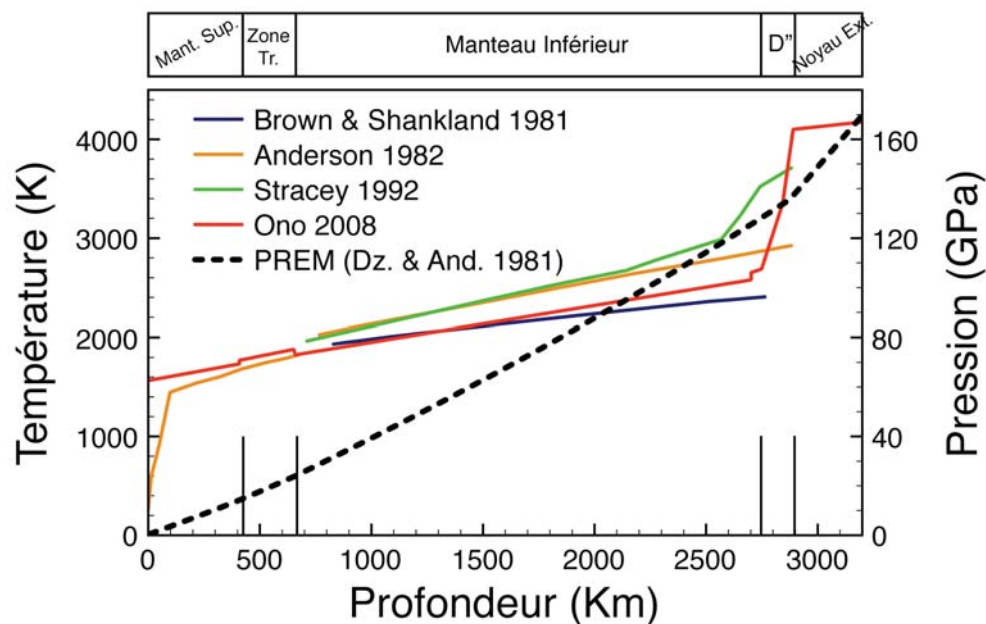


Fig. 2 Profils de température et de pression en fonction de la profondeur. Les courbes en couleur correspondent aux différents géothermes. La courbe en tirets décrit les pressions calculées à partir des données de PREM (Dziewonski & Anderson 1981)

Composition minérale

L'analyse des ondes sismiques ne fournit aucune information directe sur la composition chimique des différentes enveloppes terrestres. Elle est en partie contrainte par l'étude de roches exhumées en surface : les xénolithes (roches remontées par les laves) ou les ophiolites (roches issues des planchers océaniques). Ces deux types de roches sont principalement composées de silicates : olivine ($(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$) et pyroxènes ($(\text{Ca,Fe,Mg})\text{SiO}_3$). Elles contiennent aussi des spinelles ou des grenats. L'étude des météorites permet aussi de recouper des informations concernant le matériel primitif à l'origine de notre planète, de

composition Si, O, Mg, Al, Ca, Ni et Fe.

Les travaux de *Green & Ringwood (1963)* ont permis de modéliser d'un point de vue minéralogique le manteau supérieur qui est constitué, par ordre d'abondance, d'olivine, de pyroxènes et de grenats. C'est le modèle pyrolitique.

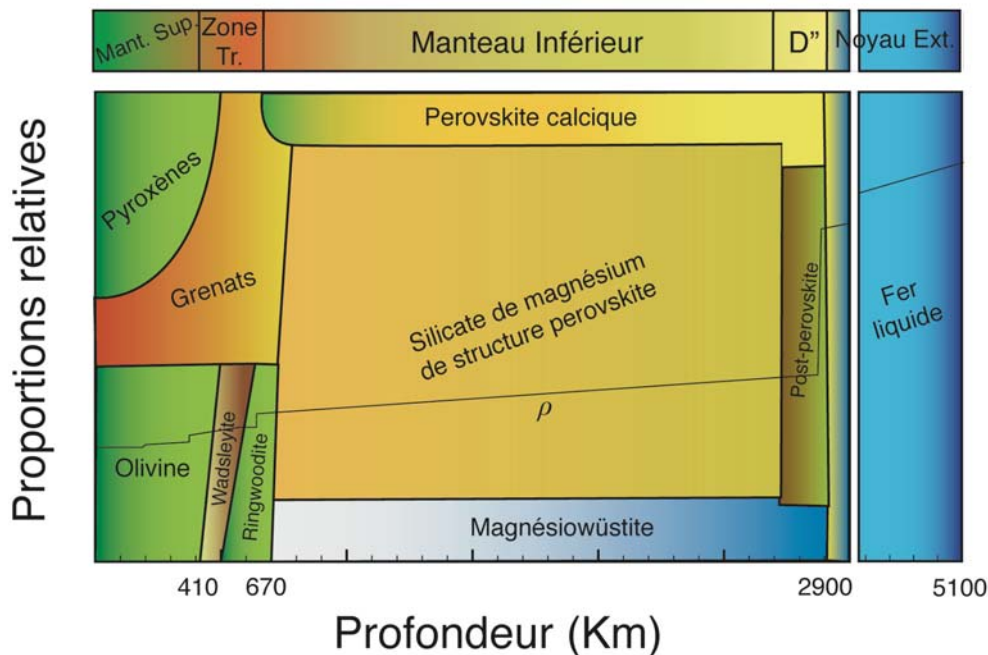


Fig. 3 Transformation des minéraux en profondeur. L'olivine, les pyroxènes et en moindre proportion les grenats sont les minéraux caractéristiques du manteau supérieur. L'olivine se transforme en wadsleyite puis en ringwoodite dans la zone de transition. Le manteau inférieur est composé de magnésio-wüstite (Mg,Fe)O et de silicates magnésiens et calciques de phase perovskite. En base de manteau inférieur, la post-perovskite est la structure caractéristique de la couche D''.

L'avancée des techniques de haute pression (*Karato & Weidner 2008, Raterron & Merkel 2009*) permet aujourd'hui d'effectuer des essais à des pressions et températures comparables à celles du manteau ou du noyau terrestre. Les presses multi-enclumes peuvent atteindre des pressions de l'ordre de 25 GPa. Elles sont particulièrement adaptées à l'étude des minéraux du manteau supérieur et plus particulièrement à l'élaboration de leurs diagrammes de phases. Elles ont permis de mettre en évidence la transition de phase olivine-ringwoodite puis ringwoodite-wadsleyite aux conditions de pression et de température de la zone de transition (*Fig. 3*). Ces transitions de phase expliquent les ruptures de pente des ondes sismiques à 410 Km et 520 Km de profondeur (*Agee 1998*). Toujours dans la zone de transition, vers 23 GPa et 1600 °C, wadsleyite, ringwoodite et grenats se transforment en magnésowüstite (Mg,Fe)O et en perovskites Al-(Mg,Fe)SiO₃ et CaSiO₃ (*Fig. 3*). La quantité

de fer dans la magnésio-wüstite est relativement faible, de l'ordre de 10%.

La cellule à enclumes de diamants est utilisée pour atteindre des pressions de plusieurs centaines de GPa. Elle a permis d'identifier la transformation de la phase perovskite en post-perovskite (*Murakami et al. 2004 ; Ono & Oganov 2005*). Cette transition de phase a aussi été prédite à l'aide de calculs *ab initio* (*Oganov & Ono 2004*).

Rhéologie du manteau et Modélisation Multi-Echelle

Historiquement, la compréhension des mécanismes géologiques est assez récente. C'est en 1960 que *H. Hess*, impose l'idée de la dérive des continents, en supposant que celle-ci est alimentée par des forces de convection¹. Ce modèle de convection mantellique suppose que le manteau, composé de roches solides, puisse s'écouler à l'échelle des temps géologiques afin de favoriser l'évacuation en surface de la chaleur interne. Les mesures issues du géoïde et du rebond post-glaciaire indiquent que la viscosité moyenne à l'intérieur de la Terre est de l'ordre de 10^{21} Pa.s (*Milne et al. 1998 ; Mitrovica & Forte 2004*). On estime aujourd'hui que la vitesse de déformation moyenne du manteau de l'ordre de 10^{-15} s⁻¹ (*Carter 1976 ; Pfiffner & Ramsay 1982*). C'est au moins un milliard de fois plus lent que les vitesses de déformation obtenues lors d'essais en laboratoire.

L'étude des propriétés élastiques et plastiques des minéraux, dans les conditions de pression, de température et de vitesse de déformation du manteau terrestre est donc une problématique essentielle à la compréhension de la dynamique interne de la Terre.

La déformation et les propriétés mécaniques d'un matériau sont contrôlées par la présence de défauts cristallins : les défauts ponctuels, les dislocations, les fautes d'empilements ou encore les joints de grains. Les techniques de haute pression décrites précédemment permettent d'effectuer des expériences de déformation sur des agrégats polycristallins (étude des textures de grain) ou des monocristaux (étude des systèmes de glissement). En pression et en température, le comportement mécanique des minéraux est complexe. On suppose que plusieurs mécanismes sont actifs simultanément (glissement et montée de dislocations, fluage diffusion). Malgré les avancées expérimentales récentes (*Karato & Weidner 2008 ; Raterron & Merkel 2009*), la rhéologie du manteau reste mal comprise, pour plusieurs raisons :

¹ La dérive des continents fut initialement introduite par le météorologiste *Wegener* en 1912. Son idée a été rejetée pendant plus de quarante ans car les scientifiques de l'époque n'avaient pas idée des forces motrices qui pouvaient animer un tel mouvement en surface.

- L'influence de la pression sur les mécanismes de déformation, comme le glissement des dislocations, n'est pas bien comprise.
- Les faibles vitesses de déformation du manteau sont traitées par extrapolation des conditions du laboratoire et les lois rhéologiques utilisées afin d'interpréter les données sont souvent d'origine empirique.
- La taille de grain et la densité de dislocation ne sont pas contraintes dans les conditions du manteau.

Nous proposons dans ce travail de thèse une approche numérique, basée sur la Modélisation Multi-Echelle (MME) de la plasticité. Les description multi-échelle ont pour but de rendre compte d'observables macroscopiques (propriétés mécaniques, viscosité, etc.) par l'étude de propriétés physiques issues des échelles inférieures (atomique, nanométrique ou mésoscopique).

Nous avons choisi d'appliquer notre approche à l'oxyde de magnésium MgO. (Mg,Fe)O est la seconde phase la plus abondante du manteau inférieur après la phase perovskite. Son pôle magnésien, MgO, est caractérisé par une structure cristallographique cubique, qui a été largement étudiée à pression ambiante. Une revue des propriétés élastiques et plastiques de MgO sera présentée au cours du premier chapitre de ce mémoire. Nous verrons entre autres que la température de fusion de MgO, relativement à la température du manteau, est assez élevée puisqu'il existe au moins un facteur deux entre ces deux températures sur l'ensemble de la gamme de pression du manteau inférieur.

Notre MME est principalement composée de trois étapes. Elle ne repose sur aucun paramètre ajusté sur des données expérimentales. L'enchaînement successif des différentes étapes de calcul va progressivement nous permettre de remonter aux propriétés plastiques de MgO (*Fig.4*). Leur description détaillée fera l'objet du chapitre II.

- i. L'organisation à l'échelle atomique des dislocations (structures de cœur) joue un rôle majeur sur leur mobilité (*Cai et al. 2004*) et donc sur la déformation plastique. L'étude à l'échelle atomique des dislocations dans MgO est la première étape de notre MME. Ces travaux ont été menés par *Ph. Carrez* (UMET, Lille) et seront introduits au cours du mémoire.

- ii. MgO est un matériau à friction de réseau. Assistées par les fluctuations thermiques et la contrainte, les dislocations franchissent des barrières d'énergie (barrières de Peierls) en formant des double-décrochements (*kink pair*). Dans l'optique de quantifier l'influence de la température sur le glissement de dislocations dans MgO, la deuxième étape de notre MME consiste à calculer les configurations énergétiques du mécanisme de double-décrochements et d'en utiliser les paramètres d'activation afin d'établir la loi de mobilité d'une dislocation isolée.
- iii. Enfin, la troisième et dernière étape de notre MME consiste à utiliser la Dynamique des Dislocations (DD) pour étudier le comportement collectif des dislocations. Nous avons travaillé avec le code *microMegs* (Devincre & Kubin 1994 ; Devincre *et al.* 2001), qui permet d'introduire nos paramètres de mobilité afin de décrire les premiers stades de la plasticité de monocristaux de MgO dans des essais à vitesse de déformation imposée.

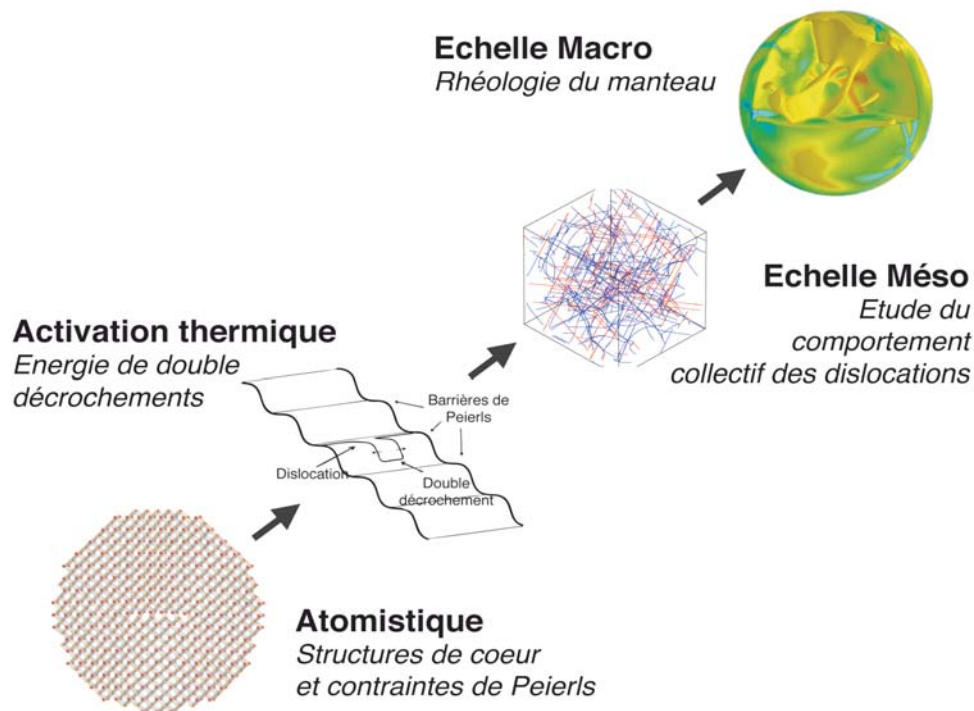


Fig. 4 Modélisation Multi-Echelle. Chaque nouvelle technique permet de franchir une dimension spatiale, de la description à l'échelle atomique des structures de cœur des dislocations à l'étude de la rhéologie de MgO dans les conditions du manteau terrestre.

Dans un premier temps, nous appliquerons notre MME dans les conditions du laboratoire. Ce travail sera présenté au chapitre III. MgO a largement été étudié pour ses propriétés réfractaires (fours, revêtements, produits ignifugeants) à pression ambiante. La reproductibilité des données mécaniques à l'aide de notre modèle s'impose donc comme une étape préliminaire qui vise à (i) améliorer notre compréhension des mécanismes physiques qui gouvernent la déformation (ii) vérifier les conditions d'applications de notre approche multi-échelle. Nous discuterons entre autres dans ce chapitre de l'influence des impuretés (notamment du fer) sur la contrainte d'écoulement dans MgO. Une étude par Dynamique des Dislocations des propriétés microstructurales et du durcissement par écrouissage sera présentée au chapitre IV. Elle permettra notamment de souligner le rôle de la microstructure sur la plasticité de MgO dans le régime de friction de réseau et à haute température.

Les expériences de haute pression (*Merkel et al. 2002 ; Weidner & Li 2006 ; Mei et al. 2008*) montrent que le niveau contrainte nécessaire pour déformer MgO aux vitesses du laboratoire est plus élevé qu'à pression ambiante (de l'ordre du GPa). Le chapitre V sera dédié à une application de notre MME à haute pression, en tenant compte notamment de son influence sur les structures de cœur des dislocations.

Enfin, dans un dernier chapitre, nous introduirons les implications d'une telle approche sur la déformation de MgO dans les conditions de pression, de température et de vitesse de déformation du manteau inférieur.

CHAPITRE I

REVUE BIBLIOGRAPHIQUE DES PROPRIETES ELASTIQUES ET PLASTIQUES DE MgO

L'oxyde de magnésium MgO est une céramique couramment utilisée dans le monde industriel pour ses propriétés réfractaires (fours ou produits ignifugeants). Allié au fer, MgO est aussi la seconde phase la plus abondante du manteau inférieur terrestre après la phase perovskite, ce qui lui confère un intérêt particulier en géosciences. Ce premier chapitre est consacré à une revue des propriétés élastiques et plastiques de l'oxyde de magnésium.

Dans une première partie, nous présenterons principalement la structure et les propriétés élastiques de MgO. Nous nous attacherons à mettre en évidence les rôles respectifs de la pression et de la température sur ces dernières. La seconde partie de ce premier chapitre sera consacrée à une étude critique des différents travaux réalisés sur la déformation plastique de MgO. Nous en profiterons pour introduire la sensibilité des mécanismes de déformation aux régimes de température ou encore à la concentration en impuretés.

I.1 Structure, stabilité et propriétés élastiques

I.1.1 Maille cristalline et volume

MgO dispose d'une structure de type NaCl (B1) avec un réseau de Bravais cubique à faces centrées (CFC) et un groupe d'espace $Fm\bar{3}m$. Le motif de la structure est constitué d'un atome d'oxygène O et d'un atome de magnésium Mg séparés par une demi diagonale du cube. MgO peut aussi être décrit comme l'enchevêtrement de deux sous réseaux ioniques, tous deux de structure CFC (Fig. I.1a). Le paramètre de maille a évolue de 4,21 à 3,75 Å entre 0 et 100 GPa de pression (Karki et al. 1997 ; Hirose et al. 2008).

Les effets de température et de pression sur le volume de MgO ont été largement étudiés (Perez-Albuérne & Drickamer 1965 ; Spetzler 1970 ; Mao & Bell 1979 ; Duffy et al. 1995 ; Weaver et al. 1971 ; Fei 1999 ; Hama & Suito 1999 ; Karki et al. 2000 ; Matsui et al. 2000 ; Speziale et al. 2001). Calculs et expériences s'accordent sur le fait que la pression (au-delà de la température) gouverne la diminution du volume de la maille élémentaire. Le volume est de 18-19 Å³ dans les conditions standards. Il subit une diminution de l'ordre 25% à 150 GPa (Fig. I.1b).

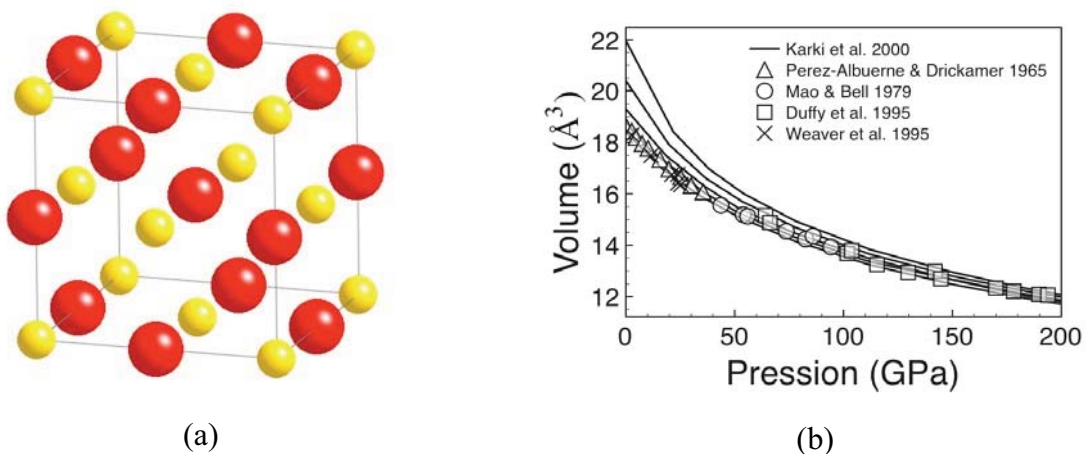


Fig. I.1 (a) Structure NaCl (ou B1) de MgO. Le réseau est de type CFC avec deux atomes par nœud (un atome de Mg et un atome de O). (b) Evolution du volume de la maille élémentaire en pression et température. Traits pleins : Karki et al. 2000 (de bas en haut: 0 K, 300 K, 1000 K, 2000 K et 3000 K). L'effet de la température n'est significatif qu'à basse pression.

La structure B1 de MgO est conservée à haute pression. La transition de phase B1-B2 (vers une structure cubique centrée CsCl) n'a pas été observée expérimentalement malgré des

pressions supérieures à 200 GPa atteintes en cellules à enclumes diamant (CED) (Duffy et al. 1995). Les calculs prévoient la transition B1-B2 pour des pressions supérieures à 400 GPa (Tab. I.1), pressions qui ne sont pas atteignables par les techniques expérimentales actuelles.

<i>Pression de transition B1-B2 (GPa)</i>	
<i>CED</i>	$> 227^a$
<i>QMC</i>	597^b
<i>HF-LCAO</i>	712^c
<i>DFT-LDA</i>	490^d 451^e 510^f 515^g 1050^h 512^c
<i>DFT-GGA</i>	478^c 428^c 418^c 515^g 509^i 664^j 400^k

Références :

- | | |
|-----------------------------------|---|
| ^a Duffy et al. 1995 | ^f Mehl et al. 1988 |
| ^b Alfè et al. 2005 | ^g Jaffe et al. 2000 |
| ^c Habas et al. 1998 | ^h Chang & Cohen 1984 |
| ^d Oganov et al. 2003 | ⁱ Oganov & Dorogokupets 2003 |
| ^e Karki et al. 1997 | ^j Drummond & Ackland 2002 |
| ^k Strachan et al. 1999 | |

Tab. I.1 Pression de transition B1-B2 dans MgO. La transition B1-B2 n'a pas été observée expérimentalement dans MgO et pour cause : les calculs ne la prédisent pas avant 400 GPa. Les techniques : CED \Leftrightarrow Cellule à Enclumes de Diamant ; QMC \Leftrightarrow Monte Carlo Quantique ; HF-LCAO \Leftrightarrow méthode de Hartree-Fock avec utilisation d'orbitales LCAO ; DFT-LDA \Leftrightarrow Théorie de la Fonctionnelle de Densité avec Approximation de la Densité Locale ; DFT-GGA \Leftrightarrow Théorie de la Fonctionnelle de Densité avec Approximation des Gradients Généralisés.

I.1.2 Équilibre de phase

La température de fusion T_f de MgO est de l'ordre de 3000 K à pression ambiante. Dans Zerr & Boehler 1994, des expériences réalisées en CED jusqu'à 30 GPa de pression ont montré une augmentation de la T_f de 1000 K. On trouve une revue des calculs et expériences réalisés sur l'évolution de la T_f de MgO en pression dans Alfè 2005. Cette étude fait état d'une croissance monotone de la T_f pouvant aller jusqu'à des valeurs de 6000 à 8000 K à 140 GPa

(Fig. I.2a). Cependant, cette revue souligne le fait que les différentes approches numériques (Cohen & Zong 1994 ; Volcadlo & Price 1996 ; Belonoshko & Dubrovinski 1996 ; Strachan et al. 2001 ; Alfè 2005 ; Belonoshko et al. 2010) ne sont pas en accord : pas moins de 5 cinq études réalisées autour de 75 GPa pour des T_f allant de 5000 à 7000 K. De plus, il semble que les prédictions expérimentales de Zerr & Boehler (1994) ne concordent pas avec les calculs puisqu'il existe un facteur trois entre les pentes des courbes de fusion expérimentales et numériques à basse pression. Différentes hypothèses ont été suggérées dans la littérature visant une remise en cause des méthodes expérimentales ou numériques : contraintes thermiques ou non hydrostatiques, taille des cellules de calcul (Alfè 2005 ; Aguado & Madden 2005 ; Tangney & Scandolo 2009).

Aguado & Madden (2005) ont montré, à l'aide de calculs réalisés en Dynamique Moléculaire (DM), que la présence de défauts (défauts de Schottky, fautes d'empilements) donne des valeurs de T_f plus cohérentes avec les mesures expérimentales de Zerr & Boehler 1994 (Fig. I.2b). D'après les auteurs, une transition de phase B1-würzite juste avant la fusion pourrait aussi justifier l'écart avec les simulations numériques. Malgré les incertitudes qui demeurent sur l'évolution de la T_f en pression dans MgO, les prédictions expérimentales et numériques montrent qu'elle se situe bien au-delà de la température du manteau. En effet, on observe au moins un facteur deux sur l'ensemble de la gamme de pression du manteau inférieur.

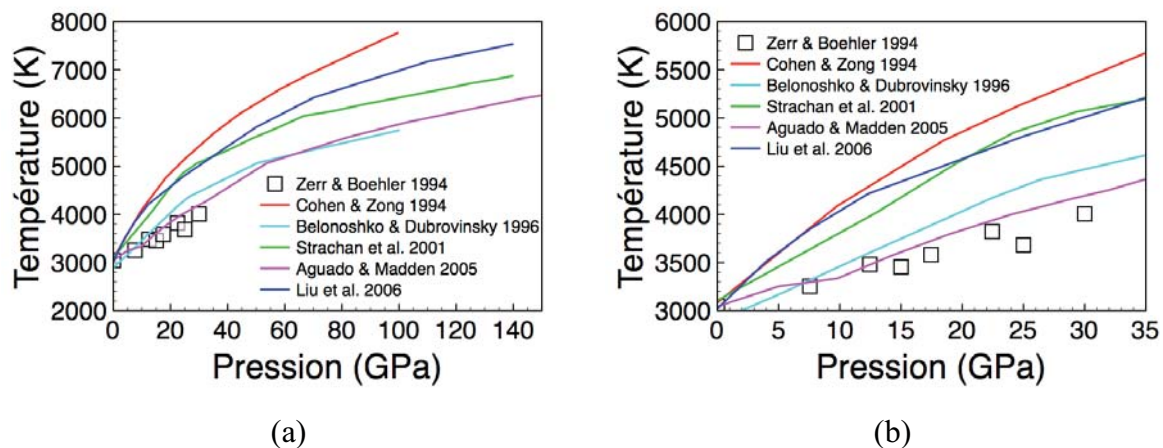


Fig. I.2 Evolution de la température de fusion de MgO en fonction de la pression. La dispersion observée sur les données issues des différentes études numériques est importante. Les calculs de Aguado & Madden (2005) sont les plus proches des données expérimentales de Zerr & Boehler (1994).

I.1.3 Constantes élastiques

L'oxyde de magnésium est cubique. Grâce aux symétries du cristal, le tenseur des constantes élastiques C_{ij} est défini en élasticité anisotrope par trois constantes indépendantes : C_{11} , C_{12} et C_{44} (Fig. I.3).

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

Fig. I.3 Tenseur des constantes élastiques pour un matériau cubique. Seules trois constantes sont nécessaires à la description du tenseur.

La littérature est assez riche en ce qui concerne les constantes élastiques pour la phase B1 de MgO (Fig. I.4). On trouve des expériences menées à pression ambiante à différentes températures (Marklund & Mahmoud 1971 ; Isaak *et al.* 1989 ; Sinogeikin & Bass 1999, 2000 ; Matsui *et al.* 2000), à température ambiante pour des pressions allant jusqu'à 50 GPa (Chen *et al.* 1998 ; Sinogeikin & Bass 1999 ; Zha *et al.* 2000 ; Speziale *et al.* 2001 ; Merkel *et al.* 2002) et des calculs à l'échelle atomique couvrant la gamme de pression du manteau inférieur (Isaak *et al.* 1990 ; Karki *et al.* 1997, 2000 ; Oganov *et al.* 2003 ; Oganov & Dorogokupets 2003 ; Alfè *et al.* 2005 ; Lu *et al.* 2005). Cependant, peu d'études font état des variations à la fois en pression et en température des constantes élastiques (Karki *et al.* 2000 ; Lu *et al.* 2005).

Les données expérimentales publiées dans Zha *et al.* 2000 contiennent des mesures de C_{ij} allant jusqu'à 55 GPa de pression à température ambiante (Fig. I.4a et Fig. I.4b). Comme cela était déjà le cas pour le paramètre de maille a (voir section I.1.1), les valeurs de C_{ij} sont davantage sensibles aux variations de pression qu'aux variations de température (Fig. I.4c et Fig. I.4d). On remarque que les approches numériques (calculs *ab-initio* : Karki *et al.* 1997) et expérimentales (mesures Brillouin et diffraction X : Zha *et al.* 2000) sont en bon accord dans leur gamme de pressions commune (Fig. I.4a et Fig. I.4b).

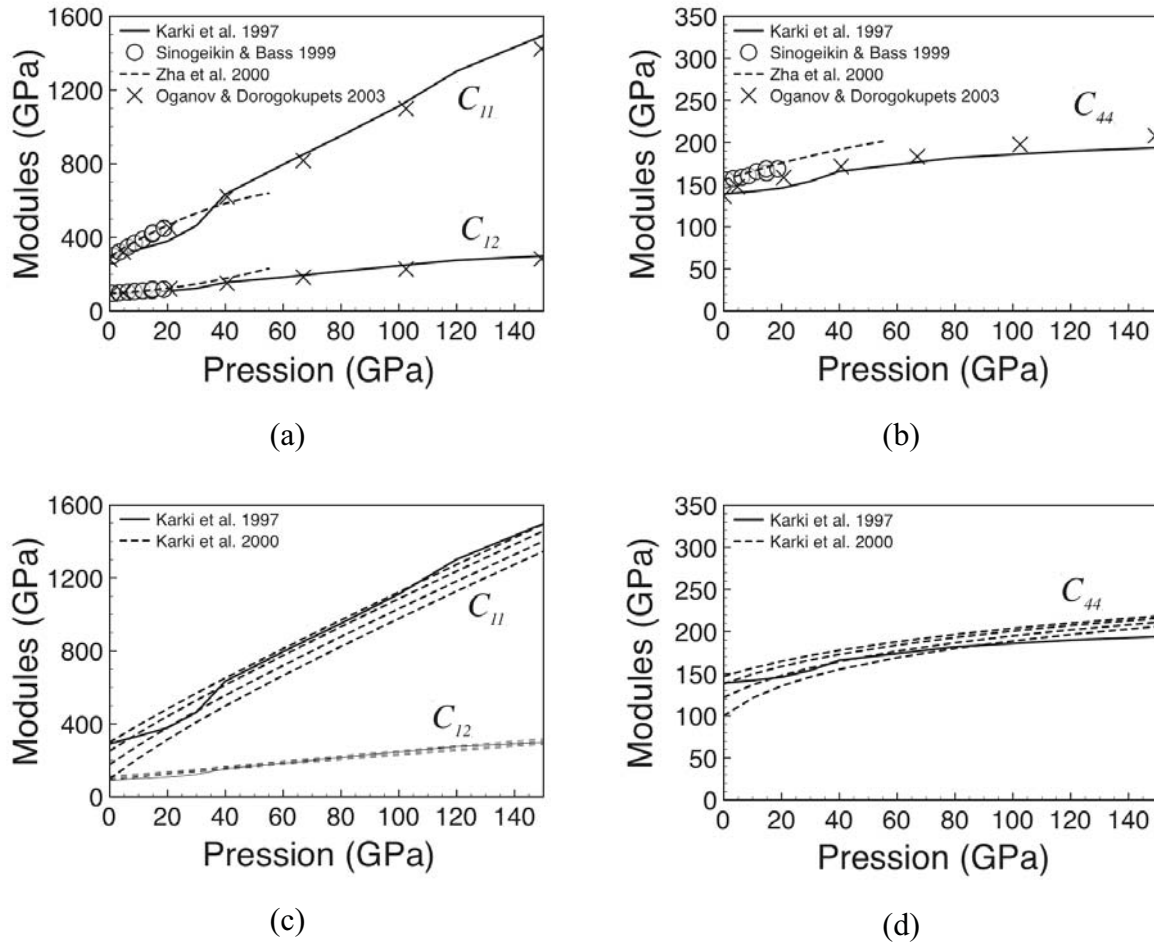


Fig. 1.4 Evolution en pression et en température des constantes élastiques. (c)-(d) Tirets : Karki et al. 2000 (de haut en bas: 300 K, 1000 K, 2000 K et 3000 K), traits pleins: Karki et al. 1997 (0 K).

Les variations du coefficient de compressibilité isotherme K_T en pression et en température (Tab. I.2), dK_T/dP et dK_T/dT , montrent qu'à partir des conditions standards, il faut en moyenne un incrément de 0,25 GPa de pression pour une variation de 1 GPa de K_T à température constante. À pression constante, une telle fluctuation nécessite une variation de température de l'ordre de 40 K. La base du manteau inférieur étant à des pressions avoisinant les 150 GPa, on en déduit une variation de K_T de plus de 500 GPa en base de manteau. Une telle variation, à pression constante, nécessiterait une variation de température de 20 000 K. (voir Karki et al. 2000 pour une revue des données expérimentales et une comparaison aux calculs)

	K_T (GPa)	dK_T/dP	dK_T/dP (GPa.K ⁻¹)	$\alpha \times 10^{-5}$ (K ⁻¹)
<i>Karki et al. 2000</i>	159	4,3	-0,0266	3,10
<i>Inbar & Cohen 1995</i>	153	4,68		3,88
<i>Isaac et al. 1999</i>	180	4,15		2,39
<i>Touloukian et al. 1977 ; Isaac et al. 1989 ; Fei 1999</i>	160	4,15	-0,027	3,12
<i>Speziale et al. 2001</i>	160,2	3,99		
<i>Hama & Suito 1999</i>	160,2 (169,5)	4,52 (4,44)		
<i>Matsui et al. 2000</i>	161		-0,028	
<i>Tange et al. 2009</i>	160,64	4,221		
<i>Sumino & Anderson 1984</i>	162,8	4,2	-0,078	
<i>Duffy et al. 1995</i>	157	4,3		
<i>Li et al. 2005</i>	162,85	3,67	-0,013	
<i>Kushwah et al. 2011</i>	161,6	4,15	-0,03	
<i>Dorogokupets & Oganov 2007</i>	(160,31)	(3,777)		

Tab. I.2 Coefficient de compressibilité isotherme K_T et coefficient de dilatation thermique α . Les données entre parenthèses sont relatives à des calculs réalisés à 0 K.

La résistance au cisaillement dans les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ est définie respectivement par C_{44} et $\frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})$. Le rapport de ces deux constantes définit le coefficient d'anisotropie élastique A .

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (\text{I.1})$$

Les valeurs de coefficient d'anisotropie élastique calculées à partir de *Karki et al. 1997* ; *Zha et al. 2000* sont représentées *Fig. I.5a*. Avant 30 GPa, données expérimentales et calculs sont en bon accord : MgO, anisotrope à pression ambiante, devient isotrope à 30 GPa. De 30 GPa à 55 GPa (pression la plus élevée atteinte dans *Zha et al. 2000*), calculs et expériences divergent ; alors que l'expérience prévoit une conservation de l'isotropie ($A=1$), le calcul prédit une légère augmentation de l'anisotropie ($A \sim 0,65$ à 50 GPa dans *Karki et al. 1997*). Une diminution de $d(C_{11}-C_{12})/dP$ visible sur les données expérimentales entre 30 GPa et 55 GPa (*Fig. I.5b*) explique les différences de coefficient d'anisotropie élastique entre *Zha et al. 2000* et *Karki et al. 1997*. MgO est anisotrope à pression ambiante, isotrope à 30 GPa et redevient anisotrope à plus haute pression.

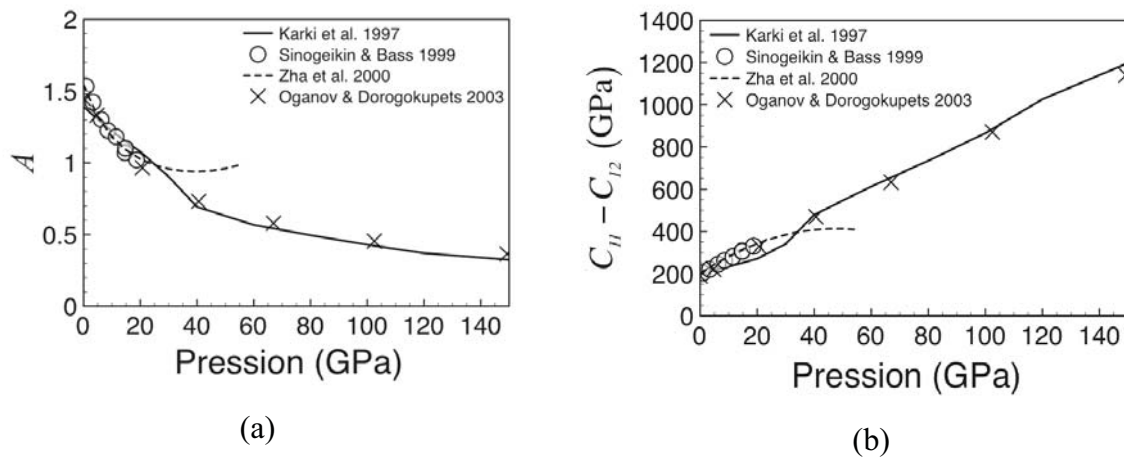
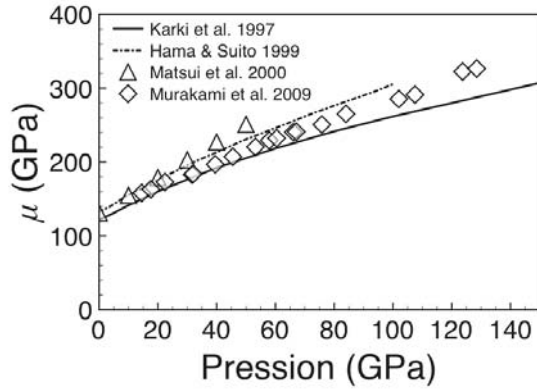


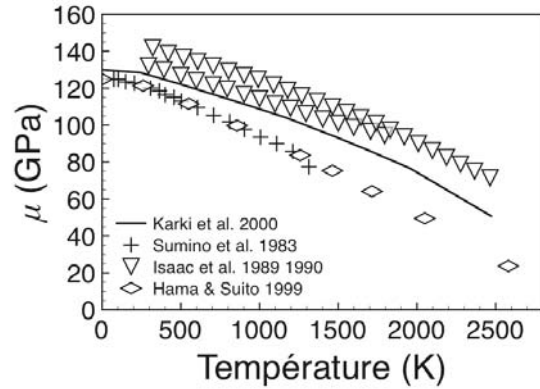
Fig. I.5 (a) Influence de la pression sur le coefficient d'anisotropie élastique. Le coefficient d'anisotropie varie de 1,5 à 0,5 entre 0 et 150 GPa. (b) Evolution de $C_{11}-C_{12}$ en fonction de la pression. Les calculs sont réalisés en appliquant l'équation (I.1) aux constantes élastiques issues de Karki et al. 1997 ; Sinogeikin & Bass 1999 ; Zha et al. 2000 ; Oganov & Dorogokupets 2003.

Le module de cisaillement μ est défini en élasticité anisotrope par l'équation (I.2). En élasticité isotrope ($A=1$), $\mu=C_{44}$. Le module de cisaillement est sensible aux variations de température et de pression (*Fig. I.6*). L'étude de *Karki et al. (2000)* montre que, comme pour les C_{ij} lorsque pression et température sont corrélées, l'effet de pression est prépondérant sur les variations du module de cisaillement ; Autrement dit : en pression, l'effet de la température sur μ est de moins en moins important (*Fig. I.6c*). D'autres données figurent dans la littérature, mais n'ont pas été représentées par souci de visibilité, le lecteur peut se référer à *Spetzler 1970* ; *Jackson & Niesler 1982* ; *Chopelas 1992* ; *Sinogeikin & Bass 2000* et *Zha et al. 2000* pour une revue plus complète.

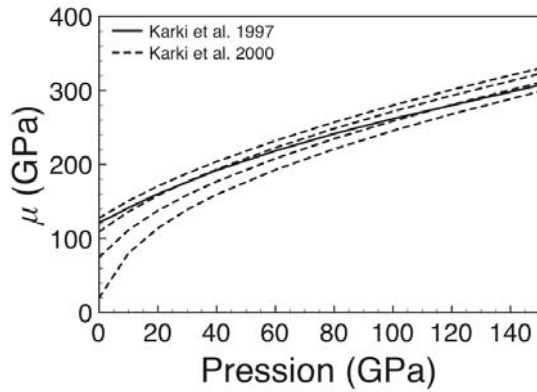
$$\mu = \sqrt{C_{44} \frac{(C_{11} - C_{12})}{2}} \quad (\text{I.2})$$



(a)



(b)



(c)

Fig. I.6 Evolution du module de cisaillement anisotrope μ en pression et température. (c) Tirets : Karki et al. 2000 (de haut en bas : 300 K, 1000 K, 2000 K et 3000 K).

I.2 Déformation plastique

I.2.1 Les systèmes de glissement

Généralement, les systèmes de glissement sont définis par les plans denses (plans de glissement) et les plus petites translations de réseau (vecteur de Burgers). Dans la structure CFC, le cisaillement opère suivant les directions de type $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ qui définissent le vecteur de Burgers et dans les plans $\{111\}$, $\{110\}$ ou encore $\{100\}$. Pour les cristaux ioniques, une troisième restriction vient contraindre les systèmes de glissement probables ; le glissement ne doit apparaître que dans une direction ou dans un plan qui ne force pas deux ions de même

charge à trop se rapprocher (*Gilman 1959*). C'est pour cette raison que les dislocations dans MgO (et plus généralement dans les matériaux de structure NaCl à faible ionicité) glissent plus facilement à pression ambiante dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$ ou $\{111\}$ pourtant plus denses (*Stokes 1963 ; Haasen et al. 1985 ; Takeuchi et al. 2009*).

Dans *Hulse et al. 1963*, les auteurs confirment que la contrainte de cisaillement est plus élevée dans les plans $\{100\}$ que dans $\{110\}$ sur une gamme de températures comprises entre 300 K et 1500 K. L'étude montre que quatre sur six des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ sont activés lors de sollicitations $\langle 100 \rangle$ ou $\langle 110 \rangle$, avec respectivement des facteurs de Schmid $S=0,5$ et $S=0,25$ (la contrainte projetée étant nulle sur les deux systèmes restants). La loi de Schmid a été vérifiée dans cette étude avec une limite d'élasticité doublée lors de sollicitations $\langle 110 \rangle$. L'étude ne montre aucune évidence de glissement dans les plans $\{111\}$. Les facteurs de Schmid, pour les plans de glissement $\{110\}$, $\{100\}$ et $\{111\}$ sollicités suivant $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$, sont rappelés *Tab. I.3*.

	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$
$\langle 100 \rangle$	0,5 pour 4/6 systèmes	0 pour tous les systèmes	$\sqrt{6}/6 (\sim 0,41)$ pour 8/12 systèmes
$\langle 110 \rangle$	0,25 pour 4/6 systèmes	$\sqrt{2}/4 (\sim 0,35)$ pour 4/6 systèmes	$\sqrt{6}/6 (\sim 0,41)$ pour 4/12 systèmes
$\langle 111 \rangle$	0 pour tous les systèmes	$\sqrt{2}/3 (\sim 0,47)$ pour 3/6 systèmes	$\sqrt{6}/9 (\sim 0,27)$ pour 6/12 systèmes

Tab. I.3 Facteurs de Schmid dans les deux principales familles de systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ ainsi que dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ pour les trois axes de sollicitation $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$.

Contrairement aux observations réalisées dans d'autres matériaux de structure CFC, peu d'études font référence à du glissement dans des plans $\{111\}$ pour MgO (*Clauer & Wilcox 1976 ; Mariani et al. 2009*). Les plans $\{122\}$ et $\{112\}$ sont des plans potentiels notamment pour le glissement dévié et ont été observés par *Messerschmidt & Appel (1989)*. Observations confirmées par *Tromas et al. (2000)* qui considèrent du glissement localisé dans

les plans $\{112\}$ à forte contrainte lors d'essais de nanoindentation. On ne trouve pas plus d'informations concernant l'activation de ces plans dans la littérature.

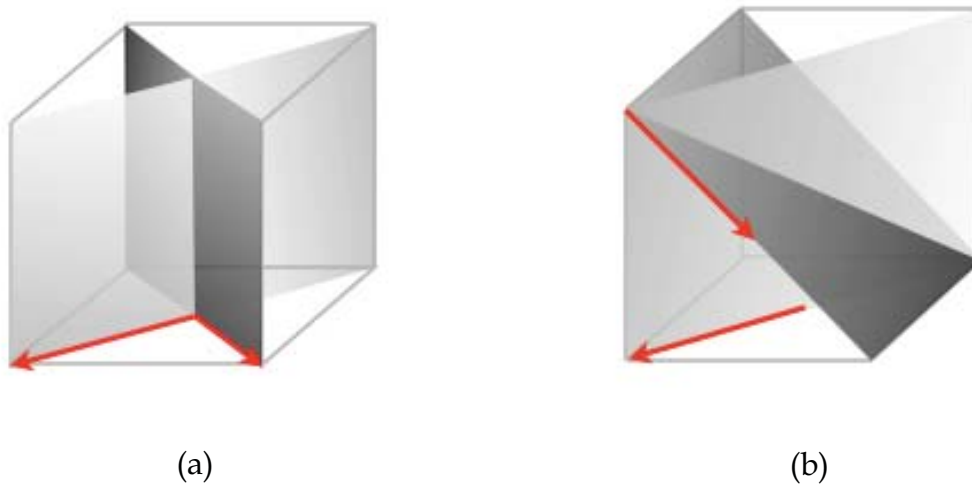


Fig. I.7 Systèmes de glissement. (a) Les systèmes $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0](110)$ et $\frac{1}{2}[110](\bar{1}\bar{1}0)$ illustrent une configuration de systèmes à 90° (encore appelé systèmes conjugués), les deux systèmes sont dits orthogonaux vis à vis de (001) et obliques vis à vis de (100) ou (010) . L'intersection entre deux systèmes conjugués se fait normalement à un plan de base. (b) Les systèmes de glissement $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0](110)$ et $\frac{1}{2}[0\bar{1}\bar{1}](011)$ sont orientés à 120° . L'intersection entre deux plans à $60^\circ/120^\circ$ se fait le long d'une direction $\langle 111 \rangle$.

Les configurations entre systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ portent des dénominations relatives à l'orientation de leurs vecteurs de Burgers respectifs : on parle de systèmes à 90° , dits « conjugués » (Fig. I.7a) ou de systèmes à $60^\circ/120^\circ$ (Fig. I.7b) (Day & Stokes 1964). On trouve aussi dans la littérature les dénominations de plans « orthogonaux » (à 90°) ou « obliques » (à 45°) (Johnston & Li 1959 ; Groves & Kelly 1963), qui sont cette fois relatives à l'orientation du plan par rapport à la direction d'observation ou à l'axe de sollicitation (Fig. I.7).

Plusieurs études d'analyse de surface ont été réalisées afin de caractériser l'activité des systèmes de glissement (Groves & Kelly 1963 ; Day & Stokes 1964 ; Copley & Pask 1965). Dans Day & Stokes 1964, l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est fonction de la température. À basse température ($300 \text{ K} < T < 1000 \text{ K}$), le glissement est confiné dans un seul système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Les fluctuations locales de contrainte entraînent l'activation d'un plan plutôt qu'un autre ce qui peut donner lieu à de l'anisotropie plastique. Dans un régime de températures intermédiaires ($1000 \text{ K} < T < 1400 \text{ K}$), seul un couple de systèmes conjugués s'interpénètre. L'activité de système à 90° a aussi été observée dans Copley & Pask 1965 (voir

section I.2.6). Dans ces deux régimes de température, la distribution initiale des dislocations joue un rôle majeur quant à l'activation préférentielle d'un système par rapport à un autre. À haute température, l'étude fait référence à des systèmes à $60^\circ/120^\circ$ et à 90° qui peuvent s'interpénétrer sans se bloquer.

Quel que soit le type de configuration entre systèmes, les études MET montrent une augmentation de la densité de dislocations dans les directions $\langle 111 \rangle$, directions selon lesquelles les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ se croisent (*Washburn et al. 1960*).

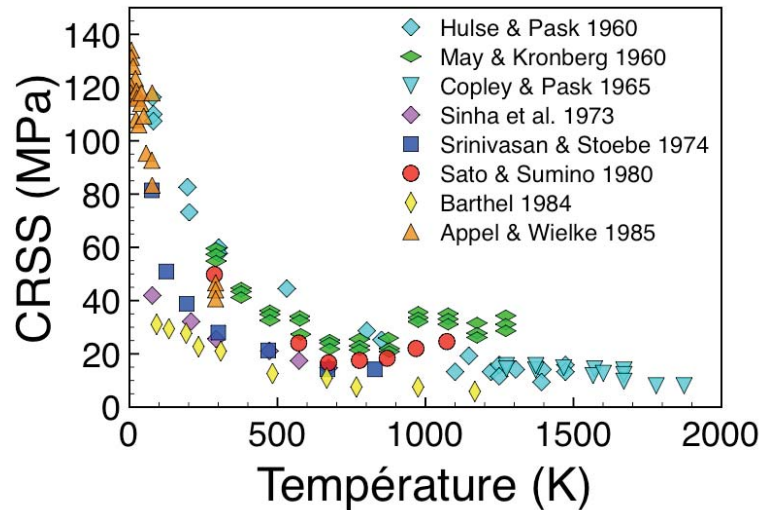
I.2.2 Contraintes critiques de cisaillement et microstructure

Il existe dans la littérature un large panel de données concernant la déformation de monocristaux de MgO orientés $\langle 100 \rangle$ quelle que soit la température. Cela se justifie par le fait que les plans $\{100\}$ soient des plans de clivage de la structure et que cette orientation permet un facteur de Schmid maximal dans les plans $\{110\}$. Les expériences et études de contraintes critiques de cisaillement sont très souvent scindées en fonction de la gamme de température explorée. Il est cependant beaucoup plus difficile de retrouver des données concernant l'activité des plans $\{100\}$.

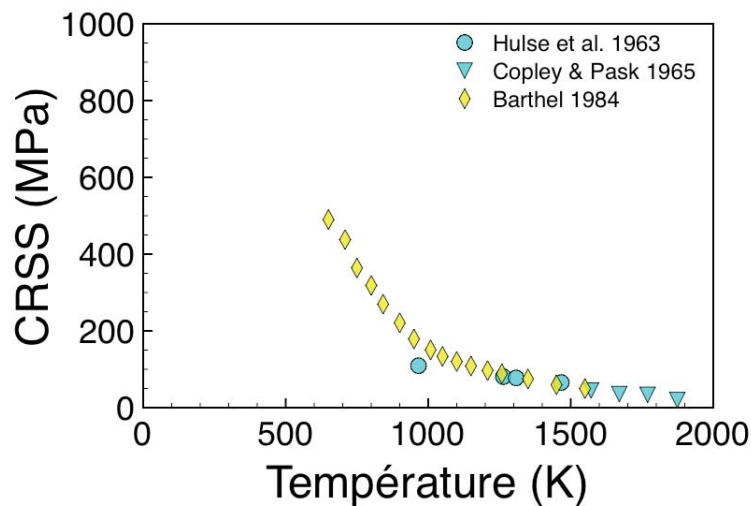
L'étude *Appel & Wielke 1985* est consacrée à une série de mesures de CRSS dans $\{110\}$ jusqu'à 4,2 K. Les auteurs soulignent notamment le fait que, bien que les impuretés interfèrent avec le glissement des dislocations dans MgO, elles ne peuvent expliquer à elles seules la décroissance exponentielle des CRSS en température. Cette décroissance est due à un mécanisme de Peierls qui devient prédominant à basse température. En extrapolant les données de *Appel & Wielke (1985)*, on peut évaluer une contrainte de Peierls τ_P de l'ordre de 150 MPa pour les plans $\{110\}$, les mesures font écho à 118 MPa pour $T=4,2$ K et à 132 MPa pour $T=5,6$ K. Ces deux dernières valeurs montrent la difficulté à effectuer des mesures dans de telles conditions de température. Bien que l'intervalle de mesure estimé sur l'extrapolation à 0 K soit de plusieurs dizaines de MPa, elle fournit une valeur approchée de la contrainte de Peierls qui a été corroborée par d'autres (*Singh & Coble 1974a ; Woo & Puls 1997*).

L'étude *Hulse & Pask 1960* présente une série d'essais de compression dédiée à la fois à des mesures de CRSS mais aussi à l'investigation des mécanismes liés à la déformation de MgO. Ces données concernent les deux systèmes de glissement et des températures allant de la centaine de Kelvin à 1400 K pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Parmi les interprétations

majeures de cette étude, nous notons la description des effets de température. La décroissance exponentielle des CRSS est le fruit de mécanismes thermiquement activés (Fig. I.8a). Voir Copley & Pask 1965, pour une revue des travaux de C. Hulse, S. Copley et J. Pask sur le sujet.



(a)



(b)

Fig.I.8 Evolution des contraintes critiques de cisaillement CRSS en fonction de la température. (a) CRSS dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Les données dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ montrent une dispersion assez conséquente. La contrainte de Peierls est de l'ordre de 150 MPa. (b) Evolution des CRSS dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Peu de données sont disponibles pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, on peut émettre l'hypothèse d'une contrainte de Peierls supérieure au gigapascal au regard des données de Barthel (1984). On note le caractère thermiquement activé des CRSS, dans les deux familles de systèmes, propre aux matériaux à friction de réseau.

D'autres travaux viennent compléter les mesures de contraintes critiques dont ceux de *Barthel (1984)*, qui fournissent une description des CRSS dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (*Fig. I.8b*). Entre autres, *May & Kronberg 1960* ; *Copley & Pask 1965* ; *Sinha et al. 1973* ; *Srinivasan & Stoebe 1974* ; *Sato & Sumino 1980* viennent enrichir les CRSS présentées *Fig. I.8*.

Les mesures de CRSS expérimentales dans MgO permettent d'aboutir à certaines conclusions. Tout d'abord, concernant le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, il existe d'importantes fluctuations entre les différents jeux de données et une étude plus poussée des conditions expérimentales est nécessaire à une interprétation plus pertinente de ces valeurs (voir section III.4). La contrainte critique de cisaillement augmente fortement à faible température, avoisinant les 150 MPa à 0 K, ce qui conforte la théorie d'*Appel & Wielke (1985)* qui repose sur le fait que la déformation de MgO à basse température est contrôlée par la friction de réseau. La dispersion des données dans un régime intermédiaire de température est liée à d'autres mécanismes thermiquement activés, comme le franchissement d'obstacles de type impuretés ou précipités. À haute température, les interactions entre dislocations sont responsables des valeurs de CRSS (*Day & Stokes 1964* ; *Copley & Pask 1965*), qui varient beaucoup moins avec la température.

Dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, bien que le caractère thermiquement activé des CRSS soit encore plus marqué que dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, les données expérimentales ne permettent pas une évaluation rigoureuse de la contrainte de Peierls (aucune donnée répertoriée pour $T < 600$ K). On peut cependant émettre l'hypothèse d'une contrainte de Peierls supérieure au gigapascal au regard des données présentées dans *Barthel 1984*.

On définit, pour les deux familles de systèmes, trois régimes : un régime basse température contrôlé par la friction de réseau, un régime de températures intermédiaires gouverné à la fois par les impuretés et la friction de réseau et un régime haute température régi par les interactions entre dislocations.

Il est possible de définir une température critique appelée « température de transition athermique » T_a à partir de laquelle les contraintes critiques de cisaillement ne varient plus avec la température (fin du régime thermiquement activé). Pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, elle est comprise entre 600 K et 800 K en fonction de la série de données observée (*Fig. I.8a*). De manière analogue, la mesure de contrainte ne semble plus dépendre de la température au-delà de 1300 K pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (*Fig. I.8b*).

La microstructure, développée en cours de déformation, est généralement observée par microscopie électronique en transmission (MET) ou par microscopie *in situ* (Appel et al. 1977 ; Foitzik et al. 1989). L'organisation des dislocations dépend de nombreux paramètres comme la température, la déformation ou la concentration en impuretés.

À température ambiante, de longues dislocations vis sont observées dans les deux familles de systèmes de glissement principales (Appel et al. 1977 ; Messerschmidt 2010) (Fig. I.9a). Cette microstructure est caractéristique des matériaux à friction de réseau. Elles ont une mobilité plus réduite que celle des dislocations coins et sont épinglées par les impuretés (Fe, Al, Ni, etc.) ou par les défauts d'irradiation (paires de Frenkel) générés par le flux d'électrons du microscope (Gorum et al. 1960 ; Appel et al. 1984). Les dislocations coins sont courtes et très mobiles. Généralement, elles ne sont visibles que dans les premiers stades de la déformation, comme c'est le cas dans le fer- α (Boudet & Kubin 1975). Néanmoins, elles sont parfois observées dans des stades plus avancés de la déformation, sous forme de dipôles entraînés par le glissement des dislocations vis (Foitzik et al. 1989).

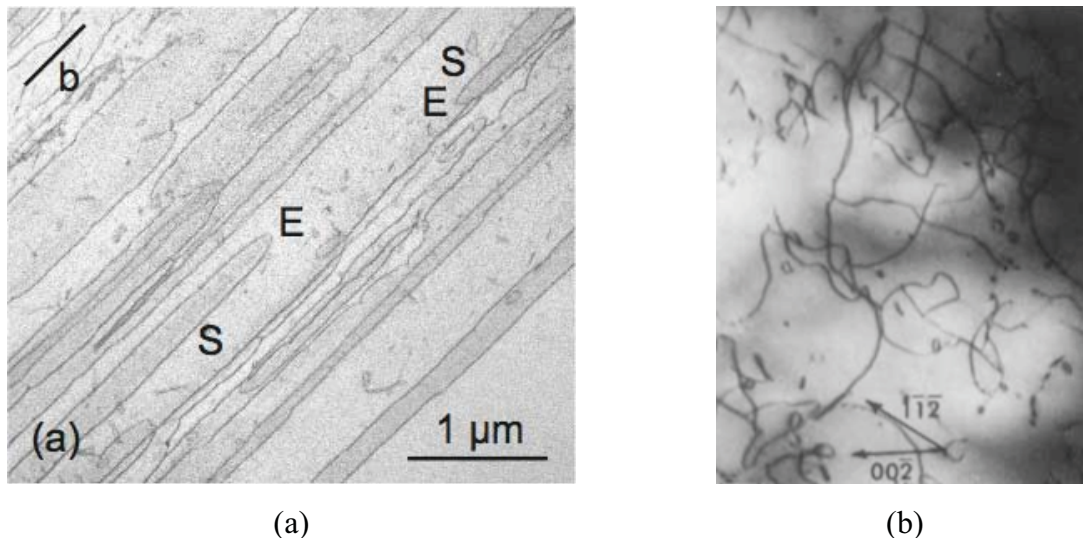


Fig. I.9 Micrographies de dislocations dans MgO par microscopie électronique en transmission. (a) Lamelle mince d'une bande de glissement à 45° prise dans un HVEM (High Voltage Electron Microscopy) à température ambiante. Les boucles sont anisotropes et allongées dans la direction vis. Micrographie issue de Messerschmidt 2010. (b) Lamelle mince observée au MET dans la direction [110] à 1400 °C. La courbure des boucles est plus isotrope qu'à basse température. Micrographie issue de Clauer & Wilcox 1976.

À plus haute température ($T > 1000$ K), lorsque les dislocations ne sont plus soumises à la friction de réseau, elles ont une forme plus courbée (Clauer & Wilcox 1976 ; Haasen et al. 1986) (Fig. I.9b). Peu de longues portions droites sont observées dans cette gamme de

températures, si ce n'est l'étude de *Groves & Kelly (1963)* qui fait référence à la présence de longues dislocations coins.

I.2.3 Impuretés et traitement thermique

De nombreuses études font référence à l'influence des impuretés sur la mesure de CRSS dans MgO (*Hulse & Pask 1960 ; May & Kronberg 1960 ; Srinivasan & Stoebe 1974 ; Copley & Pask 1965 ; Sato & Sumino 1980*). L'augmentation des CRSS due à la concentration en impuretés est liée à la fois à leur état d'oxydation (*Groves & Fine 1964 ; Srinivasan & Stoebe 1970 ; Sato & Sumino 1980*) et à leur agencement spatial (*Johnston & Gilman 1959 ; Gorum et al. 1960 ; Davidge 1967*), ces deux paramètres étant corrélés au type de traitement thermique subi par l'échantillon avant déformation.

Pour exemple, l'étude de *Gorum et al. (1960)* met en évidence l'influence de la présence de fer sur les CRSS dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Rappelons trois conclusions importantes de cette étude :

- Pour un échantillon non traité thermiquement contenant 10 ppm de fer, la CRSS dans $\{110\}$ vaut 40 MPa à température ambiante. Dans un échantillon contenant 30 ppm de fer, elle a été mesurée à 140 MPa et à 180 MPa pour un échantillon contenant 3000 ppm de fer. Sans traitement thermique, une faible concentration en impuretés peut entraîner de larges variations de CRSS (*Fig. I.10*).
- Un échantillon traité à 2000 °C, avant retour à température ambiante, contenant 3000 ppm de fer a une CRSS inférieure à celle d'un échantillon non traité en contenant 30 ppm (*Fig. I.10*). De plus, il voit sa ductilité augmenter.
- Plus un échantillon est trempé rapidement après traitement, plus sa CRSS est faible et sa ductilité importante.

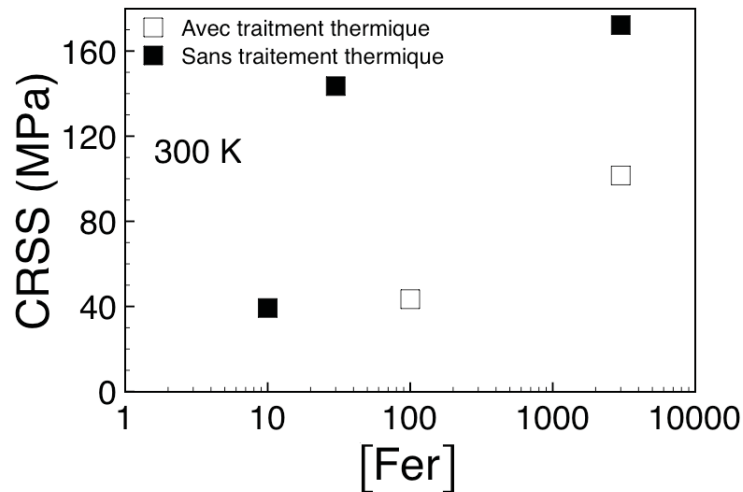


Fig. 1.10 Influence de la concentration en fer (en ppm) et du traitement thermique sur la CRSS à température ambiante. Les données sont issues de Gorum et al. 1960. Le traitement thermique a été effectué à 2000 °C dans le vide.

Traitement thermique et vitesse de trempe sont des facteurs importants qui gouvernent la réorganisation spatiale des impuretés dans le monocristal. Une trempe lente permet aux impuretés de diffuser vers les dislocations (ce qui entraîne leur blocage) ou de précipiter. Une trempe rapide force les impuretés à rester en solution ce qui réduit leur effet. L'influence de la vitesse de trempe sur l'épinglage des dislocations est aussi décrite par *Johnston & Gilman (1959)* dans les termes d'« épinglage statique » et de « résistance dynamique ».

Srinivasan & Stoebe (1970) et *Sato & Sumino (1980)* soulignent le rôle de l'atmosphère, dans laquelle est effectué le traitement thermique, sur l'état d'oxydation des impuretés et leur effet. Une atmosphère réductrice (l'argon par exemple) favorise la formation d'impuretés divalentes pour un effet moindre que celui des impuretés trivalentes induites par un traitement thermique en atmosphère oxydante (l'air).

Enfin, l'interaction dislocation-défaut ponctuel a été largement étudié par le groupe de *U. Messerschmidt* de Halle en Allemagne. *Messerschmidt 1988* présente une étude détaillée du calcul de l'énergie d'activation ΔG du franchissement d'obstacles ponctuels. *Appel et al. 1976* montre une comparaison des distances entre obstacles ponctuels mesurées au MET et celles prédites par les modèles statistiques. Une revue générale de ces travaux est présentée dans *Messerschmidt 2010*.

I.2.4 Durcissement

Différents mécanismes tels que les interactions dislocations-défauts ponctuels, la formation de dipôles ou plus généralement les interactions entre dislocations peuvent être à l'origine d'un durcissement $\theta = d\tau/d\gamma$ dans MgO monocristallin. En fonction de la température ou de la vitesse de déformation, ces mécanismes diffèrent et entraînent des variations de θ .

Grâce à des essais de compression suivant $\langle 100 \rangle$, *Hulse & Pask (1960)* montrent que MgO est ductile même à basse température (6% de déformation avant fracture à $T=77$ K). Des analyses de surface révèlent que des bandes de glissement issues de l'activité de deux systèmes conjugués bloquent l'activité des systèmes restants comme dans *Day & Stokes 1964*. θ ne varie pas avec la déformation dans la gamme de températures étudiée ; entre 77 K et 1093 K la contrainte est une fonction linéaire de la déformation jusqu'à la rupture de l'échantillon (*Fig. I.11a*). θ croît lorsque la température augmente de telle sorte que le stade I de déformation n'est visible qu'aux plus basses températures (*Fig. I.11a*).

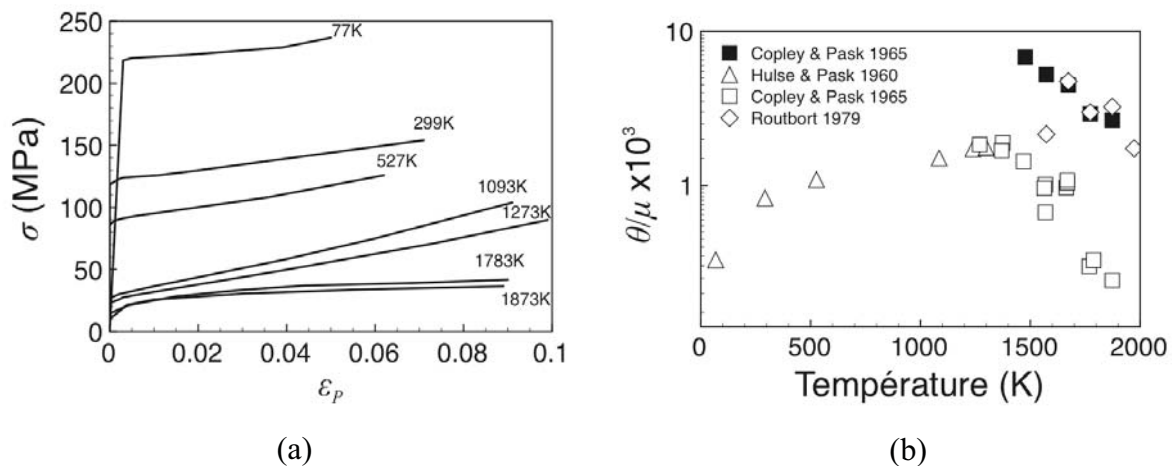


Fig. I.11 (a) Courbes contraintes-déformation en sollicitation $\langle 100 \rangle$. Données issues de *Hulse & Pask 1960* ; *Copley & Pask 1965*. (b) Evolution de θ en température. Le module de cisaillement a été ajusté sur une loi du type $\mu(T) = 140 - 0,025 \cdot T$, en accord avec les données expérimentales présentées Fig. I.6.

Le même type d'étude (essais à contrainte imposée + analyses de surface) a été mené par *Copley & Pask (1965)* pour des échantillons compressés suivant les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ entre 1273 K et 1873 K. Les échantillons sollicités dans la direction $\langle 111 \rangle$ permettent une analyse des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Pour les échantillons sollicités suivant $\langle 100 \rangle$, θ passe par une valeur maximum autour de 1400 K puis diminue ensuite. Même constat pour

les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, cependant les valeurs de θ sont plus élevées (*Fig. I.11b*). *Routbort (1979)* a réalisé des expériences à vitesse de déformation imposée menant à des résultats comparables à haute température (*Fig. I.11b*).

Jusqu'aux plus hautes températures, un couple de systèmes conjugués $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ contrôle la déformation aux dépens du second couple activé. Les interactions dislocation-dislocation entre systèmes à $60^\circ/120^\circ$ sont considérablement plus fortes que celles entre systèmes à 90° , même à haute température. *Copley & Pask (1965)* rappellent le calcul initialement introduit par *Kear et al. (1959)* sur la formation de jonctions entre dislocations : deux dislocations issues de plans $\{110\}$, avec des vecteurs de Burgers à $60^\circ/120^\circ$, qui entrent en contact peuvent minimiser leur énergie sous la forme d'une unique portion de dislocation appelée jonction :

$$\frac{1}{2}[\bar{1}01](101) + \frac{1}{2}[01\bar{1}](011) \rightarrow \frac{1}{2}[\bar{1}10](112) \quad (I.3)$$

La dislocation résultante est alignée suivant la direction $[\bar{1}1\bar{1}]$, elle est donc de caractère coin et peut uniquement glisser dans le plan (112). Les plans $\{112\}$ n'ayant été observés que dans le cadre de sollicitations à très forte contrainte (*Tromas et al. 2000*), nous pouvons considérer que cette jonction est sessile.

Les jonctions entre dislocations sont des obstacles au glissement des dislocations mobiles. On peut donc interpréter les observations sur les bandes de cisaillement de *Hulse et al. 1960 ; Day & Stokes 1964 ; Copley & Pask 1965 (Fig. I.12b)* comme suit : (1) un couple de systèmes conjugués A et B se traversent sans que les dislocations ne forment de jonctions (vecteurs de Burgers à 90°). Le glissement des dislocations n'est pas entravé. (2) Les deux systèmes actifs restants C et D forment des jonctions sessiles respectivement avec A et B (vecteurs de Burgers à $60^\circ/120^\circ$) ce qui bloque leur activité.

Si la diminution de θ à haute température (observée *Fig. I.11b*) est justifiée par l'apparition de mécanismes permettant la restauration (annihilation de dipôles grâce à la diffusion, montée et glissement dévié), on peut penser que les interactions entre dislocations entre systèmes à $60^\circ/120^\circ$ sont des obstacles à la déformation moins durs lorsque la température est faible. Cependant, aucune justification physique n'est attribuée à cette observation au cours de l'étude.

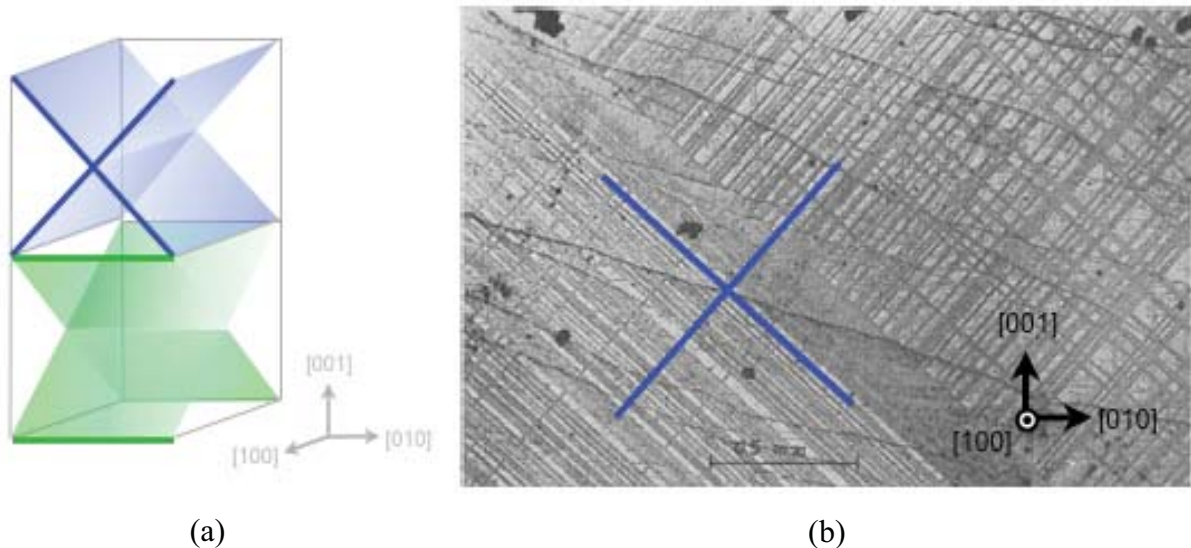


Fig. I.12 (a) Schéma des traces laissées en surface par deux couples de systèmes conjugués. Sur la face (100), le couple de systèmes en bleu induit des traces orientées $[011]$ et $[0\bar{1}1]$ alors que les systèmes en vert induisent des traces suivant $[010]$. (b) Bandes de cisaillement révélées par analyse de surface (100) après un essai en sollicitation $\langle 100 \rangle$. Seules des traces orientées $[011]$ et $[0\bar{1}1]$ sont observables. Aucune trace suivant $[010]$ n'est observée, un seul couple de systèmes orthogonaux est donc actif. Micrographie issue de Hulse & Pask 1960.

I.2.5 Vitesse, exposant de contrainte

La vitesse des dislocations v fait le lien entre la densité de dislocations mobiles ρ_m et la déformation plastique via la loi d'Orowan :

$$\dot{\epsilon} = S \rho_m b v \quad (\text{I.4})$$

Où b est le vecteur de Burgers, S le facteur de Schmid et $\dot{\epsilon}$ la vitesse de déformation

Deux séries d'expériences ont été menées par *Singh & Coble (1974a et 1974b)* pour mesurer la dépendance en contrainte et en température de la vitesse des dislocations dans MgO. La première série concerne des échantillons dits "purs" qui contiennent ~ 100 ppm d'impuretés dont seulement 20 ppm de fer (*Singh & Coble 1974a*). La seconde étude concerne des échantillons dopés à 150 ppm de Fe^{3+} , le lecteur pourra se référer à *Singh & Coble 1974b* pour plus d'informations sur cette dernière. L'ensemble des échantillons "purs" a été soumis à un traitement thermique de 40h dans l'air à 1300°C . À partir de ce traitement, une série d'échantillons dits « Pre » a subi un traitement supplémentaire d'une semaine à 1200°C en atmosphère réductrice afin de minimiser le nombre de cations trivalents. On distingue les

échantillons « Pre » des échantillons « Pox » qui n'ont pas subi de traitement thermique réducteur. Les mesures de vitesses ont été réalisées à l'aide d'indentations successives sur le cristal à température ambiante, 100 °C et 150 °C. Les résultats de cette étude sont rappelés *Fig. I.13*.

Pour une contrainte donnée, quel que soit le degré d'oxydation de l'échantillon, la vitesse des dislocations coins est toujours plus grande que celle des dislocations vis (dans la gamme de température étudiée, *Fig. I.13*). Pour 10 MPa de contrainte à température ambiante dans les échantillons « Pre », on peut estimer une vitesse de l'ordre du $\mu\text{m/s}$. Bien que les échantillons « Pox » soient de concentration faible en ions ferriques (19 ppm de Fe^{3+}), les vitesses de dislocations mesurées dans les échantillons « Pox » sont plus faibles que celles dans les échantillons « Pre » (6 ppm de Fe^{3+}). La concentration en Fe^{3+} dans les échantillons « Pox » est suffisante pour entraîner l'épingleage des dislocations de manière significative. Cette observation confirme l'hypothèse de *Gorum et al. (1960)* qui précise que l'effet des impuretés n'est pas linéaire en concentration (*Fig. I.10*) : une très faible concentration en impuretés trivalentes (comme dans les échantillons « Pox ») épingle et ralentit déjà les dislocations.

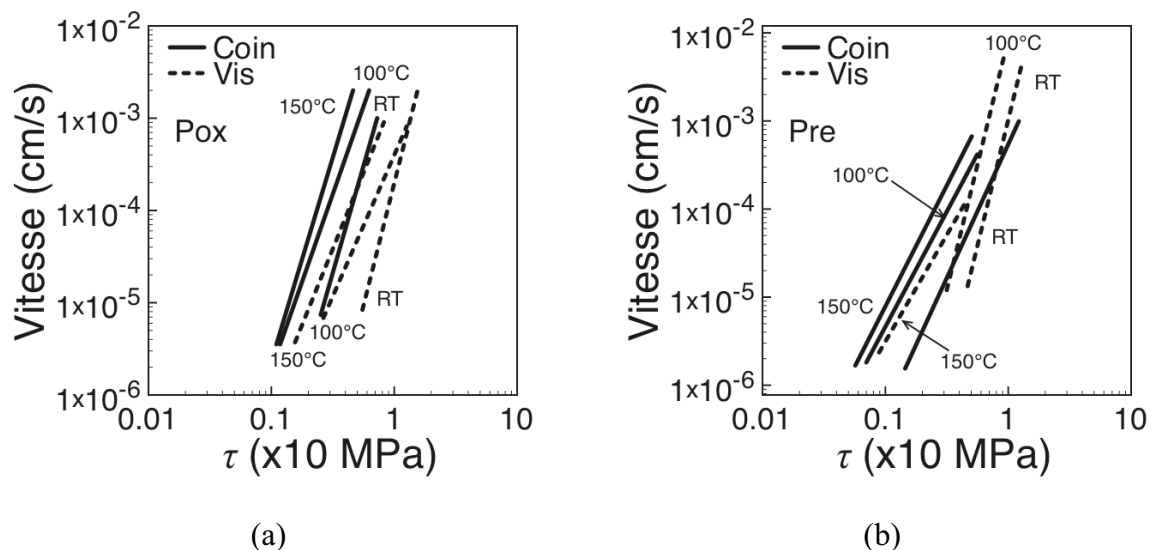


Fig. I.13 Vitesses de dislocations (a) Ajustement des mesures de vitesses des dislocations pour les échantillons de type « Pox ». (b) Ajustement des mesures de vitesses de dislocations pour les échantillons de type « Pre ». Une faible concentration en impuretés influe sur la vitesse des dislocations. Données issues de Singh & Coble 1974a, l'ajustement a été réalisé à l'aide d'une équation de la forme $v = A\tau^n$.

Les auteurs présentent des ajustements de leurs mesures par une équation de la forme (I.5).

$$\dot{\nu} = A \tau^n \quad (\text{I.5})$$

Où A et n sont des constantes, pour une température donnée.

Cette équation phénoménologique est régulièrement décrite comme « validée » par *Johnston & Gilman (1959)* dans plusieurs références (*Sinha et al. 1973 ; Srinivasan et al. 1973*). L'équation plus générale qui apparaît dans la publication d'origine est l'équation (I.6) qui a été introduite par *Dorn (1956)* sous la forme (I.7) pour décrire la dépendance en contrainte et en température de la déformation.

$$\dot{\nu}(\tau, T) = f(\tau) e^{-\Delta G / kT} \quad (\text{I.6})$$

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \tau^n e^{-\Delta G / kT} \quad (\text{I.7})$$

Où ΔG est une énergie d'activation.

L'exposant de contrainte n , calculé à partir de l'équation (I.5), dans les échantillons « Pre » est de 3 pour les dislocations coins, il varie peu avec la température. Il est compris entre 2,5 et 5,8 pour les dislocations vis. Il est de 4 pour les dislocations coins dans les échantillons « Pox », il varie entre 3 et 6,5 pour les dislocations vis. L'ensemble des mesures a été effectué pour des contraintes relativement faibles inférieures à 10 MPa.

Sato & Sumino (1980) présentent le même type de mesures de vitesses jusqu'à 700 °C mais réalisées à des contraintes plus importantes que dans *Singh & Coble 1974a* (par exemple, à température ambiante, les mesures sont faites à partir de 60 MPa). Dans l'échantillon le plus pur de l'étude, l'exposant de contrainte varie de 20 à température ambiante à 7 à 700 °C où la vitesse est de l'ordre du m/s pour une contrainte de 20 MPa.

Enfin, des mesures de vitesse sont présentées dans *Appel et al. 1984* dans du MgO dopé Fe. Les auteurs présentent des données à température ambiante et à 77 K. Les mesures ont été effectuées sur les deux caractères de dislocation dans des échantillons fortement irradiés. Les vitesses des dislocations vis et coin sont comparables. Les micrographies montrent des dislocations vis très épinglées. L'exposant de contrainte pour les dislocations vis à 77 K est de 50 pour une contrainte comprise entre 90 et 100 MPa.

Ces trois études s'accordent sur le fait qu'à faible température, la vitesse des dislocations vis est de l'ordre du $\mu\text{m/s}$ alors qu'elle est plus importante à haute température (cm/s voir m/s). L'exposant n varie avec la contrainte et la température. Il diminue quand la température augmente ou lorsque la contrainte diminue, il augmente lorsque la température diminue ou lorsque la contrainte augmente. Les impuretés jouent un rôle majeur quant aux mesures de vitesses de dislocations dans MgO.

I.2.6 Volume d'activation

Lorsque que la déformation est activée thermiquement (i.e. la vitesse de déformation est d'autant plus importante que la température est élevée), on peut décrire la déformation comme le franchissement de barrières d'énergie $\Delta G(T, \sigma)$ fonction de la température et des termes de pression. L'énergie libre $G(T, \sigma)$ est défini par l'équation (I.8).

$$G(T, \sigma) = U - TS - \sigma V \quad (\text{I.8})$$

Dans ce formalisme, le terme σV contient à la fois un terme de pression hydrostatique $-PV$ et un terme de contraintes τV . On écrit une variation de l'énergie libre dG :

$$dG(T, \sigma) = \delta Q + \delta W - TdS - SdT - \sigma dV - Vd\sigma \quad (\text{I.9})$$

En simplifiant l'équation (I.9) par les termes correspondant au travail des forces et par la définition de δQ , on aboutit à l'équation (I.10)

$$dG(T, \sigma) = -SdT - Vd\sigma = \left. \frac{\partial G(T, \sigma)}{\partial T} \right|_{\sigma} dT + \left. \frac{\partial G(T, \sigma)}{\partial \sigma} \right|_T d\sigma \quad (\text{I.10})$$

Soit l'énergie d'un système G_0 définit par sa température et son état de contrainte. Si le système subit une variation de contrainte (hydrostatique ou non) à température constante, on définit $G(T_0, \sigma)$ par :

$$G(T_0, \sigma) = G_0(T_0, \sigma_0) + \Delta G(T_0, \sigma) \quad (\text{I.11})$$

Le terme $\Delta G(T, \sigma)$ qui apparaît dans l'équation (I.11) peut provenir de deux contributions. $\Delta G(T, \sigma)$ peut être lié à une variation de pression hydrostatique ΔP ou à une variation de la partie déviatorique du tenseur des contraintes $\Delta \tau$.

$$\Delta G(P) = -V\Delta P, \text{ pour un essai à } (T, \tau) \text{ constant} \quad (\text{I.12a})$$

$$\Delta G(\tau) = -V\Delta \tau, \text{ pour un essai à } (T, P) \text{ constant} \quad (\text{I.12b})$$

Les deux dérivées partielles $-\frac{\partial \Delta G(P)}{\partial P} \Big|_{T, \tau}$ et $-\frac{\partial \Delta G(\tau)}{\partial \tau} \Big|_{T, P}$ sont toutes deux homogènes à un volume. Dans un essai à pression hydrostatique constante, le volume $V = -\frac{\partial \Delta G(\tau)}{\partial \tau} \Big|_{T, P}$ est caractéristique d'un type d'obstacles considéré qui gouverne la déformation : création de double décrochement, franchissement de précipités ou d'obstacles ponctuels, interactions entre dislocations, etc. Ce volume est généralement qualifié de volume d'activation, dénomination qui devrait être réservée à la stricte variation en pression hydrostatique de l'énergie libre $-\frac{\partial \Delta G}{\partial P} \Big|_T$. Si pendant un essai, un unique mécanisme gouverne la déformation, alors le volume d'activation apparent de l'essai et représentatif du volume d'activation du mécanisme qui gouverne.

À pression ambiante, des lois du type (I.5) $\dot{\epsilon} \propto \tau^n$ sont généralement utilisées pour ajuster les données expérimentales (*Srinivasan et al. 1973 ; Singh & Coble 1974a*).

Néanmoins, si la déformation est thermiquement activée, la vitesse de déformation peut aussi s'écrire :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G(T, \tau)}{kT}\right) \quad (\text{I.13})$$

Dans ce cas, d'après les équations (I.12b) et (I.13) le volume d'activation $V = -\frac{\partial \Delta G(T, \tau)}{\partial \tau} \Big|_T$ est défini par l'équation suivante :

$$V = kT \frac{\partial \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0)}{\partial \tau} = \frac{kT}{\tau} \frac{\partial \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0)}{\partial \ln(\tau)} \quad (\text{I.14})$$

En appliquant l'équation (I.14) à une vitesse de déformation de type exposant de contrainte, on relie le volume d'activation à une fonction simple de l'exposant de contrainte $n = \partial \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) / \partial \ln(\tau)$ et de la température. Une mesure de variation de vitesse de déformation pour un saut de contrainte (ou vice et versa) lors d'un essai de relaxation ou de saut de vitesse est donc caractérisée par un changement de volume d'activation.

$$V = n \frac{kT}{\tau} \quad (\text{I.15})$$

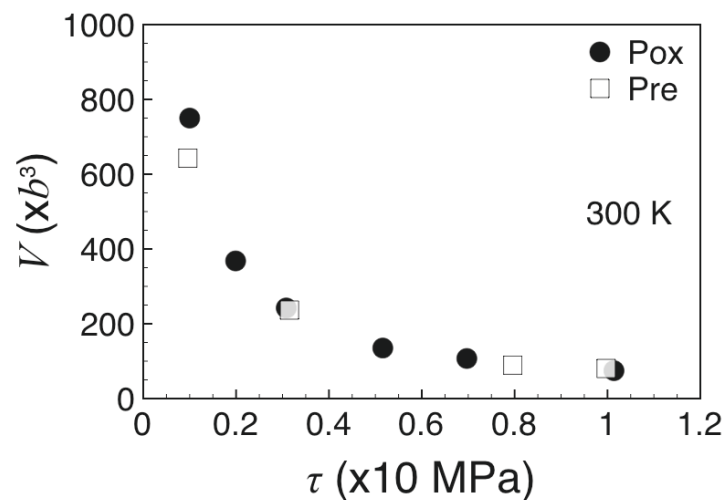


Fig. I.14 Evolution du volume d'activation V en fonction de la contrainte. Les données sont issues de Singh & Coble 1974a et concernent les dislocations vis à température ambiante. Il y a peu de différences entre les mesures réalisées sur les échantillons « Pox » et « Pre ».

Singh & Coble (1974a) présentent des volumes d'activation apparents, calculés à partir la relation (I.15). L'exposant de contrainte n provient des mesures de vitesse de dislocation présentées Fig. I.13. Par souci de clarté, seuls les calculs relatifs aux dislocations vis à température ambiante sont présentés sur la figure I.14. On remarque que V décroît pour atteindre un plateau où $V \sim 10-20 b^3$. Cette valeur relativement faible est caractéristique du volume d'activation d'un mécanisme de Peierls (voir la classification volume d'activation-mécanisme de déformation, dans Evans & Rawlings 1969; Singh & Coble 1974a; Messerschmidt 2010). On peut donc considérer que le volume apparent mesuré est celui du mécanisme de double-décrochements, qui régit la déformation plastique dans ce cas précis. On peut se poser la question des valeurs de V plus importantes à basse contrainte, y'a-t-il un changement de mécanisme potentiel? L'interaction impureté-dislocation a un volume

d'activation plus important (plusieurs centaines de b^3) que celui généralement attribué aux double-décrochements. Le mécanisme qui induit l'augmentation de V à basse contrainte peut éventuellement être l'effet des impuretés, voir un autre mécanisme lié au glissement de dislocations disposant d'un volume d'activation plus important.

Dans *Srinivasan & Stoebe 1973*, des essais cycliques en vitesse de déformation sont réalisés afin de déterminer les paramètres d'activation thermique de la déformation (V , ΔG , n) dans MgO monocristallin (pur à 99,97%). L'intérêt de cette étude est que le volume d'activation est mesuré ici sur une large gamme de températures allant de 77 K à 673 K. Les résultats sont présentés *Fig. I.15*.

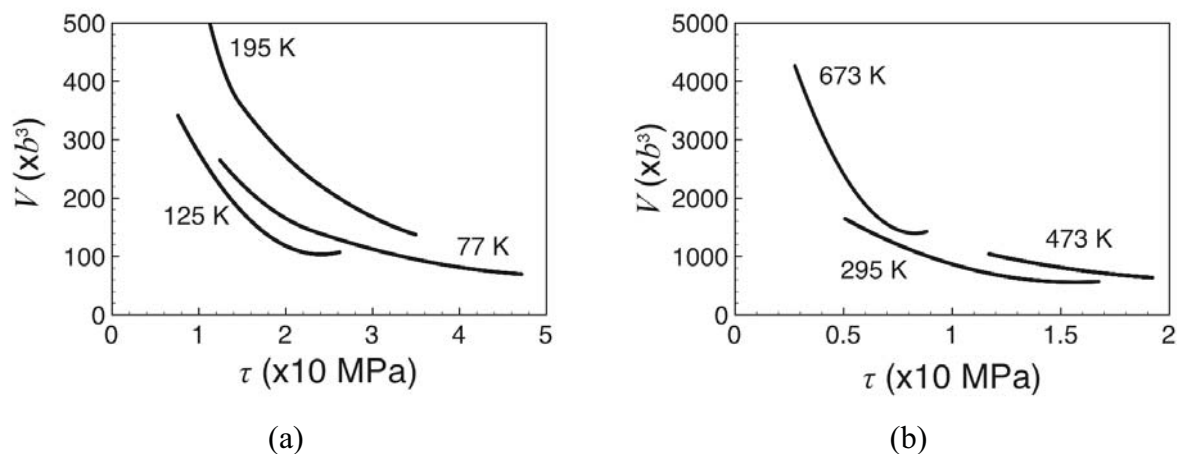


Fig. I.15 Mesure du volume d'activation lors d'essais à cycles de vitesse de déformation. Seul l'ajustement des données issues de *Srinivasan & Stoebe 1973* est représenté (la mesure est peu sensible à $\dot{\epsilon}_2/\dot{\epsilon}_1$). (a) Données pour lesquelles la température est inférieure à la température ambiante. (b) Données à température ambiante et au delà.

Srinivasan & Stoebe (1973) montrent un effet important de la température sur le volume d'activation apparent. V passe de quelques centaines de b^3 à basse température à plusieurs milliers à haute température. Ces valeurs sont attribuées à l'interaction dislocations-défauts ponctuels à basse température et aux interactions dipolaires à plus haute température. Les volumes d'activation mesurés dans *Singh & Coble 1974a* et *Srinivasan & Stoebe 19743* diffèrent d'un ordre de grandeur à température ambiante.

Aucune référence à un quelconque traitement thermique n'est faite dans *Srinivasan & Stoebe 1973*, ce qui peut être à l'origine d'une augmentation du volume d'activation si les impuretés sont traînées par les dislocations (le volume d'activation de l'interaction dislocation-défaut

ponctuel est plus faible que celui du mécanisme de « Point defect dragging », toujours d'après *Evans & Rawlings 1969*). On peut aussi se questionner sur l'effet de la déformation accumulée sur le volume d'activation lors de ce type d'essai (*Appel & Wielke 1985*).

I.2.7 Déformation de MgO en pression

(Mg,Fe)O et MgO ont fait l'objet d'études en pression, nécessaires à la description de la déformation dans les conditions du manteau terrestre.

Les essais mécaniques sous une pression de confinement de 1 GPa à température ambiante (*Weaver & Paterson 1969 ; Auten et al. 1976*) montrent une ductilité des échantillons plus importante qu'à pression ambiante (pas de fracture apparente). La plasticité est toujours anisotrope ; elle est gouvernée par l'activation d'un couple de systèmes conjugués $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ qui bloque les systèmes à $60^\circ/120^\circ$ (forme anisotrope de l'échantillon après déformation).

L'utilisation de la presse D-DIA permet des essais jusqu'à 15-20 GPa de pression hydrostatique, jusqu'à ~ 1800 K de température (*Wang et al. 2003*). Dans ce type de test, la déformation est mesurée par radiographies RX de l'échantillon, ce qui permet de contraindre la vitesse de déformation. La contrainte différentielle (contrainte moyenne vue par les grains) est évaluée comme une fonction de la variation de l'espacement des plans hkl en fonction de leur orientation, mesurée par diffraction X (*Singh 1993 ; Merkel et al. 2006*). Plusieurs études ont été réalisées (uniquement dans MgO polycristallin) à des pressions allant jusque 10 GPa et des températures comprises entre 1200 K et 1500 K (*Weidner et al. 1994 ; Li et al. 2004 ; Weidner & Li 2006 ; Mei et al. 2008*).

Mei et al. 2008 ont réalisé des essais pour des températures comprises entre 1350 K et 1573 K, pour des pressions allant jusqu'à 10 GPa et des vitesses de déformation comprises entre $1,4 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et $6,5 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. Les données sont ajustées sur une loi du type :

$$\dot{\varepsilon} = A\tau^n \exp\left(-\frac{U + PV}{RT}\right) \quad (\text{I.16})$$

Dans l'équation (I.16), P est la pression de confinement. On remarque que dans cette expression, la contrainte ne rentre pas dans la définition de l'énergie libre, ou en tout cas pas

sous sa forme usuelle qui suggère $V = -\partial \Delta G / \partial \tau|_{P,T}$. À partir de l'équation (I.16), le volume d'activation est défini par l'équation suivante :

$$V = \frac{\partial \ln(\tau)}{\partial P} nRT \quad (\text{I.17})$$

D'après l'équation (I.17), V est sensible à la température T et à l'exposant de contrainte n . Le meilleur ajustement des données est trouvé pour $n=3$. Après avoir normalisé vitesse de déformation et température respectivement à $3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et 1473 K, les auteurs quantifient l'effet de la pression hydrostatique sur la contrainte différentielle par un volume d'activation apparent de $V_{100} \sim 2,4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ (la contrainte différentielle étant calculée à partir de l'espacement des plans $\{100\}$).

Des essais en CED sur des échantillons polycristallins ont successivement été menés à 25 GPa (*Kinsland & Basset 1977*), 40 GPa (*Meade & Jeanloz 1988*) et 227 GPa (*Duffy et al. 1995*). Le niveau de contrainte est très élevé ($\sim 10 \text{ GPa}$ à 100 GPa de pression hydrostatique dans *Duffy et al. 1995*) et aucune analyse de texture ne permet d'identifier les systèmes de glissement actifs dans ces études.

Plus récemment, *Merkel et al. (2002)* et *Tommaseo et al. (2006)* ont réalisé des analyses de textures (orientations préférentielles de plans) dans MgO et (Mg,Fe)O. La comparaison entre les textures expérimentales et les systèmes de glissement potentiels suggère que le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est toujours le système le plus facile à activer à haute pression. Néanmoins, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ peut aussi être observé (*S. Merkel*, communication personnelle).

L'objectif de ce premier chapitre était de présenter les principaux travaux réalisés sur les propriétés élastiques et la déformation plastique de MgO. Bon nombre de ces études seront à nouveau abordées dans les chapitres suivants, notamment dans l'optique de confronter nos résultats et observations aux mesures déjà réalisées. Dans ce patchwork de propriétés, nous retiendrons que :

- Les constantes élastiques sont sensibles aux variations de pression hydrostatique.

- La T_f de MgO est très élevée, de l'ordre de 3100 K à pression ambiante. Elle augmente avec la pression. Elle est deux fois plus élevée que la température du manteau inférieur sur l'ensemble de sa gamme P - T .
- MgO dispose de deux familles de systèmes de glissement : $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est le plus facile à activer à pression ambiante.
- Les CRSS, dans les deux familles de systèmes, varient avec la température. Les mécanismes thermiquement activés identifiés sont le mécanisme de Peierls (friction de réseau) et le franchissement d'obstacle de type impuretés. MgO est très sensible à la concentration en impuretés.
- La microstructure est dépendante du régime de température : longues dislocations vis à basse température, boucles davantage isotropes à haute température.
- Il existe très peu de mesures de vitesse de dislocation, notamment dans MgO pur (*Singh & Coble 1974a*) et nous disposons de peu d'informations sur ses propriétés à haute pression.

Après cette présentation des propriétés élasto-plastiques de MgO, le deuxième chapitre de cette thèse sera consacré à l'introduction de notre méthode multi-échelle.

CHAPITRE II

METHODES & TECHNIQUES : MODELISATION MULTI-ECHELLE DE LA DEFORMATION DE MgO

Le but de ce deuxième chapitre est de présenter la Modélisation Multi-Echelle (MME) que nous avons mise en place afin de modéliser la déformation plastique dans MgO. Dans une première section, nous présenterons brièvement les différentes approches utilisées pour modéliser les structures de cœur de dislocation et plus particulièrement le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin, utilisé par *Ph. Carrez*. Ce modèle permet de calculer les structures de cœur des dislocations et les contraintes de Peierls sur lesquelles reposera la suite de la MME. Nous ferons ensuite, dans une seconde partie, l'exposé de la méthode des interactions élastiques (méthode IE) qui permet de calculer l'énergie d'activation et la géométrie des double-décrochements. Cette partie aboutira à la description d'une loi de mobilité qui décrit le glissement des dislocations dans le régime thermique. Enfin, la dernière section sera consacrée à la description de la Dynamique des Dislocations (DD), et particulièrement au code *microMegas* qui a été utilisé pendant ce travail de thèse afin de modéliser le comportement collectif des dislocations à l'échelle mésoscopique lors d'essais de déformation numérique.

II.1 Introduction à la modélisation des structures de cœur des dislocations

II.1.1 Les simulations de dislocations à l'échelle atomique dans MgO

Il existe deux types de calculs pour modéliser les structures de cœur des dislocations (Shoeck 2006) : (i) un calcul purement atomistique (ii) un calcul basé sur le modèle de Peierls-Nabarro. La détermination atomistique des structures de cœur a été régulièrement utilisée dans les métaux (Vitek & Yamaguchi 1973 ; Duesbery & Vitek 1998 ; Groger *et al.* 2008), dans les intermétalliques (Schroll *et al.* 1998 ; Gumbsch & Schroll 1999), dans les semiconducteurs (Koizumi *et al.* 2000 ; Miyata & Fujiwara 2001 ; Pizzagalli *et al.* 2009). Le modèle de Peierls-Nabarro (Peierls 1940 ; Nabarro 1947), couplé à l'utilisation de γ -lignes¹, est une alternative efficace pour calculer les propriétés de cœur de dislocation dans l'hypothèse d'un cœur planaire (Lejcek 1972 ; Wang 1996 ; von Sydow *et al.* 1999 ; Lu *et al.* 2000 ; Mryasov *et al.* 2002 ; Durinck *et al.* 2007a ; Ferré *et al.* 2009).

Les deux approches ont été appliquées à MgO : (i) Puls & Norget 1975 et Woo & Puls 1977 présentent des structures de cœur de dislocation coin, calculées à l'échelle atomique (ii) Miranda & Scandolo 2005 et Carrez *et al.* 2009 montrent des calculs de propriétés de cœur de dislocation à l'aide d'une approche de type Peierls-Nabarro.

- (i) L'arrangement des atomes au cœur d'une dislocation peut être décrit par un simple calcul de relaxation de la configuration atomique. Ce calcul peut être réalisé *ab-initio* ou à l'aide de potentiels empiriques qui reproduisent les propriétés à l'échelle atomique. Les premiers calculs de structure de cœur dans MgO ont été proposés par Puls & Norget (1975) et Woo & Puls (1977). Dans Woo & Puls 1977, les auteurs ont calculé, à l'aide de potentiels de type shell-model et point-ion model, des structures de dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et des contraintes de Peierls comprises entre 46 et 69 MPa en fonction du type de potentiel utilisé. Ces calculs sont en accord avec les mesures expérimentales présentées quelques années plus tôt par Singh & Coble (1974a).
- (ii) Les approches de type Peierls-Nabarro reposent sur une description continue de la densité de vecteur de Burgers $\rho(x)=df(x)/dx$ où x est la coordonnée suivant le

¹ Les γ -lignes, ou γ -surfaces à deux dimensions, correspondent à l'énergie en excès due au cisaillement homogène d'un cristal parfait, respectivement dans une direction donnée et sur la surface.

déplacement de la dislocation dans son plan de glissement. L'énergie E de la dislocation est définie par la somme des interactions élastiques entre chaque portion infinitésimale de dislocation à laquelle s'ajoute une contribution inélastique $\gamma(f(x))$ qui est fonction du désaccord $f(x)$, équation (II.1). γ est évaluée à partir de l'énergie de faute d'empilement (γ -ligne ou γ -surface), calculée à l'échelle atomique (*Vitek 1968*).

$$E(\rho, f) = \frac{K}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) \rho(x') \ln(x - x') dx dx' + \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(f(x)) \quad (\text{II.1})$$

Où K est un coefficient énergétique.

La dérivée locale du désaccord $f(x)$ est égale à la densité de vecteur de Burgers $\rho(x)$. La minimisation de l'énergie E décrit la structure stable de la dislocation et permet d'aboutir à l'équation de Peierls-Nabarro (*Peierls 1940 ; Nabarro 1947*).

Dans *Miranda & Scandolo 2005*, les auteurs utilisent le modèle de Peierls-Nabarro en y incorporant des γ -lignes calculées à partir d'un potentiel interatomique qui reproduit les calculs *ab-initio* (*Tangney & Scandolo 2003*). Dans *Carrez et al. 2009*, des calculs similaires (γ -lignes + modèle PN) ont été réalisés sur des dislocations vis et coins, dans $\{110\}$ et $\{100\}$, entre 0 et 100 GPa de pression. Les auteurs montrent que le calcul de γ -lignes *ab-initio* est un outil efficace pour incorporer l'effet de la pression sur les structures de cœur de dislocation. Cependant, ils soulignent aussi l'une des limites du modèle, qui ne tient pas compte de la nature tridimensionnelle des cœurs de dislocation : la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ est caractérisée par deux structures de cœur distinctes en fonction du plan de glissement dans lequel on force l'étalement. Dans *Shoeck 2005* et *Lu 2005*, les auteurs font la revue des faiblesses des approches unidimensionnelles de type Peierls-Nabarro. Parmi elles, on retiendra l'incapacité de traiter : des structures de cœur étroites, des dislocations dissociées avec des vecteurs de Burgers non-colinéaires ou encore l'absence de reconstruction des cœurs de dislocation.

II.1.2 Le modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin

Plusieurs approches ont permis une généralisation du modèle de Peierls-Nabarro dans l'espace (*Bulatov & Kaxiras 1997 ; Ngan & Zhang 1999 ; Lu 2005*). Dans le cadre de notre MME, *Ph. Carrez* a utilisé la méthode de Peierls-Nabarro-Galerkin (PNG) (*Denoual 2004, 2007*).

Le modèle PNG est une approche semi-continue, qui permet d'intégrer plusieurs plans de glissement et donc de décrire les structures de cœur de dislocation dans l'espace. Comme dans le modèle PN initial, la configuration atomique stable d'un cœur de dislocation est le résultat de la minimisation de l'énergie du défaut qui est composée d'un terme élastique et d'un terme de désaccord, équation (II.2). L'énergie élastique est calculée à partir d'une approximation continue du champ vectoriel de déformation $u(r)$ dans un volume V autour de la dislocation. Le désaccord f est calculé, dans chaque plan, en utilisant des γ -surfaces comme données d'entrée. La configuration atomique d'énergie la plus basse peut donc présenter une distribution de vecteur de Burgers $\rho(x)$ dans plusieurs plans de glissement.

Calculé pour un étalement de la dislocation dans un unique plan S , le lagrangien à minimiser prend la forme de la fonctionnelle (II.2).

$$-L(u, f) = \int_V \left\{ \bar{\varepsilon}_e(u, f) : \bar{C} : \bar{\varepsilon}_e(u, f) - \frac{1}{2} \Omega u'^2 \right\} dV + \int_S E_{isf}(f) dS \quad (II.2)$$

Où \bar{C} est le tenseur des constantes élastiques, Ω la densité du matériau, u' la dérivée du champ u par rapport au temps et E_{isf} l'énergie de faute d'empilement inélastique.

L'équation (II.2) est assez proche de celle qui est utilisée dans l'approche classique de type Peierls-Nabarro rappelée équation (II.1).

L'étalement d'un cœur de dislocation distribuée dans un plan i est évalué par la fonction de désaccord f_i . Après symétrisation, $f_i(x)$ prend la forme du « disregistry » $\phi_i(x)$ présenté dans *Hirth & Lothe 1982*. Quel que soit le plan i , ϕ_i varie de $-b/2$ à $+b/2$ pour une dislocation coin alors que pour une dislocation vis, ϕ_i varie en fonction de la distribution de vecteur de Burgers dans chaque plan.

$$\phi_i(x) = \frac{\rho_i}{\pi} \arctan \frac{x}{\xi_i} \pm \frac{\rho_i}{2} \quad (II.3)$$

Où ρ_i est la densité de vecteur de Burgers dans le plan i et ζ_i la largeur à mi-hauteur de la densité de vecteur de Burgers.

La méthode PNG, permet une résolution "multi plans" de l'équation de Peierls en utilisant des concepts de mécanique des milieux continus et une technique de résolution de type éléments finis.

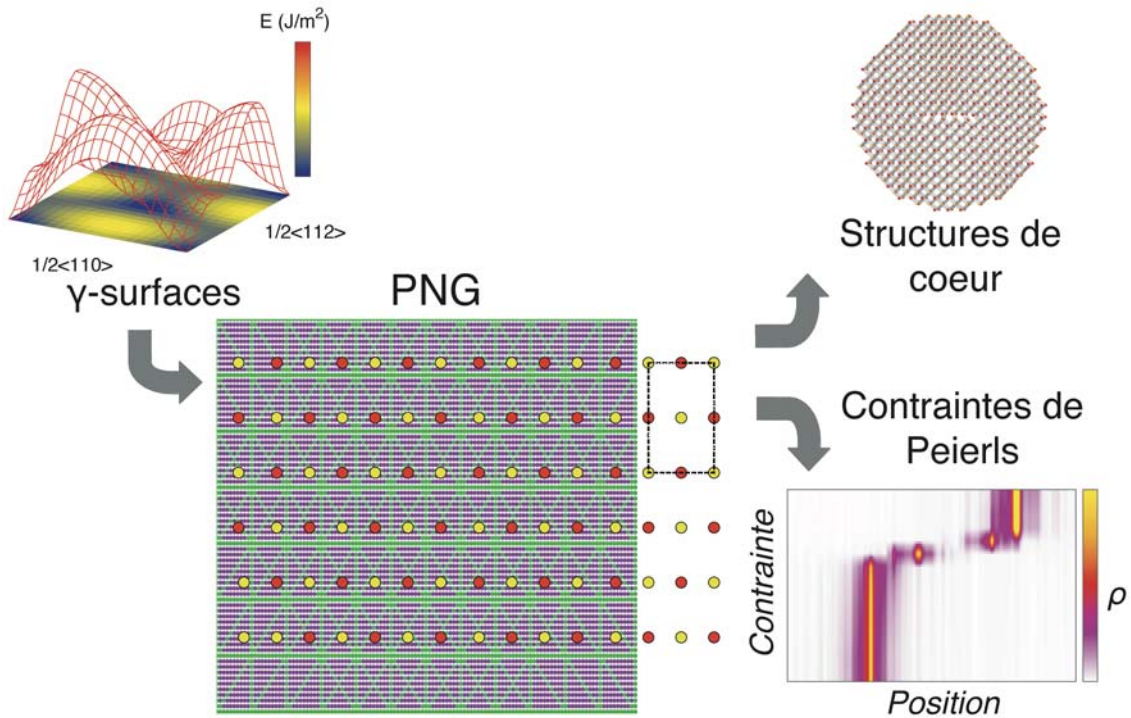


Fig. II.1 Schéma de la méthode PNG. Les γ -surfaces sont utilisées en données d'entrée. La méthode de calcul (Denoual 2004, 2007) utilise une technique de type éléments finis. Elle permet de calculer à la fois les structures de cœur des dislocations et les contraintes de Peierls qui leur sont associées.

Une fois la structure de cœur de la dislocation simulée, la contrainte de Peierls est calculée en appliquant une déformation à la boîte d'éléments finis modélisée. τ_P est définie comme la contrainte seuil à partir de laquelle la dislocation quitte le volume de simulation (Fig. II.1).

II.2 Le glissement thermiquement activé : la mobilité par double-décrochements

II.2.1 Généralités

Dans le régime thermiquement activé, le glissement des dislocations est contrôlé par la friction de réseau. La friction de réseau peut être modélisée par une barrière d'énergie dont la périodicité obéit à la structure cristallographique : le potentiel de Peierls V_p . Dans *Peierls 1940*, l'auteur montre qu'une ligne de dislocation se trouve à son minimum d'énergie lorsqu'elle est étendue et rectiligne, dans la vallée d'un potentiel. À 0 K, la contrainte nécessaire au franchissement de la barrière d'énergie, pour une dislocation droite, est maximale : c'est la contrainte de Peierls τ_p . À température finie, les dislocations glissent grâce à la nucléation et à la propagation de double-décrochements (*Fig. II.2*). Des portions de dislocation se mettent à osciller, autour de leur position d'équilibre, sous l'effet de l'activation thermique. Assistée par la contrainte, une fluctuation peut franchir une barrière d'énergie afin d'atteindre la vallée suivante : c'est le mécanisme de nucléation de double-décrochements (*Fig. II.2*, une portion de dislocation (ABC) décroche et devient (ADC)).

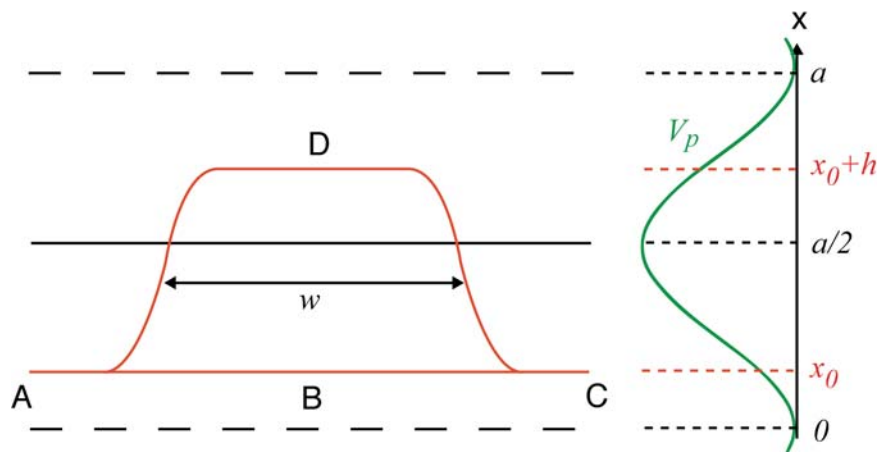


Fig. II.2 Schéma d'un double-décrochements. La dislocation (ABC), sous contrainte, est à une position x_0 . L'activation thermique et la contrainte effective permettent à une portion de la dislocation de passer en x_0+h sous la forme d'un double-décrochements (ADC).

De façon pratique, on peut décrire un double-décrochements par ses propriétés géométriques : sa largeur w et sa hauteur h (*Hirth & Lothe 1982*). Sous l'effet de la contrainte appliquée, les deux décrochements s'éloignent et permettent à la ligne entière de franchir l'obstacle.

Néanmoins, la paire de décrochements peut s'annihiler, sous l'effet de l'interaction élastique entre les deux décrochements, si la distance w qui les sépare n'est pas supérieure à une longueur critique.

L'une des premières descriptions de la géométrie d'un double-décrochements a été introduite dans *Dorn & Rajnak 1964*. Ce calcul a été repris dans *Seeger 1984* et *Suzuki et al. 1991* à l'aide d'un modèle de tension de ligne TL. L'hypothèse du modèle TL est que, lors de la formation d'une paire de décrochements, l'énergie d'interaction entre les décrochements est faible devant la variation d'énergie élastique de la ligne, elle est alors négligée dans le calcul. Cependant, si deux décrochements sont peu éloignés à basse contrainte, la force de rappel élastique entre les deux décrochements n'est pas contrebalancée par la contrainte appliquée. C'est pourquoi, ce modèle est considéré comme une approximation aux fortes contraintes². L'étude de *Dorn & Rajnak (1964)* repose sur la détermination de la configuration critique (géométrie et énergie) d'un double-décrochements sous contrainte. Les auteurs partent du principe que la variation d'enthalpie ΔH lors de la nucléation d'une paire de décrochements correspond à la différence d'énergie entre la configuration où le double-décrochements est nucléé (ADC) et la dislocation initialement droite (ABC), quantité à laquelle il faut soustraire le travail W effectué par la contrainte appliquée. ΔH est donc fonction de la forme du double-décrochements et du potentiel V_p (voir *Eshelby 1962* ; *Dorn & Rajnak 1964* ; *Vitek 1966* ; *Koizumi et al. 1993* pour une revue des différents potentiels).

$$\Delta H = \Delta E + \Delta P - W \quad (\text{II.4})$$

Dans l'équation (II.4), le terme ΔE correspond à l'excès d'énergie lié aux interactions élastiques entre les différentes portions de la dislocation courbée ; ΔP est le terme qui quantifie l'énergie supplémentaire induite par les deux décrochements qui traversent la barrière d'énergie et par la section de ligne décrochée (portion (D), *Fig. II.2*), ces trois portions de dislocations n'étant plus à la position de plus basse énergie définie par la vallée de Peierls ; W est le travail effectué par τ et gagné par le système lors de la nucléation du double-décrochements.

Comme représenté figure *II.2*, il n'est pas nécessaire que l'amplitude critique d'un double-

² Notons que *Seeger (1984)* propose aussi un modèle dit "basse contrainte" basé sur des interactions élastiques de type coulombienne entre les deux décrochements.

décrochements soit égale à une période du potentiel V_p . Si à contrainte nulle, la dislocation se trouve en fond de vallée ($x=0$), on peut mesurer le déplacement initial x_0 de la dislocation sous l'effet de la contrainte τ en résolvant l'équation (II.5) qui tend vers 0 uniquement lorsque τ tend vers 0. On remarque, via l'équation (II.5), que la contrainte de Peierls τ_p est définie par le maximum de la pente du potentiel V_p .

$$\left. \frac{dV_p(x)}{dx} \right|_{x=x_0} = \tau b \quad (\text{II.5})$$

Sans hypothèse faite au préalable, une résolution rigoureuse du calcul de ΔH nécessiterait d'intégrer et de minimiser l'énergie le long de la dislocation courbée (intégrale double le long de la ligne) en tenant compte, de ce fait, des interactions élastiques entre chaque portion de ligne. De plus, un tel calcul nécessite de connaître le potentiel de Peierls V_p . D'où le recours à des modèles simplifiés tels que le modèle TL (*Dorn & Rajnak 1964 ; Seeger 1984*) ou le modèle des interactions élastiques IE (*Hirth & Lothe 1982 ; Koizumi et al. 1993*).

II.2.2 Le modèle des interactions élastiques IE

Dans *Devincre & Condat 1992*, les auteurs montrent qu'une approximation polygonale de la ligne courbée peut mener à de bons résultats en termes de champ de contrainte et de tension de ligne. L'objectif de cette étude était de simplifier l'approche curviligne pour des applications numériques comme la Dynamique des Dislocations. Appliquée aux double-décrochements, cette hypothèse n'est vérifiée que si les décrochements sont éloignés i.e. lorsque $w \gg h$. Dans ce cas, les interactions élastiques entre les deux décrochements ne dépendent plus de leur forme ou du potentiel de Peierls (*Caillard & Martin 2003*). Dans *Koizumi et al. 1993*, les auteurs proposent une approche basse contrainte du calcul de l'énergie de nucléation des double-décrochements basée sur la théorie des interactions élastiques (EI). Dans cette étude, le double-décrochements est de forme rectangulaire ce qui suppose que l'hypothèse $w \gg h$ soit vérifiée.

Quelle que soit l'approche adoptée, les équations (II.4) et (II.5) restent valides, seule l'évaluation des différents termes change dans l'équation (II.4). Dans le modèle développé par *Koizumi et al. (1993)*, les double-décrochements sont de forme rectangulaire ; ils sont donc explicitement définis par h et w . Cette approximation permet notamment d'exprimer plus

simplement ΔE . Les auteurs définissent la configuration critique du double-décrochements comme la géométrie (w^*, h^*) qui minimise la variation d'énergie ΔH . On note ΔH^* l'énergie critique de nucléation du double-décrochements. Dans ce formalisme, la configuration critique est atteinte si l'équation (II.6) est vérifiée :

$$\frac{\partial \Delta H}{\partial h} = \frac{\partial \Delta H}{\partial w} = 0 \quad (\text{II.6})$$

D'après l'équation 8-45 de *Hirth & Lothe 1982*, la variation d'énergie élastique en élasticité isotrope s'écrit :

$$\Delta E_{\text{vis}}(h, w) = \frac{\mu b^2}{2\pi} \left\{ \begin{aligned} &\sqrt{w^2 + h^2} - w - h + w \log \frac{2w}{w + \sqrt{w^2 + h^2}} \\ & - \frac{1}{1-\nu} \left(w - \sqrt{w^2 + h^2} + h \log \frac{h + \sqrt{w^2 + h^2}}{w} - h \log \frac{h}{er_c} \right) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.7})$$

$$\Delta E_{\text{coin}}(h, w) = \frac{\mu b^2}{2\pi} \left\{ \begin{aligned} &\frac{1}{1-\nu} \left(\sqrt{w^2 + h^2} - w - h + w \log \frac{2w}{w + \sqrt{w^2 + h^2}} \right) \\ & - w + \sqrt{w^2 + h^2} - h \log \frac{h + \sqrt{w^2 + h^2}}{w} + h \log \frac{h}{er_c} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.8})$$

Où μ est le module de cisaillement, ν le module de Poisson et r_c le rayon de coupure de la dislocation.

ΔE dépend des propriétés élastiques du matériau (μ et ν), du vecteur de Burgers b , des variables géométriques du double-décrochements (w et h) et du rayon de coupure r_c de la dislocation. Le rayon de coupure est généralement défini comme la distance limite à partir de laquelle la théorie de l'élasticité ne s'applique plus à la dislocation. Il n'existe pas de moyen rigoureux de définir cette limite, on admet qu'elle est de l'ordre d'une fraction du vecteur de Burgers (5% de b dans *Koizumi et al. 1993*). Dans le cadre de cette étude, nous avons choisi de le fixer comme une fraction de la largeur de cœur de la dislocation. Plus de détails seront fournis au cours du chapitre III.

La variation d'énergie ΔP induite par le potentiel de Peierls est décrite par l'équation (II.9a). Dans la dernière ligne de l'équation, le premier terme décrit l'énergie potentielle des deux décrochements alors que le second correspond à la variation d'énergie de la portion de ligne qui franchit la barrière, de sa position initiale en x_0 à sa position finale en $x_0 + h$. Le travail effectué par la contrainte appliquée est défini par la relation (II.9b).

$$\begin{aligned}\Delta P(h, w) &= \int_{ABC} V_p(x) dl - \int_{ADC} V_p(x) dl \\ &= 2 \int_{x_0}^{x_0+h} V_p(x) dx + w[V_p(x_0 + h) - V_p(x_0)]\end{aligned}\quad (\text{II.9a})$$

$$W = hwb\tau \quad (\text{II.9b})$$

Pendant ma thèse, nous avons principalement travaillé à l'aide d'une forme modifiée du potentiel V_p introduit dans *Koizumi et al. 1993* (équation (II.10)). Dans l'étude originale, ce potentiel est paramétré par une variable α , comprise entre 0 et 1, qui permet de passer d'une forme purement sinusoïdale ($\alpha=0$) à une forme en dos de chameau ($\alpha>0,5$) comme illustré *Fig. II.3*. L'amplitude du potentiel est fonction de la valeur de α . Comme cela a été le cas pour le rayon de coupure, nous avons ajusté la valeur de α sur la largeur du cœur de la dislocation considérée, de telle sorte que : plus la dislocation a un cœur étendu dans un plan, plus le potentiel tend vers une forme sinusoïdale. Nous reviendrons sur cette propriété section III.2.

$$\begin{aligned}V_p(x) &= \frac{C}{2\pi} a' b \tau_p g(x) \\ g(x) &= 1 - \cos \frac{2\pi}{a'} x - \frac{\alpha}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi}{a'} x \right)^2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \\ C &= \sqrt{2} \frac{(1-\alpha)^2 + 4\alpha^2 + (1-\alpha)\sqrt{(1-\alpha)^2 + 8\alpha^2}}{\left\{ (1-\alpha)^2 + 2\alpha^2 + (1-\alpha)\sqrt{(1-\alpha)^2 + 8\alpha^2} \right\}^{3/2}}\end{aligned}\quad (\text{II.10})$$

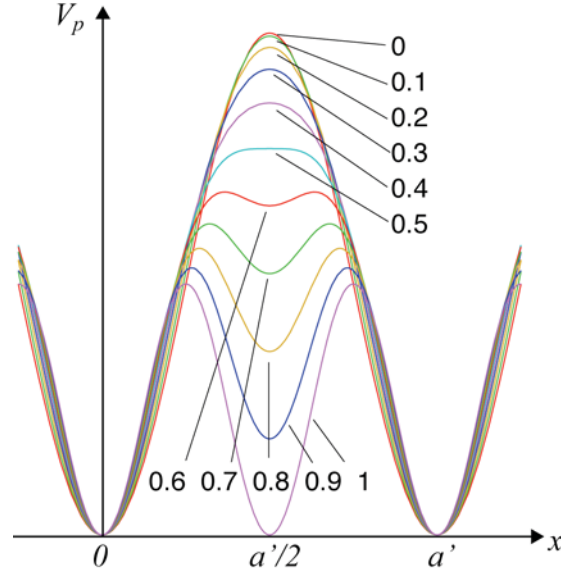


Fig. II.3 Evolution du potentiel de Peierls V_p en fonction du paramètre α . $V_p(x)$ passe d'une forme purement sinusoïdale lorsque $\alpha=0$ à une forme en dos de chameau lorsque $\alpha>0.5$ pour revenir à une forme sinusoïdale de période $a/2$ pour $\alpha=1$.

Dans le cas où $w \gg h$, les équations (II.7) et (II.8) s'expriment plus simplement par les relations (II.11) et (II.12), après avoir effectué un développement limité au premier ordre de h/w . Notons que le premier terme dans les équations (II.11) et (II.12) correspond à la self énergie du double-décrochements alors que le second se rapporte à l'énergie d'interaction entre les décrochements.

$$\Delta E_{vis}(h, w) = \frac{\mu b^2}{2\pi} \left\{ h \left(\frac{1}{1-\nu} \ln \frac{h}{er_c} - 1 \right) - \frac{h^2(1+\nu)}{4w(1-\nu)} \right\} \quad (II.11)$$

$$\Delta E_{coin}(h, w) = \frac{\mu b^2}{2\pi} \left\{ h \left(\ln \frac{h}{er_c} - \frac{1}{1-\nu} \right) - \frac{h^2(1-2\nu)}{4w(1-\nu)} \right\} \quad (II.12)$$

Toujours selon l'hypothèse $w \gg h$, à partir de l'équation (II.6), $\Delta H^*(\tau)$, pour les caractères vis et coin, prend la forme suivante :

$$\Delta H_{vis}^*(\tau) = \frac{\mu b^2}{2\pi} h^*(\tau) \left(\frac{1}{1-\nu} \ln \frac{h^*(\tau)}{er_c} - 1 \right) \quad (II.13)$$

$$\Delta H_{coin}^*(\tau) = \frac{\mu b^2}{2\pi} h^*(\tau) \left(\ln \frac{h^*(\tau)}{er_c} - \frac{1}{1-\nu} \right) \quad (II.14)$$

Le terme d'interaction entre les deux décrochements présent dans les équations (II.11) et (II.12) a disparu de l'expression de l'énergie de nucléation. Cela montre que, dans le cadre de l'hypothèse $w \gg h$, les deux décrochements sont trop éloignés l'un de l'autre pour interagir. Toujours dans l'hypothèse de larges double-décrochements, l'énergie de selle ΔH_0 converge vers le double de l'énergie d'un décrochement isolé de hauteur a' lorsque $\tau=0$, équations (II.15) et (II.16).

$$2U_{k,vis} = \Delta H_{vis}^*(\tau = 0) = \frac{\mu a' b^2}{2\pi} \left(\frac{1}{1-\nu} \ln \frac{a'}{er_c} - 1 \right) \quad (\text{II.15})$$

$$2U_{k,coin} = \Delta H_{coin}^*(\tau = 0) = \frac{\mu a' b^2}{2\pi} \left(\ln \frac{a'}{er_c} - \frac{1}{1-\nu} \right) \quad (\text{II.16})$$

La résolution de l'équation (II.4) et l'application du modèle IE permettent de calculer la configuration critique d'un double-décrochements $\Delta H^*(h^*, w^*)$. Quelque soit le formalisme, l'énergie d'activation des double décrochements est toujours décrite uniquement à l'aide d'un terme enthalpique, en négligeant la contribution entropique. Dans la littérature, très peu d'études font références à la variation d'énergie ΔS lors de la nucléation de double-décrochements. D'après *Schoeck 1965*, l'entropie d'activation est associée aux variations du module de cisaillement avec la température. Dès lors, le terme entropique sera négligée dans ce travail, seules les variations de μ avec la température seront intégrées aux calculs à l'échelle mésoscopique.

Dans le cadre de cette étude, nous avons appliqué le modèle IE à des contraintes inférieures à 20% de la contrainte de Peierls. Les calculs ont été réalisés, sans tenir compte des simplifications introduites à partir de l'équation (II.11), en utilisant uniquement les grandeurs calculées à l'échelle atomique en données d'entrée (constantes élastiques, contrainte de Peierls et largeur de cœur). Les valeurs de ΔH_0 ont ensuite été comparées aux résultats déduits des expressions (II.15) et (II.16). Les résultats obtenus pour $0 < \tau < 0,2 \tau_P$ ont été utilisés pour ajuster les paramètres libres de l'équation de Kocks (*Kocks et al. 1975*), équation (II.17), qui décrit l'évolution de ΔH^* sur toute la gamme de contrainte. Cette équation, bien qu'empirique, est souvent utilisée pour décrire l'évolution en contrainte de l'énergie d'activation du glissement de dislocation (*Tang et al. 1998 ; Naamane 2008, Naamane et al. 2010*).

$$\Delta H^*(\tau) = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_p} \right)^p \right]^q \quad (\text{II.17})$$

Où p et q sont des paramètres libres. Pour le glissement de dislocations : $0,5 < p < 1$ et $1 < q < 2$. Voir *Kocks et al. 1975* pour plus de détails.

II.2.3 Loi de mobilité des dislocations dans le régime thermiquement activé

D'après le formalisme introduit par *Guyot & Dorn (1967)*, on définit la fréquence de saut d'une dislocation de longueur L par :

$$\nu(\tau, T) = \frac{\nu_D b}{w^*(\tau)} \frac{L}{2w^*(\tau)} \exp(-\Delta H^*(\tau)/kT) \quad (\text{II.18})$$

Où $\nu_D b / w^*(\tau)$ est la fréquence de vibration d'une portion de dislocation de largeur w^* (ν_D étant la fréquence de Debye), $L / 2w^*(\tau)$ le nombre de sites de nucléation des double-décrochements le long de la dislocation de longueur L , enfin, le terme en exponentielle rend compte de la probabilité de réussite d'un saut dans le sens du déplacement moyen de la dislocation.

Dans la formulation (II.18), l'énergie d'activation du mécanisme de double-décrochements est purement une énergie de nucléation. Ce formalisme n'est valable que si la propagation des double-décrochements est très rapide devant la nucléation i.e. que les barrières de Peierls de second ordre sont de basse énergie. La densité de double-décrochements sur la ligne de dislocation est alors faible. C'est le cas des métaux et des matériaux à liaisons non-covalentes (*Hirth & Lothe 1982*). A contrario, les études expérimentales menées sur des semi-conducteurs et, en moindre proportion, sur des céramiques montrent une forte directionnalité des dislocations due à la rupture préférentielle de certaines liaisons covalentes (*George & Rabier 1987 ; Louchet & Thibault-Desseaux 1987*).

MgO est un cristal ionique. Les études menées dans le régime thermiquement activé montrent que les microstructures liées aux dislocations sont très proches de celles qui peuvent être observées dans les métaux CC comme le fer. Il n'y a donc aucune évidence expérimentale pouvant soutenir une hypothèse de mobilité gouvernée par la propagation des double-décrochements (comme c'est le cas dans le silicium par exemple, *George & Rabier 1987*). Dans le cadre de ce travail, nous émettrons donc l'hypothèse que la germination des double-

décrochements est le mécanisme qui contrôle le glissement des dislocations et que l'influence de la propagation sur la mobilité est négligeable.

L'équation (II.18) tient compte de la formation de paires de kinks vers l'avant. Or, à faible contrainte, la nucléation des double-décrochements peut avoir lieu dans le sens moyen de déplacement de la dislocation comme dans le sens opposé. Bien que, sous l'effet de la contrainte appliquée, un double-décrochements nucléé en arrière du déplacement moyen de la dislocation s'annihile, sa nucléation ralentit la vitesse de la dislocation. Il doit donc être pris en compte dans l'expression de la loi de mobilité.

$$v(\tau, T) = \frac{v_D b}{w^*(\tau)} \frac{L}{2w^*(\tau)} \left(\exp(-\Delta H^+(\tau)/kT) - \exp(-\Delta H^-(\tau)/kT) \right) \quad (\text{II.19})$$

Où $\Delta H^+(\tau)$ et $\Delta H^-(\tau)$ correspondent respectivement à l'énergie d'activation d'un saut dans le sens de déplacement moyen de la dislocation (soit $\Delta H^*(\tau)$) et dans le sens opposé.

L'équation (II.19) est plus justifiée physiquement que l'équation (II.18) puisqu'elle réintroduit le fait qu'à contrainte nulle (lorsque $\Delta H^+(\tau) = \Delta H^-(\tau) = \Delta H_0$), la vitesse de la dislocation est nulle (Nabarro 2003). Pour une contrainte effective τ_{eff} , les énergies d'activation des sauts avant et arrière sont définies respectivement par les équations (II.20) et (II.21).

$$\Delta H^+(\tau) = \int_0^{\tau_p} V_p(\tau) d\tau - \int_0^{\tau_{eff}} V_p(\tau) d\tau \quad (\text{II.20})$$

$$\Delta H^-(\tau) = \int_0^{\tau_p} V_p(\tau) d\tau + \int_0^{\tau_{eff}} V_p(\tau) d\tau \quad (\text{II.21})$$

Où $\int_0^{\tau_p} V_p(\tau) d\tau$ est l'énergie totale nécessaire au franchissement de la barrière de Peierls, soit ΔH_0 .

En réinjectant les équations (II.20) et (II.21), la fréquence de saut définie par l'équation (II.19) prend la forme (II.22) :

$$v(\tau, T) = \frac{v_D b}{w^*(\tau)} \frac{L}{w^*(\tau)} \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0 - \Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (\text{II.22})$$

En supposant que la vitesse est gouvernée par la nucléation des double-décrochements et que la dislocation franchit une colline de Peierls lorsque la probabilité de réussite d'un saut avant est atteinte, on définit la vitesse des dislocations dans le régime thermiquement activé par :

$$v(\tau, T) = a' \frac{v_D b}{w^*(\tau)} \frac{L}{w^*(\tau)} \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0 - \Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (\text{II.23})$$

Où a' est la périodicité du potentiel de Peierls V_p .

II.3 Dynamique des Dislocations

II.3.1 Historique

Les simulations par Dynamique des Dislocations (DD), se situent à l'interface entre les calculs à l'échelle atomique qui permettent de définir les propriétés de cœur des dislocations et les approches macroscopiques continues, orientées vers les champs de contraintes et de déformations. La DD est un outil qui assure le lien entre les lois physiques qui gouvernent la plasticité par déplacement de dislocations et la déformation à l'échelle macroscopique.

D'un point de vue historique, les premières simulations de ligne de dislocation ont vu le jour au milieu des années 60 (*Foreman et Makin 1966 ; Foreman 1967*). Appliquées à des systèmes à deux dimensions, ces calculs ne comprenaient généralement qu'une seule dislocation mobile et avaient pour but d'étudier les propriétés liées à la courbure de la ligne. Ces essais préliminaires, bien que critiqués pour leur insuffisance (*Tyupkina 1992 ; Devincere 1993*), ont largement inspiré le développement des approches numériques à l'échelle mésoscopique. À la fin des années 80, pour répondre aux questions posées sur la formation de microstructures organisées, *Lépinoux & Kubin (1987)* proposent la première simulation d'une population de dislocations soumise à un chargement. De nombreuses propriétés physiques des codes de DD actuels sont déjà incluses dans leur modèle. Nous y retrouvons différentes contributions à la contrainte (contrainte de Frank-Read, contrainte de friction, interactions longue distance, contrainte appliquée), une loi de mobilité ou encore des interactions inter-dislocations tels que les jonctions ou les annihilations.

Bien qu'encore utilisés dans des études récentes (*Nicola et al. 2003 ; Lefebvre et al. 2007*), les calculs bidimensionnels ont progressivement laissé place aux simulations à trois dimensions introduites par *Kubin & Canova (1990, 1992)*. En plus de prendre en compte l'effet de la contrainte dans les trois directions de l'espace, cette approche reproduit de façon plus réaliste les interactions entre dislocations (effets de tension de ligne) et introduit la notion de caractère.

Il existe aujourd'hui plusieurs codes de Dynamique des Dislocations (*Schwarz 1999* pour en avoir une revue détaillée) et leurs applications se sont diversifiées. Initialement consacrée au traitement d'interactions dislocation-dislocation, la DD est aujourd'hui utilisée dans des études liées : à la nanoindentation (*Fivel et al. 1998*), au durcissement par précipitation (*Mohles 2001 ; Monnet 2006 ; Queyreau 2008 ; Queyreau et al. 2010*), à l'influence de la température sur le comportement plastique (*Tang et al. 1998 ; Monnet et al. 2004 ; Naamane 2008 ; Naamane et al. 2010*), au chargement en fatigue (*Shin et al. 2005*), à la déformation des micro-piliers (*Weygand et al. 2009 ; Motz et al. 2009 ; El-Awady et al. 2009*) ou encore aux calculs à l'échelle macroscopique (modèle discret-continu) via le couplage aux éléments finis (*Lemarchand et al. 2001 ; Vattré et al. 2009*)

II.3.2 Introduction à *microMegas*

Le code de Dynamique des Dislocations utilisé dans ce travail est le code *microMegas* (*mM*). *mM* est un code de calcul principalement développé par le Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM). Il est distribué sous licence GPL. On dénombre aujourd'hui plus d'une dizaine de personnes ayant travaillé sur son développement, parmi lesquelles *B. Devincere, L. P. Kubin, G. Monnet, M. Condat, C. Lemarchand* ou encore *R. Madec*.

Ce code permet d'étudier la déformation de matériaux à structure : CFC (*Madec 2001*), Hexagonale Compacte HC (*Monnet 2005*), CC (*Queyreau et al. 2009 ; Naamane 2008 ; Naamane et al. 2010*), Cubique Simple et Orthorhombique (*Durinck 2005 ; Durinck et al. 2007b*) à l'aide de différents types d'essais : vitesse de déformation imposée, fluage, fatigue, etc.

Après avoir implémenté les conditions initiales d'un calcul (propriétés élastiques du matériau, loi de mobilité, microstructure initiale et conditions de chargement), le code fonctionne principalement suivant quatre étapes (voir *Fig. II.4*) :

- Le calcul des forces effectives : cette étape rend compte de la contrainte appliquée, de la tension de ligne et de la contrainte d'interaction sur chacun des segments présents dans le volume simulé afin de définir une contrainte effective. C'est l'étape la plus lourde en temps de calcul puisqu'elle évolue, en durée, proportionnellement au carré du nombre de segments.
- Le déplacement hypothétique des segments : il est calculé grâce à la loi de mobilité des dislocations et à la contrainte effective, cette étape permet d'évaluer un déplacement conditionnel des segments.
- La gestion des obstacles et le déplacement des segments : des règles locales permettent d'évaluer la validité du déplacement conditionnel des segments. En effet, celui-ci n'est pas justifié lors d'une interaction de contact entre segments ou encore si son évaluation est aberrante (à cause d'un pas d'intégration trop grand par exemple). Cette étape donne lieu au calcul du déplacement effectif de chaque segment appelé déplacement « vrai » dans le code.
- Le contrôle : Cette étape permet de réajuster les conditions de chargement. Par exemple, dans un essai à vitesse de déformation imposée, il est nécessaire de réajuster la contrainte appliquée si la vitesse de déformation imposée n'est pas atteinte.

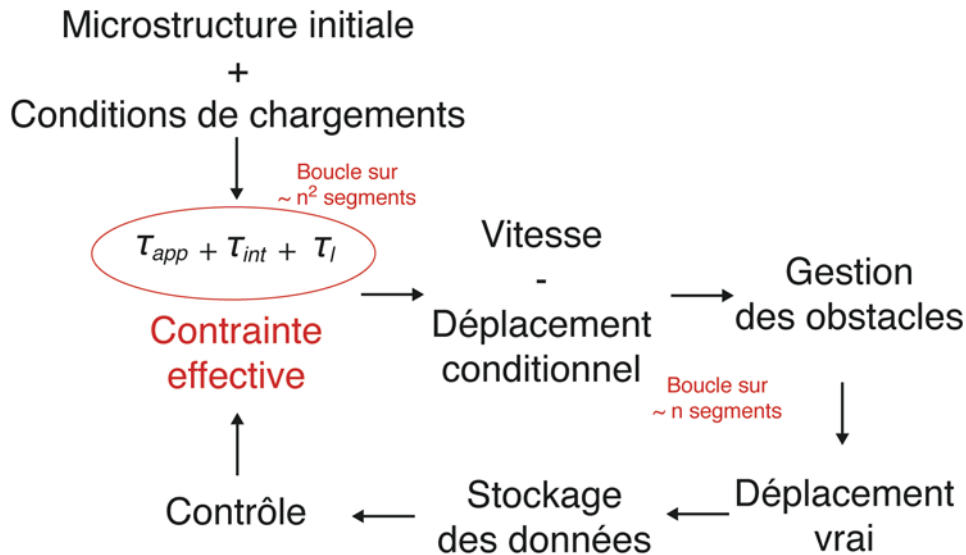


Fig. II.4 Les principaux stades de fonctionnement de *microMegas*.

Si cet algorithme peut s'appliquer à d'autres codes de DD, *mM* dispose de ses propres spécificités. Effectivement, il repose sur une discrétisation du temps et de l'espace. Il dispose de ses propres règles, permettant de définir la courbure des dislocations dans le régime athermique ou leur forme anisotrope au dessous de T_a . Dans les sous-sections suivantes, nous ferons l'exposé de ces spécificités et principalement de celles qui sont nécessaires à la bonne compréhension des travaux qui vont suivre.

II.3.3 Discrétisation de l'espace

microMegas est basé sur une discrétisation des lignes de dislocations sur réseau. Chaque dislocation est composée d'une succession de segments interconnectés disposés sur un réseau homothétique à la maille cristalline. Ce principe est différent de celui des codes "nodaux", qui ne disposent pas de réseau et pour lesquels ce sont les nœuds qui relient les portions de dislocation qui sont translatés (Bulatov *et al.* 2004). Initialement bâti sur un modèle coin-vis, *mM* est passé à une description coin-vis-mixte des lignes au début des années 2000 (Madec 2001).

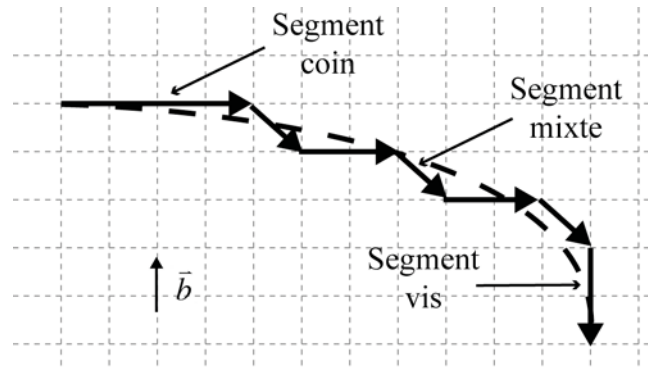


Fig. II.5 Discretisation d'une ligne de dislocation en segments coins, vis et mixtes. Les segments, disposés sur un réseau homothétique de la maille cristalline, peuvent avoir différentes tailles et se déplacent toujours perpendiculairement à leur vecteur ligne.

Dans *microMegs*, les lignes de dislocations sont discrétisées à l'aide de segments interconnectés (Fig. II.5). Un segment d'indice i est défini par son vecteur ligne \vec{l}_i et son vecteur déplacement \vec{d}_i (perpendiculaire à \vec{l}_i). Une ligne de dislocation est décrite par l'interconnexion d'une série de segments (voir à *Madec 2001* pour une description détaillée des règles de connexion). Nous retiendrons que les segments se déplacent par translation sur un réseau, perpendiculairement à leur direction de ligne, en augmentant ou réduisant leur norme et/ou celles de leurs voisins.

L'ensemble des segments nécessaires pour décrire les dislocations d'un (ou plusieurs) système de glissement est tabulé dans une base de vecteurs. Dans le cadre de ce travail, nous avons défini une nouvelle base qui permet une discrétisation suivant le modèle mixte des dislocations des deux familles de systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ de MgO. Elle est disponible dans le package *mM* et peut être appliquée aux autres matériaux de structure NaCl (Annexe 1).

La construction de cette base répond à plusieurs contraintes ; notamment la présence, pour les deux familles de systèmes, des directions vis et coins. Il est important que les directions communes aux différents systèmes de glissement soit tabulées, elles sont nécessaires au traitement des interactions entre dislocations ou encore à la gestion du glissement dévié. 8 segments par système de glissement permettent la description d'une boucle de dislocation : 2 segments vis, 2 segments coins et 4 segments mixtes pour un total de 96 segments (8 segments \times 12 systèmes de glissement).

Dans mM , toutes les longueurs sont ramenées à un facteur de mesure a . Cette longueur de référence est proportionnelle au rapport entre la maille cristalline et la norme du vecteur de Burgers (le facteur de proportionnalité est le facteur échelle e sur lequel nous reviendrons dans la section IV.2.2). Si techniquement a peut prendre n'importe quelle valeur, il reste caractéristique du réseau sur lequel repose le continuum élastique. Plus a est petit, plus la description est fine et se rapproche d'une description à l'échelle atomique aux dépens du temps de calculs.

II.3.4 Calcul des forces

Le calcul des forces effectives sur chaque segment de dislocation est une étape importante d'un calcul de DD puisqu'il est préalable à tout incrément de déformation. Cette étape est la plus coûteuse en temps CPU et requiert donc un traitement efficace.

Le calcul des forces est réalisé au centre des segments dans l'hypothèse de l'élasticité isotrope. Cette approximation reste discutable pour certains matériaux. *Rhee et al. (2001)* montrent qu'il y'a un écart de l'ordre de 15% entre les approches isotropes et anisotropes dans un calcul d'interactions entre dislocations (champs de contrainte à courte distance). Cependant, les deux calculs convergent pour un calcul d'interactions à longue distance³. Le lecteur pourra se référer à *Bacon 1985* pour plus de renseignements sur le traitement de l'anisotropie élastique.

Une dislocation, dans un champ de contrainte $\bar{\tau}$, est soumise à une force, équation (II.24). Cette force, par unité de longueur de ligne, est la force de Peach-Koehler \vec{F}_{PK} . Elle provient de trois contributions distinctes : la contrainte appliquée τ_{app} , la contrainte interne τ_{int} et la tension de ligne locale τ_l .

$$\tau_{PK}b = \vec{F}_{PK} = \left(\bar{\tau} \cdot \vec{b} \right) \times \vec{l} \quad (II.24)$$

Généralement, la contrainte appliquée τ_{app} est homogène et uniforme dans le volume simulé. Dans mM , les variations de τ_{app} dans le temps sont contrôlées en fonction du type d'essai de

³ Cette étude a été réalisée dans le molybdène qui dispose d'un coefficient d'anisotropie $A=0,77$ dans les conditions standards.

traction-compression effectué : essai à contrainte imposée (fluage), essai à vitesse de déformation imposée, fatigue, relaxation, etc.

Considérons un segment j , la contrainte interne τ_{int} appliquée à j est définie par la résultante de l'ensemble des champs de contrainte des segments présents dans le volume simulé exceptés ceux du segment j lui même et de ses deux plus proches voisins $j-1$ et $j+1$. En effet, l'interaction entre j , $j-1$ et $j+1$ est calculée via un terme de tension de ligne. La discrétisation en segments rectilignes des lignes de dislocation empêche toute formulation directe de tension de ligne (un segment n'est pas courbé), celle-ci est calculée sur un arc de cercle fictif de rayon R (Fig. II.6) reliant les centres des segments $j-1$ et $j+1$, via l'expression suivante (de Wit & Koehler 1959) :

$$\tau_l = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)R} \left(1 + \nu - 3\nu \sin^2(\theta) \right) \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \quad (\text{II.25})$$

Où θ est l'angle formé entre le segment considéré et le vecteur de Burgers, R est le rayon de courbure attribué au segment et à ses plus proches voisins sur lequel est appliquée la tension de ligne et r_0 le rayon de coupure de la dislocation.

Il existe, dans *mM*, plusieurs expressions de τ_l qui diffèrent quelque peu les unes des autres en fonction du mode discrétisation choisi (définition de R). En plus de l'expression de De Wit & Koehler (1959), l'utilisateur a le choix entre les formalismes de Foreman (1967) et de Mohles (2001). Enfin, il est possible d'introduire des valeurs tabulées de τ_l anisotrope via l'utilisation du logiciel DISDI (Douin et al. 1986).

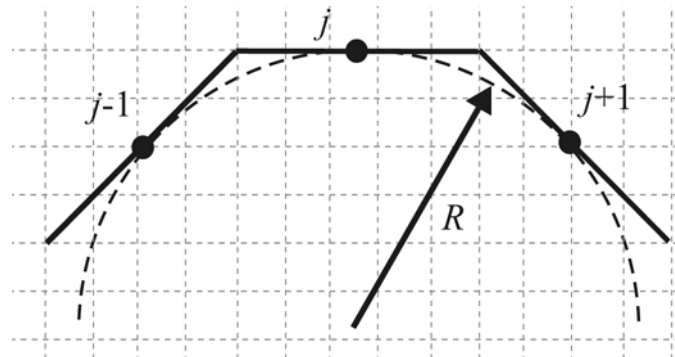


Fig. II.6 Calcul de la tension de ligne sur un segment d'indice j . Un segment étant rectiligne, il ne dispose pas de tension de ligne. L'interaction élastique entre les segments $j-1$, j et $j+1$ est donc modélisée en remplaçant les trois segments par un arc de cercle qui passe en leurs centres.

Le tenseur de contraintes exprimé dans l'équation (II.24) contient les contributions de la contrainte appliquée et de la contrainte interne. Après projection dans le plan et dans la direction de glissement considéré, la contrainte effective τ_{eff} qui agit sur un segment de dislocation est définie par l'équation (II.26).

$$\tau_{eff} = \tau_{app} + \tau_{int} + \tau_l \quad (II.26)$$

Le calcul de la contrainte effective est une étape coûteuse en temps de calculs : pour n segments, elle met en jeu plus de n^2 opérations. Des algorithmes numériques ont donc été développés afin de simplifier ce traitement. Par exemple, la méthode multipôles (ou méthode des boîtes) (*Greengard & Rokhlin 1987 ; Verdier et al. 1998*) permet de ne pas répéter l'évaluation de la contrainte interne à longue distance à chaque itération en supposant que celle-ci évolue beaucoup moins vite dans le temps que la contributions des segments proches. Le volume simulé est donc découpé en « boîtes » et seules les contributions au champ de contrainte des boîtes les plus proches du segment considéré sont prises en compte à chaque itération. La contribution des boîtes les plus éloignées est prise en considération sur des intervalles de pas de calculs plus éloignés, fixés par l'utilisateur. Cette méthode est détaillée dans *Madec 2001*.

II.3.5 Vitesse et temps

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, *mM* repose sur une discrétisation de l'espace. Les lignes de dislocations sont discrétisées en segments qui glissent sur les rails d'un réseau tridimensionnel.

microMegas repose aussi sur une discrétisation du temps qui permet de calculer, au cours du temps, le cisaillement induit par le glissement des dislocations. Numériquement, ce lien est fait en deux temps : la définition d'une vitesse de glissement des dislocations v , qui dépend de la contrainte effective (et de la température si $T < T_a$), et l'utilisation d'un pas de temps dt , le produit des deux grandeurs donne le déplacement dx de la dislocation, équation (II.27).

$$vdt = dx \quad (II.27)$$

Afin de maintenir la stabilité d'un calcul en temps et en déplacement, dx doit être équivalent à une fraction du vecteur déplacement par incrément de temps dt .

Dans cette étude, nous avons défini deux formulations de vitesse : une première pour le régime thermiquement activé basée sur la nucléation de double-décrochements (II.23) et une seconde qui décrit le glissement dans le régime athermique.

II.3.5.1 Vitesse dans le régime thermiquement activé ($T < T_a$)

Comme nous l'avons vu dans la section II.2.3, la vitesse des dislocations, dans le régime thermiquement activé, peut être décrite par l'équation (II.23). Après avoir réintroduit la formulation de Kocks de l'énergie d'activation, équation (II.17), la vitesse s'écrit :

$$v(\tau, T) = a' \frac{\nu_D b}{w^*(\tau)} \frac{L}{w^*(\tau)} \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0 \left[1 - \left(1 - (\tau/\tau_p)^p\right)^q\right]}{kT}\right) \quad (\text{II.28})$$

Comme nous l'avons rappelé dans le premier chapitre, au dessous de T_a , les boucles de dislocation sont très anisotropes dans MgO et principalement de caractère vis (*Messerschmidt 2010*). Cela suppose que des double-décrochements de caractère coin soient nucléés sur des portions vis et se propagent très rapidement. Ce sont donc les dislocations vis, beaucoup moins mobiles que les coins, qui gouvernent la déformation de MgO et sa contrainte d'écoulement au dessous de T_a . Le fait que les dislocations vis gouvernent la déformation plastique, dans le régime thermiquement activé, est caractéristique d'autres matériaux à forte friction de réseau comme le fer ou l'olivine (*Phakey et al. 1972 ; Caillard 2010*)

microMegas ne gère aujourd'hui qu'une seule loi de vitesse thermiquement activée par calcul. Deux raisons justifient ce mode de fonctionnement : (i) les lois de vitesses thermiquement activées paramétrées dans *mM* sont, jusqu'à aujourd'hui, ajustées sur des données expérimentales, or l'évolution de la vitesse en contrainte et en température reste mal connue expérimentalement pour des dislocations non-vis (ii) la gestion de plusieurs lois de vitesse, parallèlement à celle d'un seul pas de temps, peut s'avérer instable numériquement. Elle requiert donc, dans la mesure où les dislocations non-vis ne contrôlent pas la contrainte d'écoulement, une solution plus simple. Il n'est donc pas utile de préparer, dans le strict cadre d'une application à *mM*, une série de paramètres (a' , ΔH_0 , $w^*(\tau)$, τ_p , p et q) pour chacun des deux caractères de dislocation. Pendant ma thèse, lorsque l'utilisation de *mM* s'est avérée

nécessaire, nous avons toujours choisi de paramétrer une loi de mobilité de type double-décrochements pour les dislocations vis.

Afin de calculer la vitesse d'une portion vis, il reste à préciser comment la longueur de ligne L est définie dans le code et quelle contrainte effective lui est associée. Si n segments de longueur l_i sont alignés dans la même direction vis, on définit L comme la somme des longueurs de chacun des segments. Cette définition suppose que les segments voisins aux extrémités ne soient pas alignés dans la direction vis.

$$L = \sum_{i=1}^n l_i \quad (\text{II.29})$$

Une approche a été réalisée pendant la thèse de *S. Naamane (2008)* afin de calculer la contrainte effective agissant sur une portion droite de longueur L . Elle est basée sur le calcul de la vitesse v_i d'un segment i appartenant à L corrigée d'un facteur tenant compte des vitesses v_j relatives à chacun des j autres segments constitutifs de L . Cette solution n'a pas été retenue pour des problèmes de rugosité sur les lignes de dislocations (blocage artificiel de crans coins censés être très mobiles). Dès lors, une nouvelle solution a été intégrée à *mM* dans le cadre de ma thèse. Elle vise à calculer, à partir de la contrainte effective τ_i qui agit sur chacun des segments i d'une portion L , une contrainte effective moyenne $\bar{\tau}_i$ à partir de laquelle la vitesse de la ligne est évaluée. Cette approche, relativement simple, permet de reproduire les microstructures observées en MET et donc de réduire le problème de rugosité des lignes. D'autres approches sont actuellement en cours de développement afin de pallier le manque de rigueur physique qu'inspire la méthode actuelle.

Enfin, pour rendre compte de la mobilité des dislocations non-vis, nous considérons que la vitesse d'un segment non-vis est égale à K fois celle d'un segment vis de longueur $L=1\mu\text{m}$ à même contrainte effective et même température (*Monnet et al. 2004 ; Naamane et al. 2010*) :

$$v_{non-vis}(\tau, T) = K(T) v_{vis}(L = 1\mu\text{m}, \tau, T) \quad (\text{II.30})$$

Afin d'expliquer l'anisotropie des boucles de dislocation à basse température, K doit être très grand. Cependant, près de T_a , K doit aussi converger vers 1 afin de rendre compte de l'isotropie des boucles dans le régime athermique. Il est difficile de décrire l'évolution de $K(T)$

dans le régime thermique. Néanmoins, *Monnet et al. (2004)* ont montré que s'il était choisi assez grand à basse température, K n'avait pas d'influence sur les résultats obtenus en DD. Les valeurs de K choisies dans nos calculs seront abordées dans le chapitre suivant.

II.3.5.2 Vitesse dans le régime athermique ($T > T_a$)

Au-dessus de la température de transition athermique, les dislocations ne sont plus soumises à la friction de réseau. Elles sont de forme isotrope (plus de différence de vitesse entre les différents caractères) et leur vitesse varie linéairement avec la contrainte, équation (II.31). Ce type de loi est souvent utilisé en Dynamique des Dislocations (*Devincre et al. 2001 ; Madec 2001 ; Queyreau et al. 2009*) puisqu'il est caractéristique des matériaux à faible friction de réseaux tels que les métaux CFC.

$$v(\tau) = \frac{\tau b}{B} \quad (\text{II.31})$$

Où B est le coefficient de frottement visqueux.

Dans les métaux et à haute température, le coefficient de frottement visqueux rend compte de l'interaction des dislocations avec le gaz de phonons. Il est généralement mesuré lors d'expériences de sauts de contrainte, dans lesquelles le mouvement des dislocations est observé par figure d'attaque (*Urabe & Weertman 1975* pour un exemple sur le fer à haute température). Dans les cristaux ioniques, en plus des origines connues pour les métaux (gaz d'électrons, gaz de phonons, effet thermoélastique), d'autres mécanismes physiques peuvent être à l'origine de B en tenant compte de l'influence de la charge des dislocations. On trouve deux approches dans la littérature : (i) *Granato & Lücke (1956)* suggèrent que l'interaction avec les phonons, comme dans les métaux, est à l'origine du frottement à haute température (ii) *Robinson & Birnbaum (1966)* supposent que c'est une interaction du type dislocation chargée-nuage de charges qui est à l'origine du frottement visqueux.

Robinson (1972) montre que, bien que les deux théories aboutissent à des résultats comparables, celle tenant compte des charges est plus compatible avec les mesures expérimentales de B dans LiF et KCl (tout deux halogénures alcalins de structure NaCl) qui sont de l'ordre de 10^{-5} - 10^{-4} Pa.s. Le même ordre de grandeur a été mesuré par *Singh et al. (2008)* dans MnO et CoO (toujours deux phases B1, comme MgO). Cependant, peu d'études présentent des mesures à haute température de B dans MgO. *Kardashev et al. (1985)*, dans

une étude sur la distance moyenne entre obstacles dans MgO, font référence à cette absence de données. *Appel et al. (1977)* ont fait une mesure *in-situ* de $B \sim 10^{-2}$ Pa.s à température ambiante, mesure critiquée dans *Kardashev et al. 1985* : cette valeur est deux ordres de grandeur plus grande que les mesures obtenues, dans d'autres cristaux ioniques, par les techniques classiques (mesure de vitesses par couplage saut de contrainte-figures d'attaque). Devant l'absence de données relatives au coefficient B dans MgO à haute température, nous avons choisi d'utiliser la valeur $B=10^{-5}$ Pa.s qui fait référence au coefficient de frottement visqueux mesuré généralement dans les cristaux ioniques. Cette valeur est aussi communément utilisée en DD pour décrire le régime athermique des métaux CC et CFC. Nous verrons par la suite que, dans le cadre de nos calculs, la valeur de B n'a aucune conséquence sur les résultats présentés puisque à haute température, la déformation plastique n'est pas gouvernée par la mobilité des dislocations mais par leur comportement collectif et leurs interactions.

II.3.6 Conditions Limites Périodiques (CLP)

Les conditions de bord ont été introduites, pour la première fois dans *mM*, par *Devincre (1993)* via l'utilisation de surfaces libres. Néanmoins, ces dernières induisent un biais dû aux forces images que subissent les dislocations proches des surfaces du volume simulé.

Bulatov et al. (2000) ont abordé la question des CLP en suggérant la mise en place de boîtes images du volume de départ, tout autour du volume simulé. Dès lors, le volume simulé devient représentatif d'un ensemble macroscopique. Chaque dislocation qui sort du volume simulé y est réintroduite à une position périodiquement équivalente sous forme de dislocation image (*Fig. II.7*). Cette technique a pour principaux intérêts de préserver la connectivité des lignes de dislocation et l'invariance par translation. De plus, le flux entre dislocations entrantes et sortantes est équilibré de telle sorte à ne pas avoir de chute de densité artificielle ou de variations importantes de contrainte interne liées à l'utilisation des CLP.

Cette méthode a été introduite dans *mM* pendant la thèse de *R. Madec (2001)*.

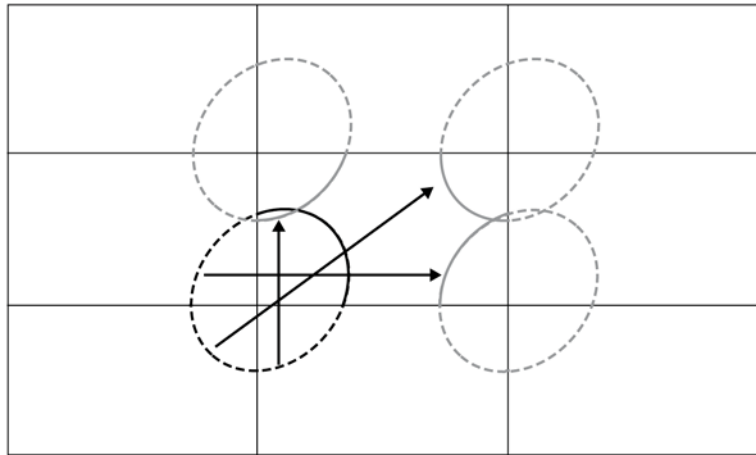


Fig. II.7 Conditions Limites Périodiques. Schéma à deux dimensions d'une boucle dislocation (en noir) réinjectée dans le volume simulé par Conditions Limites Périodiques. Le volume simulé, au centre de la figure, est entouré de volumes images. Lorsqu'une portion de dislocation sort du volume simulé, elle pénètre un volume dupliqué et une image de la portion (en gris) est renvoyée dans le volume initial.

Néanmoins, l'utilisation des CLP requiert une attention particulière pour certaines géométries. En effet, un recours aux CLP pour un système de glissement orthogonal à une (ou plusieurs) face du volume simulé entraîne assez rapidement des artéfacts de simulations. L'auto-annihilation est le mécanisme qui décrit l'interaction de contact entre une dislocation image et sa dislocation d'origine. Après un (ou plusieurs) passage d'une dislocation dans le volume simulé, celle-ci peut se retrouver réintroduite dans son plan de glissement initial. Dès lors, la dislocation et son image peuvent entrer en contact ; les deux dislocations disposant du même vecteur de Burgers mais de vecteurs ligne de sens opposés s'annihilent (*Fig. II.8*). Un autre artéfact classique des CLP mène à la formation de dipôles artificiels. Ces dipôles apparaissent lorsqu'une dislocation est réinjectée dans un plan trop proche de celui de la dislocation initiale. Dans le cas de ces deux artéfacts, le libre parcours moyen de la dislocation est limité de façon artificielle.

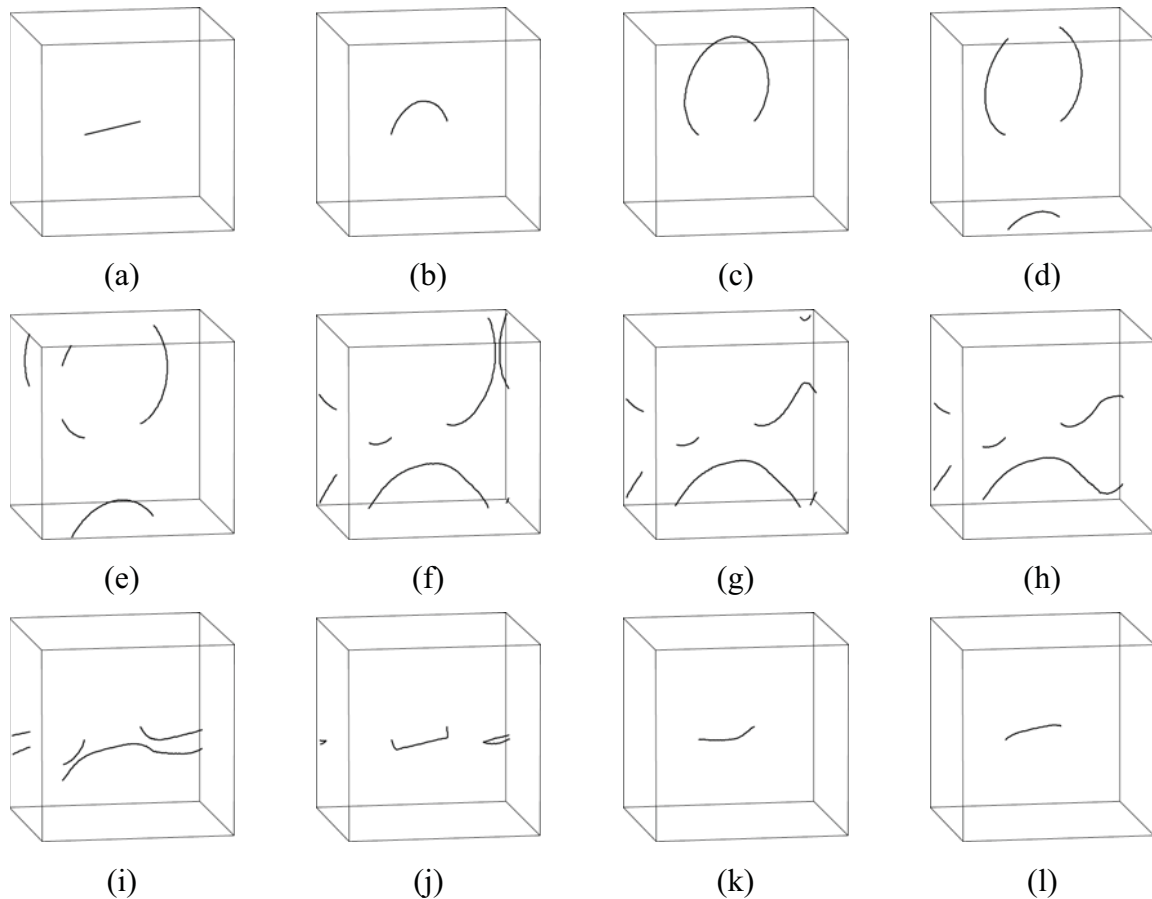


Fig. II.8 Illustration du mécanisme d'auto-annihilation. De (a) à (c), une source de Frank-Read s'ouvre sous l'effet de la contrainte appliquée. (d) une portion de la dislocation a franchi la face supérieure du volume simulé et est réinjectée à une position périodiquement équivalente (au bas de la boîte). (e) une portion de la dislocation sort par la face antérieure et est réinjectée par la face arrière. (f) par le jeu de CLP, deux portions de la dislocation se retrouvent dans le même plan. Elles ont le même vecteur de Burgers et des sens de vecteur ligne opposés, elles vont s'annihiler. (g) une première partie de la dislocation s'est auto-annihilée. De (h) à (j), le processus d'auto-annihilation se poursuit sur toute la ligne de dislocation. (k)-(l), la dislocation revient à sa configuration initiale.

Il existe trois solutions afin de limiter les artefacts de simulation induits par les CLP (annihilations et interactions dipolaires artificielles). La première consiste à traduire le plan de glissement dans lequel est réintroduite la dislocation après avoir traversé le volume simulé. Cette méthode, plus communément appelée la méthode des « shift », est détaillée dans *Madec et al. 2004*. La seconde méthode consiste à dilater le volume simulé. Initialement de forme cubique, celui-ci peut être déformé dans les trois directions cristallographiques afin d'augmenter le libre parcours moyen avant auto-annihilation des dislocations. Enfin, la troisième méthode consiste à tourner les systèmes de glissement au sein d'un volume de simulation fixé. En pratique, cette méthode consiste à appliquer des rotations à la base de vecteurs autour d'un ou de plusieurs axes. Elle doit répondre à une règle imposée par mM

selon laquelle les vecteurs de la base doivent conserver leurs composantes entières. C'est pourquoi, les rotations sont souvent associées à des homothéties.

Pour les simulations de DD où l'application classique des CLP se serait avérée insuffisante, nous avons opté pour une combinaison des deux dernières méthodes présentées ci-dessus : des rotations avec homothéties puis une dilatation du volume simulé.

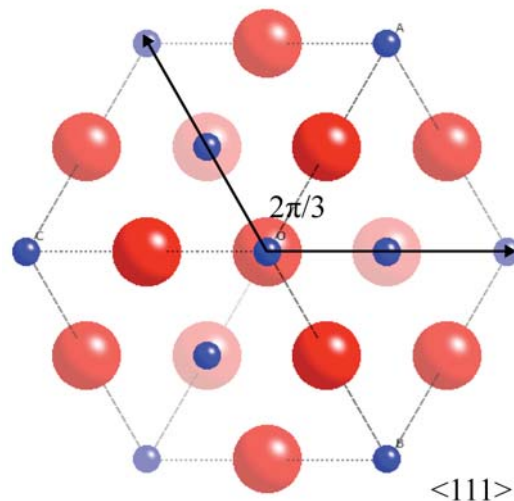


Fig. II.9 Projection suivant $\langle 111 \rangle$ de la structure cristallographique de MgO. On visualise l'axe de symétrie d'ordre 3 et les permutations de chaque empilement lors d'une rotation de $2\pi/3$ autour de $\langle 111 \rangle$.

Pour déterminer les rotations adéquates, nous avons suivi la méthode exposée dans *Queyreau 2008*. Elle consiste à effectuer la (ou les) rotation(s) autour des axes de plus haute symétrie du cristal. MgO est, comme l'aluminium, de groupe d'espace $Fm\bar{3}m$. Il dispose donc d'un axe d'ordre 3 suivant $\langle 111 \rangle$ qui permet de permuter chacun des empilements atomiques ABC (Fig. II.9). nous avons donc commencé par effectuer une rotation de $\pi/3$ autour de $[111]$. Afin de conserver des composantes entières des vecteurs de la base, une homothétie d'un facteur trois est nécessaire (Fig. II.10). Appliquée aux plans $\{110\}$, on remarque que cette similitude n'est pas suffisante ; en effet, trois plans restent perpendiculaires aux faces du volume simulé après rotation.

Une deuxième rotation-homothétie a été appliquée pour pallier au problème. Elle permet de définir une nouvelle géométrie, avec un unique plan (909) perpendiculaire au volume simulé. L'axe de sollicitation de type $\langle 100 \rangle$ doit donc être choisi de façon à ne pas activer le glissement des dislocations dans ce plan. Nous avons choisi de garder les mêmes transformations pour le système de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$; les plans $\{100\}$ deviennent

après transformations les plans $(\bar{1}4\bar{8})$, $(\bar{4}74)$ et (841) qui sont donc des plans compatibles puisque non-orthogonaux aux faces du cristal.

1 rotation :

$$\begin{array}{ccc}
 \left\{ \begin{array}{l} (\bar{1}10) \\ (110) \\ (0\bar{1}1) \\ (011) \\ (\bar{1}01) \\ (101) \end{array} \right\} & \xrightarrow[\begin{bmatrix} \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}]{\text{Rot}([111], \pi/3)} & \left\{ \begin{array}{l} (\bar{1}01) \\ \left(\frac{1}{3} \frac{4}{3} \frac{1}{3} \right) \\ (1\bar{1}0) \\ \left(\frac{1}{3} \frac{1}{3} \frac{4}{3} \right) \\ (0\bar{1}1) \\ \left(\frac{4}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} \right) \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{Homot}(3)} \left\{ \begin{array}{l} (\bar{3}0\bar{3}) \\ (141) \\ (\bar{3}\bar{3}0) \\ (114) \\ (0\bar{3}3) \\ (411) \end{array} \right\}
 \end{array}$$

2 rotations :

$$\begin{array}{ccc}
 \left\{ \begin{array}{l} (\bar{1}10) \\ (110) \\ (0\bar{1}1) \\ (011) \\ (\bar{1}01) \\ (101) \end{array} \right\} & \xrightarrow[\begin{bmatrix} \bar{1} & \bar{4} & 8 \\ 4 & 7 & 4 \\ \bar{8} & 4 & 1 \end{bmatrix}]{9 \cdot \text{Rot}([111], \pi/3) \cdot \text{Rot}([\bar{1}11], \pi/3)} & \left\{ \begin{array}{l} (\bar{3}312) \\ (\bar{5}11\bar{4}) \\ (12\bar{3}\bar{3}) \\ (4115) \\ (909) \\ (78\bar{7}) \end{array} \right\}
 \end{array}$$

Fig. II.10 Similitudes appliquées à la base de vecteur dans le cadre des Conditions Limites Périodiques. Deux rotations et deux homothéties sont appliquées aux vecteurs initiaux afin d'éviter les artéfacts de simulation liés aux CLP. Par souci de clarté, seuls les vecteurs plans $\{110\}$ sont représentés sur la figure. Sont entourés en rouge, les plans de glissement qui restent orthogonaux aux parois du volume simulé après transformation. La matrice de rotation finale est encadrée en vert.

Si ces transformations complexes permettent d'augmenter le libre parcours moyen des dislocations (voir *Madec et al. 2004* ; *Naamane 2008* pour plus de détails sur le calcul du libre parcours moyen), nous avons systématiquement effectué des dilatations du volume simulé afin de l'optimiser.

L'utilitaire *Diophan*, développé par *R. Madec* et inclus dans le package *mM*, permet de définir les dimensions de boîte L_x , L_y et L_z qui maximise le libre parcours moyen des dislocations dans un plan donné. Néanmoins, nous avons vu précédemment qu'augmenter de manière trop importante le libre parcours moyen avant auto-annihilation forçait les dislocations à passer dans des plans trop proches les uns des autres, aboutissant à la formation de dipôles artificiels.

Il faut alors trouver le bon compromis entre le libre parcours et la distance entre plans⁴. La géométrie du volume simulé est donc dépendante du type d'étude envisagé où plus précisément de la quantité de déformation espérée. Globalement, pour une taille de boîte usuelle de $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$, nous admettrons qu'un libre parcours moyen égal à une dizaine de traversées de boîte est un bon compromis. L'utilitaire *Polyfront* (disponible dans le package *microMegas*) permet de déplier l'ensemble des plans traversés par une dislocation pour un jeu de CLP donné (similitudes + dilatation de volume) sous la forme d'un plan étendu. Il permet de visualiser le libre parcours moyen d'une dislocation avant d'être réinjectée dans son plan de glissement initial par conditions aux limites périodiques. La figure II.11 illustre l'augmentation, due aux transformations, du nombre de plans traversés pour deux plans de la famille $\{100\}$.

Si le libre parcours moyen des dislocations est augmenté grâce aux transformations, il n'est pas pour autant infini. En effet, les auto-annihilations ne sont que retardées et une dislocation finira tout le temps par repasser dans le plan dans lequel elle a été générée en début d'essai (Fig. II.13). Les auto-annihilations entraînent des chutes brutales de densité de dislocations et biaisent la dynamique d'un essai de déformation. Elles peuvent être repérées sur l'évolution des courbes de densité de dislocation par système de glissement. La quantité de déformation que permet un essai de DD est étroitement liée au libre parcours moyen avant auto-annihilation, et toute analyse quantitative doit donc être faite avant l'apparition des auto-annihilations ou des dipôles.

⁴ N.B : Si une dilatation de volume optimise le glissement dans un plan d'une famille, il ne l'optimise pas systématiquement pour tous les plans de la famille et encore moins pour les systèmes de glissement d'une autre famille. Il est donc nécessaire de multiplier les vérifications afin de trouver la taille de volume simulé qui optimise le libre parcours moyen dans un maximum de plans.

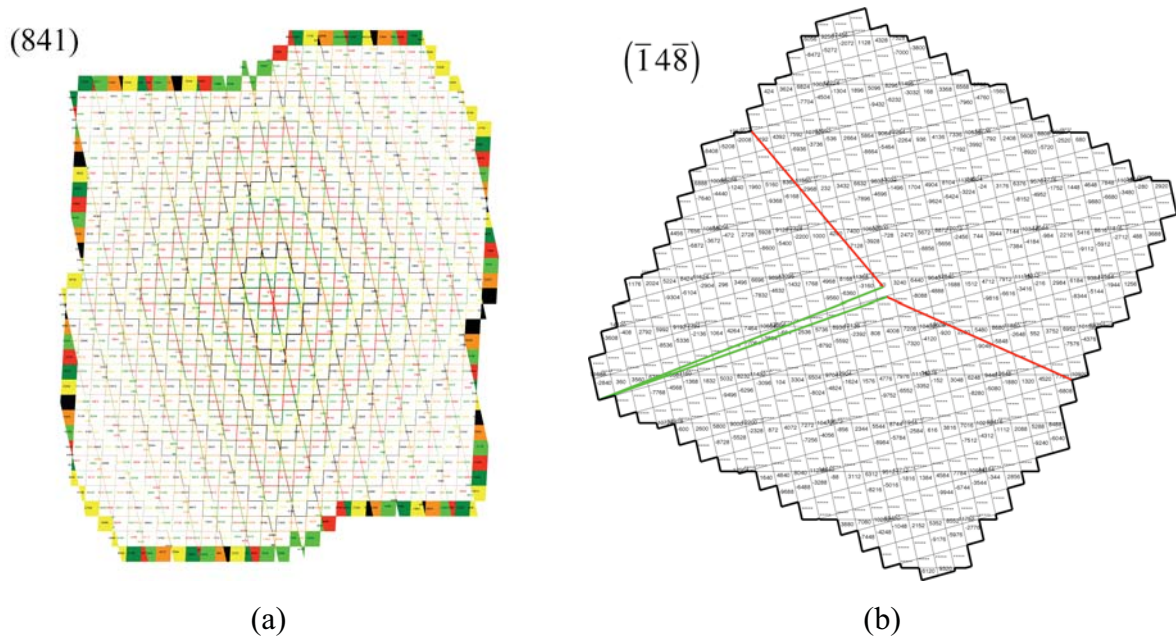


Fig. II.11 Représentation des plans étendus après rotations-homothéties et dilatation du volume simulé pour les plans $(\bar{1}48)$ et (841) (respectivement (100) et (001) avant transformation). Chaque polygone vide représente un nouveau plan traversé. (a) les polygones colorés représentent les frontières du plan étendu, ils correspondent à des plans déjà traversés et favorables à l'auto-annihilation. (b) La distance la plus courte (en rouge) et la plus longue (en vert) sont de l'ordre d'une dizaine de plans. Cette distance est un bon compromis pour éviter la formation de dipôles artificiels tout en retardant l'apparition des auto-annihilations.

Afin de compléter les études expérimentales et de comprendre les mécanismes physiques à l'origine de la plasticité dans les minéraux, nous avons mis en place une Modélisation Multi-Echelle (MME) de la déformation par glissement de dislocations. Cette modélisation est bâtie suivant ces trois axes :

- La définition des structures de cœur des dislocations et le calcul des contraintes de Peierls par l'application du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin.
- La modélisation de l'activation thermique du glissement par le calcul de configurations critiques de double-décrochements et la mise en place d'une loi de vitesse.
- L'étude du comportement collectif des dislocations par Dynamique des Dislocations.

Nous présenterons dans le chapitre suivant les premières applications de notre MME à pression ambiante. Cette étude revêt un double objectif qui consiste à la fois à porter un nouveau regard sur la déformation de MgO tout en validant un modèle en vue d'une application dans les conditions P - T du manteau.

CHAPITRE III

MODELISATION DES CRSS A PRESSION AMBIANTE

Avant d'appliquer notre MME aux conditions P - T - $\dot{\epsilon}$ du manteau inférieur, la déformation de MgO a d'abord été étudiée à pression ambiante et aux vitesses de déformation du laboratoire. Dans ces conditions, les résultats de notre approche peuvent directement être confrontés aux données expérimentales.

Dans une première section, nous rappellerons les résultats obtenus par *Ph. Carrez* sur les structures de cœur des dislocations et les contraintes de Peierls dans MgO. Ensuite, nous présenterons la modélisation de l'activation thermique en exposant notamment les calculs de configurations critiques de double-décrochements (énergies de nucléation et géométries). La loi de mobilité, équation (II.28), sera confrontée aux mesures de vitesse disponibles dans la littérature. Dans une troisième section, nous exposerons les résultats relatifs au calcul des CRSS dans les familles de systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Enfin, le chapitre se terminera par une discussion.

III.1 Les structures de cœur des dislocations dans MgO

La section III.1 fait référence à des calculs réalisés par Ph. Carrez. Il est nécessaire d'en rappeler les principaux résultats, utiles à la compréhension de la suite du mémoire.

III.1.1 Les γ -surfaces

Comme illustré *Fig. II.1*, l'approche du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin que nous avons introduite au chapitre précédent nécessite le calcul de γ -surfaces qui définissent le paysage énergétique de chaque plan de cisaillement. Les γ -surfaces, présentées dans cette section, ont été calculées *ab initio*. Le paramètre de maille a et les constantes élastiques ont été recalculés au préalable. Ils sont rappelés *Tab. III.1*. Voir *Carrez et al. 2009* pour plus de détails sur les paramètres de simulation (taille de cellules, conditions de bords, etc.).

	a (Å)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	μ (GPa)	$\nu_{\{110\}}$	$\nu_{\{100\}}$
<i>Carrez et al.</i> 2009	4,24	279	93	146	116,53	0,18	0,27
<i>Karki et al.</i> 1997	4,25	291	91	139	121,50		

Tab. III.1 paramètre de maille, constantes élastiques, module de cisaillement anisotrope et coefficients de Poisson dans MgO, à pression ambiante. Les résultats issus de Karki et al. 1997 sont donnés à titre comparatif. Le module de cisaillement anisotrope et les coefficients de Poisson sont calculés à l'aide du logiciel DISDI (Douin et al. 1986).

Les γ -surfaces ont été calculées dans les plans $\{110\}$, $\{100\}$ et $\{111\}$. Elles sont représentées *Fig. III.1*. Quel que soit le plan de glissement, la direction $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ correspond toujours au chemin de plus faible énergie ce qui est en accord avec la définition du vecteur de Burgers. La valeur maximale de l'énergie de faute d'empilement dans cette direction est de $1,05 \text{ J.m}^{-2}$ dans $\{110\}$, $2,18 \text{ J.m}^{-2}$ dans $\{100\}$ et $2,46 \text{ J.m}^{-2}$ dans $\{111\}$.

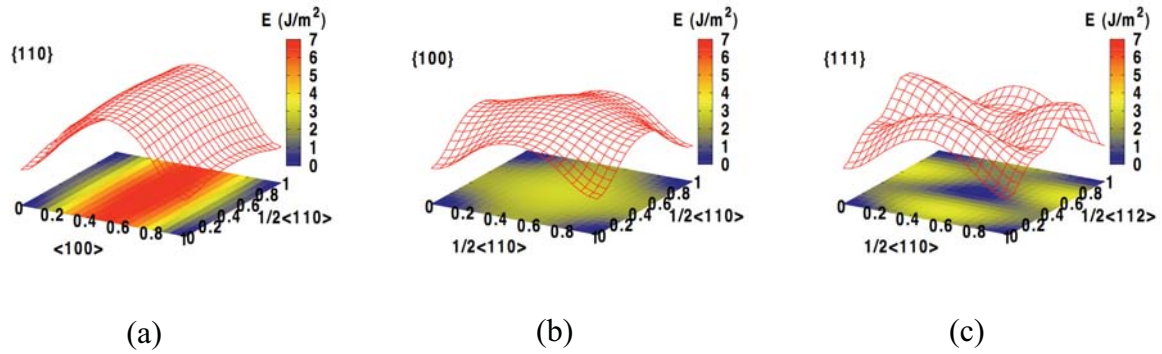


Fig. III.1 γ -surfaces à 0 GPa. Les γ -surfaces pour les plans (a) $\{110\}$, (b) $\{100\}$ et (c) $\{111\}$ sont représentées. Quel que soit le plan cisailé, la direction $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ correspond toujours au chemin de plus faible énergie.

III.1.2 Structures de cœur et contraintes de Peierls

Pour appliquer la méthode PNG, il est nécessaire de construire un maillage nodal, homothétique du réseau cristallin, autour de la ligne de dislocation. Ce réseau dispose des mêmes symétries que la maille cristalline et va définir les plans dans lesquels le cœur de la dislocation va pouvoir s'étaler. Appliqué à MgO, pour un vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[110]$, on introduit les plans $(1\bar{1}0)$, (001) , $(1\bar{1}1)$ et $(1\bar{1}\bar{1})$ (Fig. III.2).

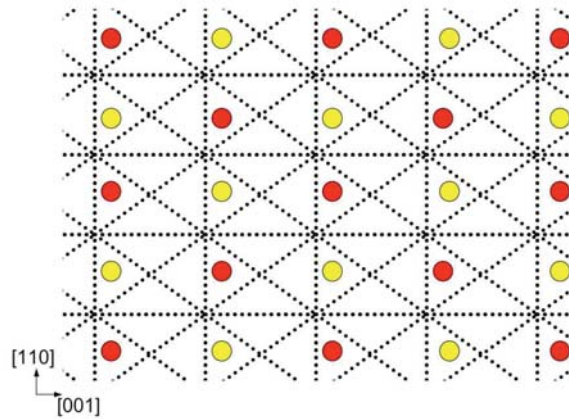


Fig. III.2 Positions des plans introduits dans la méthode PNG. superposés à la structure cristalline de MgO. Les atomes jaunes et rouges correspondent respectivement à des atomes de Mg et de O.

Une dislocation de Volterra est introduite dans le volume de simulation, puis une étape de relaxation permet au cœur de s'étaler dans chacun des quatre plans. Pour une dislocation coin, la structure de cœur est planaire et le plan d'étalement du cœur est caractérisé par le plan de glissement de la dislocation (défini par le produit vectoriel $\vec{b} \times \vec{l}$). Une dislocation vis ne dispose pas de plan de glissement propre, sa structure de cœur peut donc s'étaler dans un ou

plusieurs des plans introduits. La carte de déplacements différentiels, *Fig. III.3*, permet de visualiser l'évolution des positions atomiques de la dislocation vis, à pression ambiante, avant et après relaxation. Elle s'étale principalement dans un plan de type $\{110\}$.

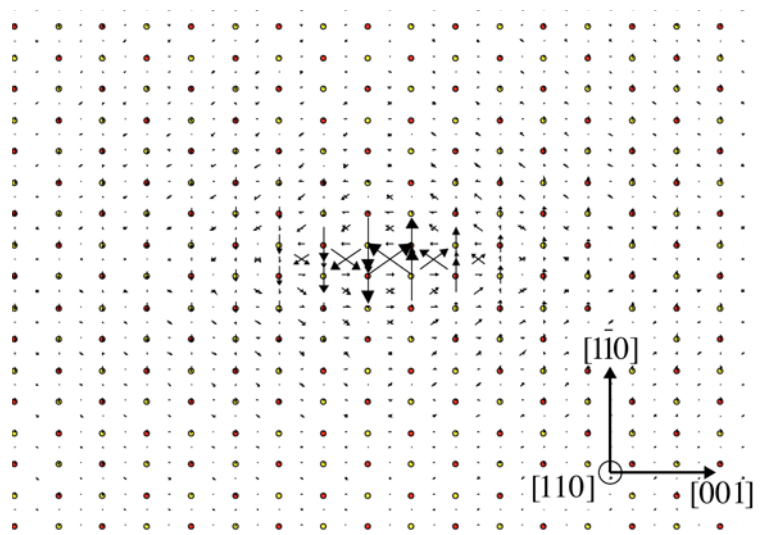


Fig. III.3 Carte des déplacements différentiels de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ à 0 GPa. Plus les flèches sont grandes, plus le déplacement relatif des atomes est important. Les flèches de déplacement montrent que le cœur de la dislocation s'étale principalement dans un plan $\{110\}$.

L'étalement d'un cœur de dislocation est donné par la fonction de désaccord ϕ_i (voir section II.1.2). Elle est représentée à 0 GPa pour la dislocation vis *Fig. III.4*. 80% de la densité de vecteur de Burgers est étalée dans les plans $\{110\}$, 20% dans les plans $\{100\}$. On mesure moins de 1% de l'étalement dans les plans $\{111\}$.

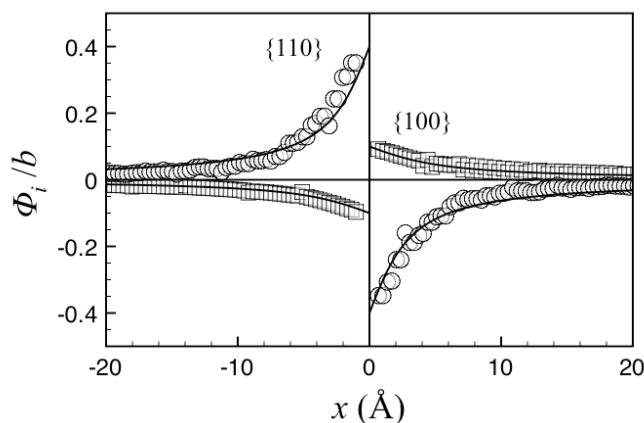


Fig. III.4 Evolution de la fonction de désaccord ϕ_i dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. A 0 GPa, 80% de la densité de vecteur de Burgers est étalée dans les plans $\{110\}$, 20% dans les plans $\{100\}$.

Les contraintes de Peierls ont été calculées en appliquant une déformation au volume simulé (voir *Denoual 2007* pour des détails sur la méthode). Comme cela est suggéré par la structure de cœur, la contrainte de Peierls de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ est plus faible dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$. Les valeurs sont respectivement de 150 MPa et 1600 MPa. Ces résultats sont en accord avec les contraintes expérimentales mesurées par *Appel & Wielke (1985)*, proche de 0 K pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$, et l'extrapolation de celles de *Barthel (1984)* dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Les contraintes de Peierls pour les dislocations coins sont, quel que soit le plan de glissement, plus faibles que celles des dislocations vis. Les données concernant les structures de cœur des dislocations $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ vis et coins dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ sont présentées dans le tableau *III.2*.

	$\{110\}$			$\{100\}$		
	$\rho_i (\%b)$	$\xi_i (\text{\AA})$	$\tau_P (\text{MPa})$	$\rho_i (\%b)$	$\xi_i (\text{\AA})$	$\tau_P (\text{MPa})$
Vis	80	1,7	150 (70)	20	3,2	1600 (220)
Coins	100	3,6	80 (30)	100	1,6	300 (100)

Tab. III.2 Paramètres des structures de cœur des dislocations vis et coins $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$. Les incertitudes sur les contraintes de Peierls sont données entre parenthèses.

III.2 Configuration critique des double-décrochements

III.2.1 Energie d'activation et géométrie des double-décrochements

Afin de modéliser l'influence de la température sur la mobilité des dislocations, j'ai calculé l'énergie d'activation et la géométrie des double-décrochements. Ces calculs sont basés sur la méthode IE introduite au chapitre II. Ils sont réalisés pour les dislocations vis et coins, dans les deux systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Les résultats sont présentés *Fig. III.5*.

Le coefficient α_i , intervenant dans l'expression du potentiel de Peierls, équation (II.10), est ajusté sur la distribution de la densité de vecteur de Burgers ρ_i , équation (III.1). Lorsque le cœur de la dislocation est planaire (pour les dislocations coins par exemple), toute la densité

de vecteur de Burgers est répartie dans un seul plan, alors $\rho_i=1$ et $\alpha_i=0$, et le potentiel est purement sinusoïdal. Lorsque la densité de vecteur de Burgers dans le plan i diminue, le potentiel tend vers une forme plus abrupte. Cette solution a été choisie de manière à introduire un effet de largeur des cœurs des dislocations sur la raideur du potentiel.

$$\alpha_i = \frac{1 - \rho_i}{2} \quad (\text{III.1a})$$

Le rayon de coupure r_c qui apparaît dans l'expression de ΔE est lui aussi ajusté sur le cœur des dislocations. Au lieu de le fixer à 5% du vecteur de Burgers, comme dans le modèle d'origine (Koizumi *et al.* 1993), il est fixé à 5% de la largeur à mi-hauteur de la densité de vecteur de Burgers pour une dislocation calculée à partir du modèle de Peierls 1D (III.1b).

$$r_{c,i} = 5\% \xi_{PN,i} \quad (\text{III.1b})$$

$\Delta H^*(\tau)$ est toujours plus faible dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$ (Fig. III.5a et Fig. III.5b). Cela signifie que la nucléation des double-décrochements est plus favorable dans les plans $\{110\}$ et donc, a fortiori, que les dislocations y sont plus mobiles. On remarque aussi que $\Delta H^*(\tau)$ est, pour un plan donné, plus faible pour les dislocations coins que pour les vis, excepté à très basse contrainte dans les plans $\{100\}$ (ΔH_0 est plus grand pour la dislocation coin que pour la dislocation vis). Cela est en accord avec les observations expérimentales qui suggèrent que la mobilité des dislocations coins est plus importante que celle des vis (Singh & Coble 1974a). Néanmoins, si l'ajustement par l'équation de Kocks des deux dislocations vis et de la dislocations coin dans $\{100\}$ semble en accord avec les calculs, celui de la dislocation coin dans $\{110\}$ n'est pas très bon. $\Delta H^*(\tau)$ pour la dislocation coin dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ a été calculé dans Woo & Puls 1977 à l'aide du modèle de Guyot & Dorn 1967. Les auteurs ont calculé des valeurs comprises entre 0,510 eV et 0,389 eV pour des contraintes allant respectivement de 1 à 10 MPa. Si le calcul et l'ajustement de Kocks sont en accord avec la valeur à $\tau=1$ MPa (respectivement 0,47 eV et 0,50 eV), l'ajustement est plus proche des données de Woo & Puls 1977 sur le reste de la gamme de contrainte ($\Delta H(\tau=10 \text{ MPa})=0,27$ eV). La périodicité du potentiel V_p , les valeurs de ΔH_0 et les paramètres ajustables de l'équation de Kocks sont présentées dans le tableau III.3.

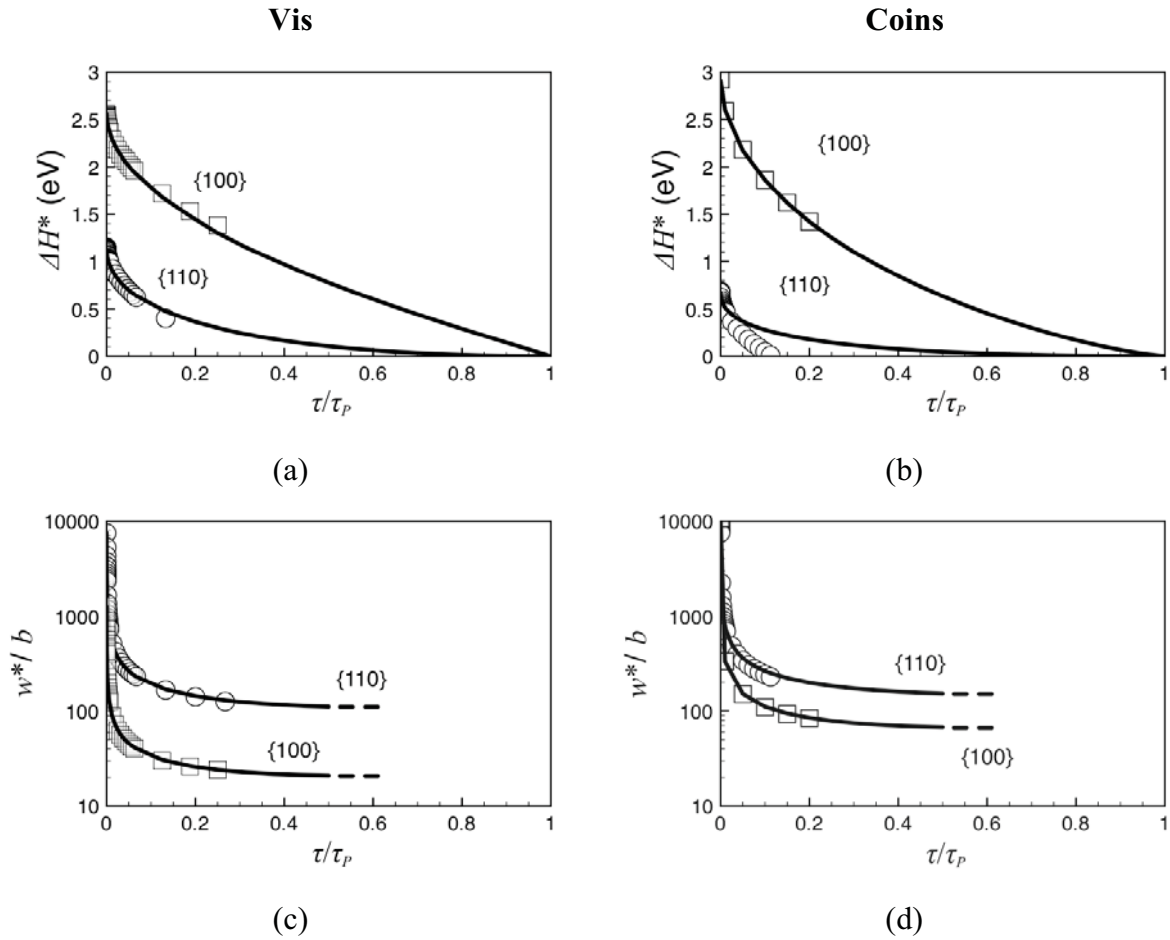


Fig. III.5 Configuration critique des double-décrochements à 0 GPa. (a)-(b) Evolution de l'enthalpie d'activation critique des double-décrochements, dans {110} et {100}, pour les dislocations vis et coins. Le trait plein correspond à un ajustement des données sur l'équation de Kocks (équation (II.17)). (c)-(d) Evolution de la largeur critique des double-décrochements, dans {110} et {100}, respectivement pour les dislocations vis et coins. La courbe en trait plein correspond à un ajustement des calculs sur l'équation (III.2) à basse contrainte, la largeur est contrainte à ne plus varier au-delà de $0,5 \tau_p$. Les tirets correspondent aux valeurs de w_c .

	{110}				{100}			
	a'	ΔH_0 (eV)	p	q	a'	ΔH_0 (eV)	p	q
Vis	$a/2$	1,18	0,50	2,00	$b/2$	2,57	0,54	1,00
Coins	$a/2$	0,68	0,50	2,00	$b/2$	2,92	0,53	1,30

Tab. III.3 Enthalpie d'activation des doubles décrochements. Dans l'ajustement des calculs à l'aide de l'équation de Kocks, les paramètres p et q sont contraints par $0,5 < p < 1$ et $1 < q < 2$ comme dans Kocks et al. 1975. Le paramètre de maille a vaut $4,24 \text{ \AA}$ et le vecteur de Burgers $2,99 \text{ \AA}$. a' est la périodicité du potentiel de Peierls.

La largeur $w^*(\tau)$ des double-décrochements croît lorsque la contrainte diminue au-dessous de $0,2\tau_p$ (Fig. III.5c et Fig. III.5d). À basse contrainte ($\tau < 0,2-0,3\tau_p$), l'évolution de

$w^*(\tau)$ peut être ajustée sur une équation du type (III.2). Cet ajustement converge vers une largeur palier w_c qui est de l'ordre de quelques dizaines (voir quelques centaines) de b . Cet ordre de grandeur est comparable aux valeurs généralement données pour les largeurs de kink dans les métaux (*Domain & Monnet 2005*).

$$w^*(\tau) = \frac{Ab}{(\tau/\tau_p)^n} \exp(m(\tau/\tau_p)) \quad (\text{III.2})$$

Les résultats relatifs à la géométrie des double-décrochements pour les dislocations des deux caractères dans $\{110\}$ et $\{100\}$ sont présentés *Tab. III.4*. Les valeurs $n \sim 0,5$ sont en accord avec *Seeger & Schiller 1962* qui prévoit que $w^*(\tau) \propto 1/\sqrt{\tau}$ à basse contrainte. On remarque que $w_c \sim 2A$, ce qui est justifié, dans le régime intermédiaire de contraintes, pour des valeurs de m comprises entre 0,6 et 0,8.

	{110}				{100}			
	$w_c(b)$	A	n	m	$w_c(b)$	A	n	m
Vis	110	54,80	0,51	0,69	20	9,71	0,50	0,83
Coins	150	77,60	0,50	0,66	70	32,30	0,50	0,77

Tab. III.4 Largeur des doubles décrochements. La largeur critique w_c est caractéristique du régime intermédiaire de contrainte. A, n et m sont les paramètres libres de l'équation (III.2).

Le volume d'activation d'un double-décrochements $V^*(\tau)$ est défini par la dérivée de l'enthalpie d'activation (équation (III.3a)). Il peut donc être calculé à partir de la méthode IE. Les volumes d'activation du mécanisme de double-décrochements pour les dislocations vis dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ sont représentés *Fig. III.6*. À basse contrainte, on remarque que les valeurs déduites de l'expression (III.3a) convergent vers le produit de la surface balayée lors de la nucléation de la paire de kinks par b (équation III.3b).

$$V^*(\tau) = pq \frac{\Delta H_0}{\tau_p} \left(\frac{\tau}{\tau_p} \right)^{p-1} \left(1 - \left(\frac{\tau}{\tau_p} \right)^p \right)^{q-1} \quad (\text{III.3a})$$

$$V^*(\tau) = h^*(\tau) w^*(\tau) b \quad (\text{III.3b})$$

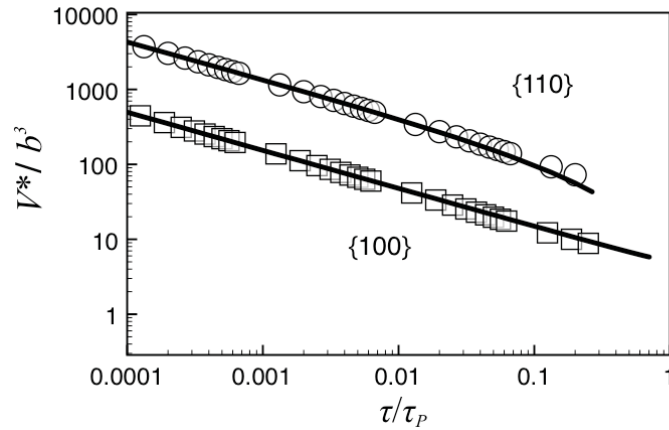


Fig. III.6 Volume d'activation du mécanisme de double-décrochement pour les dislocations vis. Les courbes en trait plein représentent le volume d'activation calculé à partir de l'équation (III.3a). Les symboles montrent le volume d'activation calculé en l'équation (III.3b). Les paramètres de calcul sont rappelés dans le tableau III.3.

Les volumes d'activation déduits des équations (III.3a) et (III.3b) sont en bon accord pour les dislocations vis. Le volume d'activation est plus important dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$. Pour un mécanisme de double-décrochements, V^* est généralement de l'ordre de la dizaine de b^3 (voir section I.2.6). Si les calculs semblent converger vers cet ordre de grandeur à forte contrainte, on remarque que plus la contrainte baisse et plus le volume d'activation augmente, dépassant largement les valeurs attendues. Cet accroissement est dû aux variations non linéaires de $w^*(\tau)$ à basse contrainte.

III.2.2 Sensibilité de la configuration critique aux paramètres de calculs

III.2.2.1 Influence du potentiel de Peierls V_p

Dans l'équation (II.4), le potentiel de Peierls intervient dans le terme ΔP . Notre approche multi-échelle ne permet pas de calculer le potentiel de Peierls dans MgO. Les calculs présentés dans la section précédente ont été réalisés à l'aide d'un potentiel qui dérive de celui de *Koizumi et al. 1993*, pour lequel nous avons introduit une sensibilité à la structure de cœur (voir section précédente). Ce potentiel est fonction du paramètre α_i qui permet de passer d'un potentiel purement sinusoïdal ($\alpha_i=0$) à une forme plus abrupte ($\alpha_i=0,5$). La forme de ce potentiel est rappelée Fig. II.3. Afin de rendre compte de l'influence de la contrainte de Peierls sur la forme du potentiel dans nos calculs, le coefficient α_i est paramétré par la densité de vecteur de Burgers dans le plan i (équation (III.1)).

Il existe d'autres potentiels dans la littérature (voir *Seeger 1982* et *Caillard & Martin 2003* pour une revue des différents potentiels). J'ai testé l'influence de la forme et de l'amplitude du potentiel V_p sur l'énergie et la géométrie des double-décrochements. Les potentiels testés sont les suivants :

- Le potentiel de *Koizumi et al. 1993*

$$V_p(x) = \frac{C(\alpha_i)}{2\pi} a' b \tau_p g(x, \alpha_i) \quad (\text{III.4})$$

Où C et $g(x)$ sont rappelés équation (II.10). Le potentiel a été testé pour différentes valeurs de α_i .

- Le potentiel d'*Eshelby 1962*

$$V_p(x) = 3^{3/2} a' b \tau_p \left(\frac{x}{a'} \right)^2 \left(1 - \frac{x}{a'} \right)^2 \quad (\text{III.5})$$

- Le potentiel anti-parabolique

$$V_p(x) = a' b \tau_p \left(\frac{x}{a'} \right) \left(1 - \frac{x}{a'} \right) \quad (\text{III.6})$$

Le potentiel d'Eshelby et le potentiel anti-parabolique ne sont pas périodiques. Il est nécessaire de prendre leurs valeurs sur un intervalle $[0:a]$ et de les répéter périodiquement. Les potentiels sont représentés graphiquement *Fig. III.7*. Ils ont été calculés pour une dislocation générique définie par les paramètres *Tab. III.5*. Les potentiels testés ne varient pas sous contrainte.

a' (Å)	b (Å)	μ (GPa)	ν	τ_P (μ)	ξ_i (a')	r_c ($\%b$)
2,5	4	100	0,3	10^{-2}	0,8	2,5

Tab. III.5 Paramètres clés de la dislocation "générique" utilisée pour tester la sensibilité du calcul de double-décrochements au potentiel de Peierls.

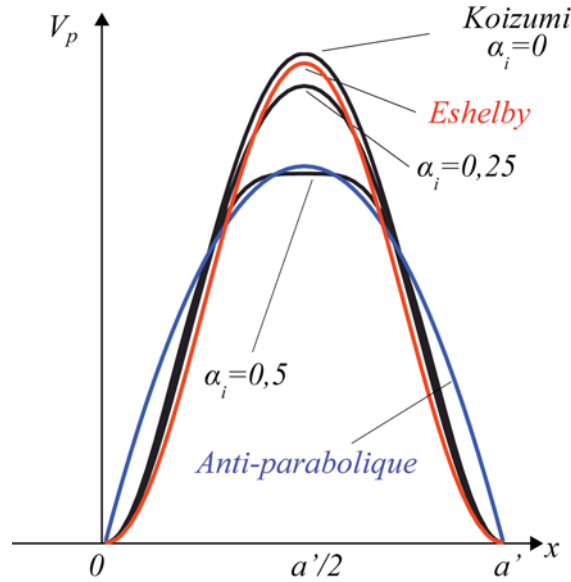


Fig. III.7 Potentiels de Peierls. Nous avons testé plusieurs types de potentiels de Peierls sur la géométrie et l'énergie de nucléation d'un double-décrochements. Les potentiels testés sont : le potentiel de Koizumi, le potentiel d'Eshelby et un potentiel anti-parabolique.

Si pour la plupart de ces potentiels, la pente maximale (soit à b près, la contrainte de Peierls, voir section II.2.1) est définie pour une valeur non nulle de x , ce n'est pas le cas pour le potentiel anti-parabolique, dont la dérivée est définie par l'équation (III.7). On remarque que la dérivée du potentiel anti-parabolique est maximale en $x=0$, ce qui signifie qu'une contrainte effective $\tau < \tau_P$ ne permet pas de faire avancer la dislocation de x_0 dans la vallée du potentiel : x_0 est toujours égale à 0 dans le cas du potentiel anti-parabolique (voir Fig. II.2 pour la définition de x_0).

$$V'_p(x) = b\tau_P \left(1 - \frac{x}{a'}\right) - \frac{b\tau_P x}{a'} \quad (\text{III.7})$$

Les variations de α_i , pour le potentiel de Koizumi, mènent à une légère évolution du potentiel en amplitude. Le potentiel d'Eshelby est assez proche du potentiel sinusoïdal que l'on retrouve à l'aide du potentiel de Koizumi pour $\alpha_i=0$.

Le potentiel de Koizumi (quelle que soit la valeur de α) et le potentiel d'Eshelby engendrent des variations d'enthalpie d'activation très comparables (Fig. III.8). La variation d'amplitude induite par une variation de α entre 0 et 0,5 n'a pas d'incidence sur l'énergie d'activation et le potentiel d'Eshelby a une forme assez proche pour ne pas induire de variation significative. Les paramètres p et q sont respectivement de $\sim 0,5$ et ~ 1 pour les quatre potentiels, alors que $\Delta H_0/\mu b^3=0,215$. Les résultats concernant le potentiel anti-parabolique sont différents. L'enthalpie d'activation varie presque linéairement avant $0,5\tau_P$. Ce profil est dû aux fortes valeurs de p et q qui sont respectivement de 1 et 1,6. Au-delà de $0,5\tau_P$, la décroissance en contrainte est moins rapide. Les valeurs de ΔH_0 restent néanmoins les mêmes quel que soit le potentiel.

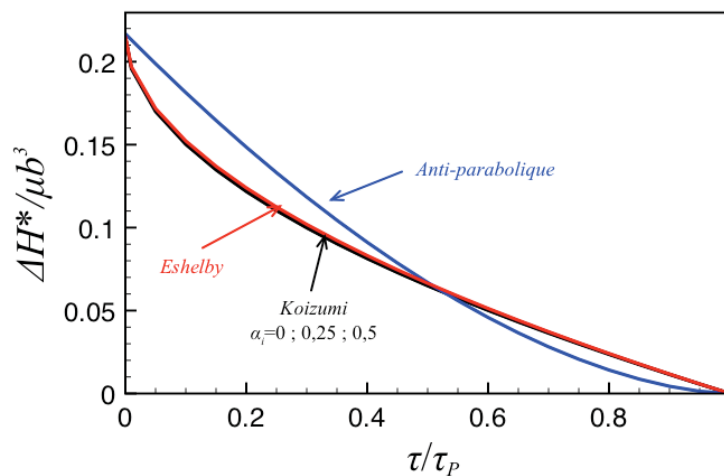


Fig. III.8 Influence du potentiel de Peierls sur l'énergie d'activation. Le potentiel d'Eshelby et le potentiel de Koizumi (pour les trois valeurs de α_i testées) donnent des résultats identiques. Les coefficients p et q du potentiel anti-parabolique diffèrent de ceux des quatre autres potentiels. Les valeurs de ΔH_0 restent rigoureusement les mêmes. Seuls les ajustements des calculs sur l'équation de Kocks sont représentés ici.

La différence de profil observée, pour le potentiel anti-parabolique, n'est pas due à la hauteur de la barrière (qui est moins importante que celle d'autres potentiels présentés Fig. III.7). On n'observe pas de différence sur le potentiel de Koizumi $\alpha_i=0,5$ qui dispose lui aussi d'une amplitude plus faible (du même ordre que celle du potentiel anti-parabolique, Fig. III.7). La contrainte $x_0=0$, imposée par le potentiel anti-parabolique, n'est pas non plus à remettre en

cause ; pour les autres potentiels, x_0 est très faible, et des calculs comparatifs ont été faits sur le potentiel de Koizumi en forçant $x_0=0$, ils ont mené à des variations d'énergie d'activation comparables, sans réel changement significatif. C'est donc la forme du potentiel anti-parabolique, qui est à l'origine d'une valeur plus élevée de l'énergie d'activation à basse contrainte.

Les variations de α_i ont peu d'influence sur l'évolution de la largeur des double-décrochements. Les paramètres A , n , m de l'équation (III.2) restent constants. On observe un facteur ~ 2 sur les valeurs de w_c entre les potentiels de Koizumi et d'Eshelby. Pour le potentiel anti-parabolique, si la variation de $w^*(\tau)$ est linéaire à basse contrainte (pas de proportionnalité en $1/\sqrt{\tau}$), les valeurs de w_c sont comparables à celles qui sont issues des calculs pour les deux autres potentiels.

III.2.2.2 Influence de la contrainte de Peierls

L'influence de la contrainte de Peierls τ_p a été testée à l'aide de la dislocation définie Tab. III.5. Le coefficient α_i du potentiel de Koizumi est fixé à 0,25. D'après l'équation (III.4), le potentiel de Peierls varie linéairement avec τ_p . Néanmoins, les équations (II.15) et (II.16) montrent que $2U_k$ (ou ΔH_0) ne dépend pas de la contrainte de Peierls dans le modèle IE. Initialement, dans le modèle TL de Seeger, $2U_k$ dépendait de la contrainte de Peierls. J'ai testé les valeurs de contrainte de Peierls suivantes : $[10^{-3}\mu ; 10^{-2}\mu ; 10^{-1}\mu ; 0,5\mu]$. Les résultats sont présentés Fig. III.9.

Tant que la contrainte de Peierls est réaliste (inférieure à $10^{-2}\mu$), l'énergie d'activation ne varie pas (ΔH_0 , p et q sont constants). Le calcul prévoit une énergie trop importante lorsque la contrainte de Peierls est trop grande (au-dessus de $10^{-1}\mu$). Ce dernier résultat n'est pas en accord avec les équations (II.15) et (II.16). La largeur palier des double-décrochements w_c varie de manière inversement proportionnelle à la contrainte de Peierls. On en déduit que le paramètre ajustable A de l'équation (III.2) varie $\propto 1/2\tau_p$.

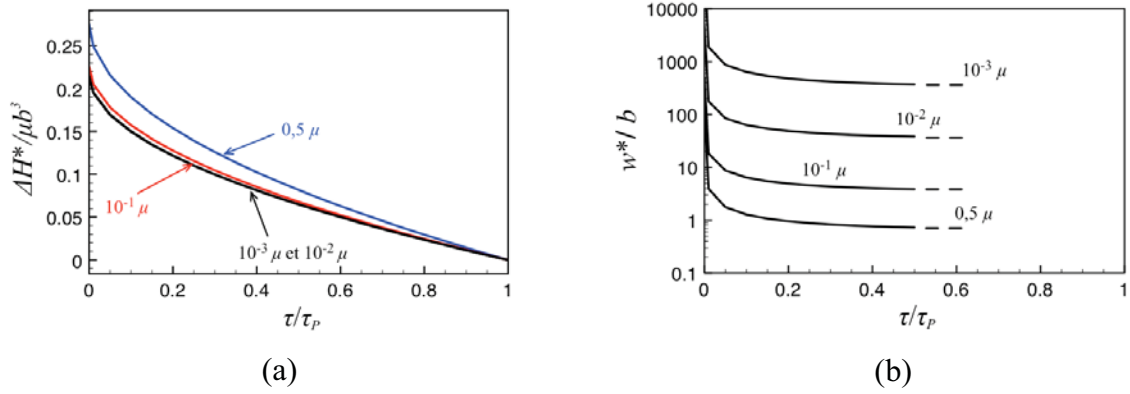


Fig. III.9 Configuration critique des double-décrochements en fonction de la contrainte de Peierls. (a) Les valeurs d'énergie d'activation sont comparables pour $10^3 \mu < \tau_p < 10^1 \mu$. (b) La largeur des double-décrochements est d'autant plus faible que la contrainte de Peierls est forte.

III.2.2.3 Influence du rayon de coupure r_c

Le rayon de coupure r_c intervient dans l'expression de ΔE (équation (II.4)). Ce paramètre, difficile à déterminer, est souvent choisi de façon empirique comme une fraction de b . r_c définit la limite à partir de laquelle l'élasticité linéaire ne s'applique plus à la dislocation à cause de ses propriétés de cœur.

L'équation (II.15) montre que, pour une dislocation vis, $2U_k$ varie $\propto \ln(a'/r_c)$. On peut calculer l'incertitude relative sur $2U_k$ en fonction de celle sur r_c (III.8).

$$\frac{\Delta U_k}{U_k} = f(r_c) \frac{\Delta r_c}{r_c} \quad (III.8)$$

$$f(r_c) = [1 - \nu - \ln(a'/r_c)]^{-1}$$

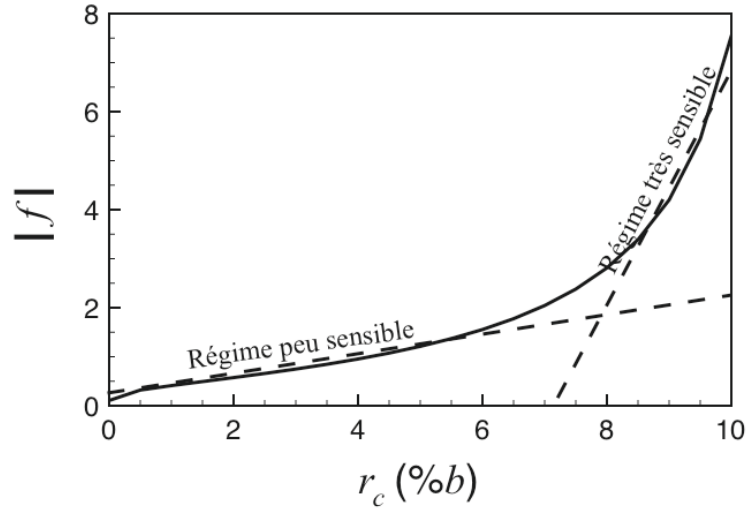


Fig. III.10 Influence du rayon de coupure r_c sur la fonction f . Pour une erreur relative commise sur r_c , l'erreur relative commise sur U_k est d'autant plus importante que r_c est grand. Deux régimes distincts sont observés.

La figure III.10 montre que, pour une incertitude relative donnée sur le rayon de coupure, l'incertitude relative sur U_k est d'autant plus grande que r_c est grand. Néanmoins, deux régimes se distinguent. Pour des valeurs de r_c usuelles (inférieures à 7-8% de b), l'incertitude relative sur U_k est relativement faible, alors qu'elle augmente considérablement au-delà. Pour une valeur de r_c de l'ordre de 5% du vecteur de Burgers (valeur prise dans Koizumi *et al.* 1993), l'erreur relative commise sur U_k est du même ordre que celle initialement commise sur le rayon de coupure.

r_c est donc un paramètre auquel l'énergie d'activation est d'autant plus sensible que sa valeur est grande. La question de garder r_c constant quelle que soit la dislocation s'est d'abord posée. Dans le cadre de cette hypothèse, le ΔH_0 d'une dislocation vis est indépendant du plan de glissement considéré, ce qui est faux. r_c doit donc rendre compte de la structure de cœur de la dislocation. Dans nos calculs, nous supposons que l'énergie d'activation d'un double-décrochements, dans un plan donné, est d'autant plus faible que la distribution de vecteur de Burgers ρ_i est importante. Nous avons donc défini le rayon de coupure $r_{c,i}$, dans un plan i , comme une fonction de l'étalement du cœur de la dislocation dans le plan i $\xi_{PN,i}^1$ (équation (III.1b)). L'étalement du cœur dépendant implicitement de la contrainte de Peierls (Peierls 1940 ; Seeger & Schiller 1962), c'est une façon de réintroduire dans ΔH_0 une dépendance à la

¹ Les valeurs de $\xi_{PN,i}$ sont déduites des structures de cœur calculées à partir du modèle de Peierls unidimensionnel (Carrez *et al.* 2009)

contrainte de Peierls. Cette approche est davantage en accord avec d'autres méthodes comme celle de *Seeger & Schiller 1962*.

III.3 Vitesse des dislocations et CRSS

III.3.1 Vitesse dans le régime thermiquement activé

Dans le chapitre I, nous avons vu que la vitesse des dislocations, dans MgO, est de l'ordre du $\mu\text{m/s}$ à température ambiante (*Singh & Coble 1974a*) alors qu'elle peut atteindre le m/s à 1000 K dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (*Sato & Sumino 1980*). Dans ces études, la variation de la vitesse en contrainte est décrite à l'aide de lois de puissance alors que la dépendance en température n'est pas exprimée de façon analytique.

Dans la section III.2.1, nous avons appliqué le modèle IE afin de calculer la configuration critique des double-décrochements. Cette approche nous a permis de définir les grandeurs $\Delta H^*(\tau)$, $w^*(\tau)$ et $h^*(\tau)$. Pour $T < T_a$, les deux premiers paramètres permettent de configurer une loi de mobilité thermiquement activée pour le glissement des dislocations présentée par l'équation (II.28). Cette loi de mobilité permet de décrire la vitesse de vol des dislocations en fonction de la contrainte et de la température. On appelle « vitesse de vol », la vitesse instantanée d'une dislocation entre deux obstacles, en opposition à la vitesse mesurée expérimentalement qui intègre les temps d'attente des dislocations sur les obstacles.

La vitesse a été calculée pour une longueur caractéristique de dislocation $L=1\mu\text{m}$ et $w^*(\tau)$ a été fixé à w_c . On remarque que les résultats présentés *Fig. III.11* sont en accord avec les valeurs de vitesse présentées dans *Singh & Coble 1974a*, étude qui a été menée sur des échantillons avec peu d'impuretés. Les variations de la vitesse en fonction de la température sont présentées *Fig. III.12*.

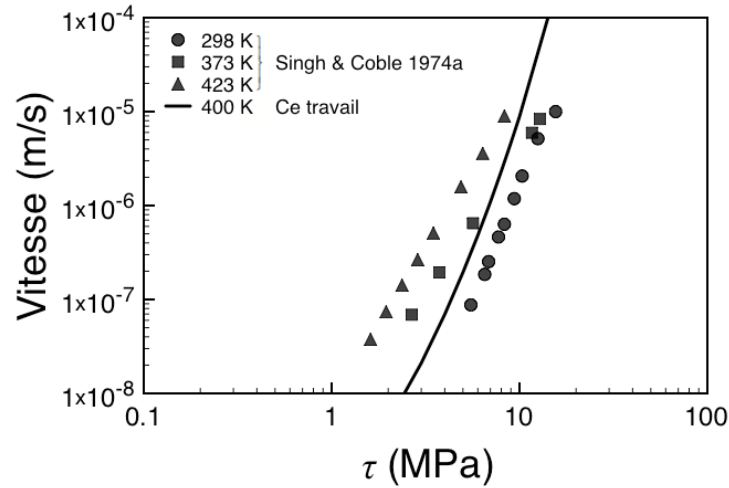


Fig. III.11 Evolution de la vitesse des dislocations vis dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (équation (II.28)). La température est de 400 K. La largeur des double-décrochements est fixée à w_c . Les symboles correspondent aux mesures présentées dans Singh & Coble 1974a.

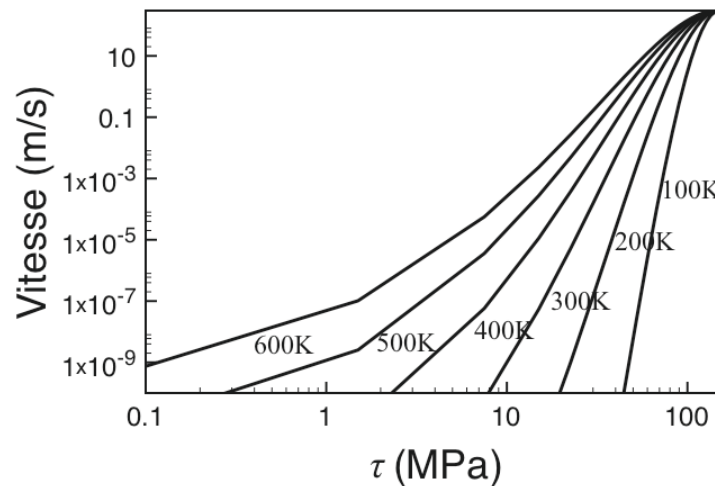


Fig. III.12 Influence de la température sur la vitesse des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. A contrainte fixée, la vitesse augmente avec la température. $w^*(\tau)$ a été ajusté à l'aide de l'équation (III.4) et des paramètres présentés Tab. III.4.

À contrainte constante, la vitesse des dislocations croît lorsque la température augmente. La figure III.12 montre que la pente $dv/d\tau$ n'est pas une constante de la température ou de la contrainte (nous reviendrons sur cette propriété au cours du chapitre VI).

Proche de la température de transition athermique expérimentale ($T_a \sim 600$ K), pour une contrainte comprise entre 20 et 30 MPa, la vitesse varie entre $2 \cdot 10^{-2}$ et $3 \cdot 10^{-1}$ m/s ce qui est un peu plus élevé que les mesures de Sato & Sumino (1980). Dans cette étude, les auteurs ont mesuré des vitesses comprises entre $3 \cdot 10^{-3}$ et $7 \cdot 10^{-2}$ m/s pour des contraintes qui varient de 33

MPa à 38 MPa, à 573 K. Cependant, les échantillons utilisés dans *Sato & Sumino 1980* sont riches en impuretés, il est donc peu probable que les auteurs aient mesuré une vitesse de vol.

III.3.2 Contraintes critiques de cisaillements dans le régime thermiquement activé

Dans le régime thermiquement activé, l'écoulement plastique est gouverné par le glissement lent de longues portions vis. Lors du chargement, les dislocations non-vis commencent par se déplacer parallèlement au vecteur de Burgers à faible contrainte, en traînant des portions vis alors immobiles. Les dislocations non-vis finissent par être arrêtées par des obstacles (précipités, joins de grains) ou sortent du cristal.

Dans les matériaux à friction de réseau, au-dessous de T_a , les jonctions observées au MET sont de petite taille et peu résistantes (*Louchet et al. 1976, 1979 ; Obrtlík et al. 2005*). L'absence de stockage de densité de dislocations via des interactions locales fortes mène à ce que toutes les dislocations puissent être considérées comme mobiles (ce qui n'est pas le cas dans le régime athermique). La déformation obéit à l'équation d'Orowan (I.4), dans laquelle on remplace la densité mobile par la densité totale de dislocations (voir section I.2.5).

Les interactions locales étant négligeables à basse température, j'ai supposé qu'un essai de déformation dans le régime thermiquement activé pouvait être modélisé par un essai en glissement simple, sans forêt de dislocations². Parce que les dislocations coins n'influencent pas l'écoulement plastique, seul le glissement des dislocations vis a été modélisé. Le volume de la boîte de simulation est ajusté de telle sorte que $\rho=10^{12} \text{ m}^{-2}$ et que la longueur caractéristique $L=1\mu\text{m}$. Les dimensions de la boîte sont de $0,7\mu\text{m} \times 0,7\mu\text{m} \times 1,98\mu\text{m}$. Une ligne vis est introduite, suivant $\langle 110 \rangle$ dans un plan basal. L'évolution du module de cisaillement en température a été prise en compte. Elle est ajustée sur les données de *Srinivasan & Stoebe 1974* et *Karki et al. 2000* (Fig. I.6).

J'ai effectué une série de simulations en compression à vitesse de déformation imposée. La vitesse de déformation a été fixée à 10^{-4} s^{-1} en référence aux essais expérimentaux (*Copley & Pask 1965 ; Barthel 1984 ; Appel & Wielke 1985*). La loi de mobilité pour les dislocations vis est présentée par l'équation (II.28), ses paramètres figurent dans les tableaux III.2 et III.3. La

² Nous verrons au cours du chapitre IV, qu'il est nécessaire de prendre des précautions quant à cette hypothèse. Si le rôle des jonctions est moins important au dessous de T_a qu'il ne l'est à haute température, le champ de contrainte interne (induit par la densité de dislocation et donc par la forêt) peut avoir un effet sur la contrainte d'écoulement calculée avec *mM*.

largeur des double-décrochements est fixée à w_c pour les deux systèmes de glissement. Les valeurs de w_c sont rappelées *Tab. III.4*. Le facteur de proportionnalité K , entre la vitesse des dislocations vis et non-vis (voir section II.3.5), évolue linéairement de 10 000 à 1 entre 0 et 600 K pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ et entre 0 et 1200 K pour $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$.

Par le jeu des conditions aux limites, l'extrémité du dernier segment d'une ligne est superposée à l'origine du premier. La dislocation est alors dite « infinie », puisque même si elle dispose d'une longueur caractéristique L finie, elle reste droite sous l'effet de la contrainte appliquée (i.e. elle n'a pas de tension de ligne). Aucune rotation-homothétie n'est imposée au volume simulé (ce n'est pas nécessaire pour ce type d'essai). Les dislocations glissent, sous l'effet de la contrainte appliquée, dans $\{110\}$ ou dans $\{100\}$ en fonction de l'orientation de l'axe de sollicitation. L'évolution des contraintes d'écoulement en fonction de la température pour les deux systèmes de glissement est présentée *Fig. III.13*.

Le calcul en Dynamique des Dislocations rend compte de l'activation thermique pour les deux systèmes de glissement de MgO. Le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ est actif pour des contraintes inférieures à celles du système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Sur la figure *III.13*, les flèches illustrent la fin du régime thermique, i.e. la température T_a à partir de laquelle la contrainte nécessaire pour déformer à la vitesse imposée est nulle. Rigoureusement, la température calculée ici est légèrement supérieure à la température de transition athermique puisqu'elle n'est pas définie au palier athermique τ_μ mais à $\tau_{app}=0$. Néanmoins, la différence entre les deux températures est faible et cette distinction ne sera pas faite ici. Les résultats présentés *Fig. III.13* montrent que $T_{a,\{110\}}=600$ K et $T_{a,\{100\}}=1200$ K.

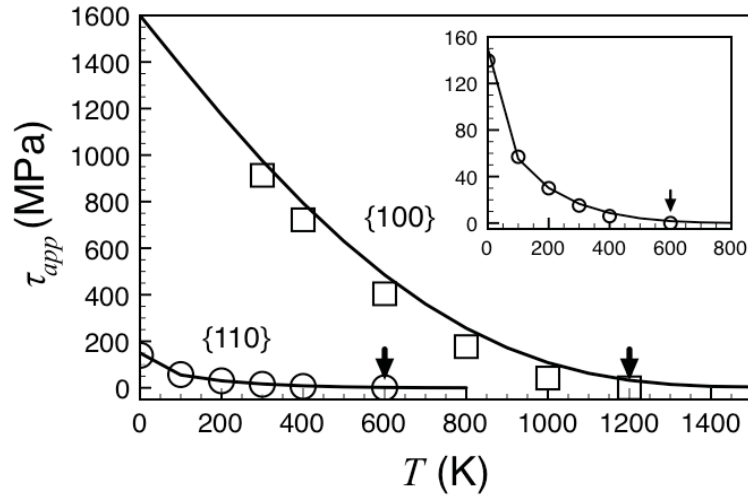


Fig. III.13 Contrainte d'écoulement dans le régime thermique. Les symboles représentent les valeurs de contrainte plateau déduites des courbes contrainte-déformation obtenues en DD. Les courbes en trait plein illustrent la résolution de l'équation (III.9). Les flèches pointent vers la température à partir de laquelle la contrainte est nulle dans le calcul de DD.

Dans le régime thermique, la déformation obéit à la loi d'Orowan (I.4). En inversant cette loi, on peut déterminer de manière analytique une contrainte effective, qui satisfait la vitesse de déformation imposée pour une densité de dislocation donnée³.

$$\tau_{eff} = \tau_p \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{a' v_D b L}{2 w^* (\tau_{eff})^2} \frac{\rho b}{2 \varepsilon} \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} \quad (III.9)$$

On remarque, via l'équation (III.9), que la contrainte effective est peu sensible à la densité de dislocations et à la vitesse de déformation dans le régime thermiquement activé, ces deux paramètres entrant dans un terme logarithmique.

Les solutions de l'équation (III.9) sont représentées Fig. III.13. Les résultats sont en bon accord avec ceux donnés par la Dynamique des Dislocations, les lois de mobilité des dislocations vis dans {110} et {100} ajustées pour mM sont donc correctement gérées par le code de DD.

³ Ce calcul est réalisé à partir de la forme en exponentielle de la loi de mobilité, équation (II.18).

III.3.3 Palier athermique

Dans un essai expérimental, on observe une température de transition T_a , à partir de laquelle la contrainte ne varie plus en température. Au-dessus de T_a , on définit le régime athermique et la contrainte seuil est appelée le palier athermique τ_μ . Dans ce régime, les dislocations sont courbées (*Clauer & Wilcox 1976*) et le glissement n'est plus caractérisé par le mécanisme de double-décrochements. La contrainte appliquée ne dépend plus de la vitesse des dislocations, elle est directement liée aux interactions locales entre dislocations (*Day & Stokes 1964 ; Copley & Pask 1965*). Pour modéliser le comportement collectif des dislocations dans le régime athermique, il est nécessaire de réaliser un autre type d'essai que celui présenté dans la section III.3.2.

Pour modéliser le palier athermique, j'ai réalisé des simulations de DD dites « en masse ». La microstructure initiale contient une densité de dislocations de 10^{12} m^{-2} , distribuée de façon uniforme entre les six systèmes de glissement d'une même famille, sous la forme de sources de Frank-Read de longueur $10 \mu\text{m}$. Les sources ont été choisies de taille relativement grande de manière à ne pas observer de pic de surmultiplication dû à la contrainte de Frank-Read. Les deux familles $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ sont traitées dans deux séries d'expériences indépendantes. Nous avons utilisé une loi de mobilité de type visqueuse, avec un coefficient $B=5.10^{-5} \text{ Pa.s}^{-1}$ (voir section II.3.5), appliquée à l'ensemble des caractères de dislocation. La géométrie du volume simulé est optimisée en suivant la méthode exposée section II.3.6 afin d'éviter les artéfacts de simulations (auto-annihilations, interactions dipolaires). Les courbes contrainte-cisaillement plastique sont présentées *Fig. III.14*.

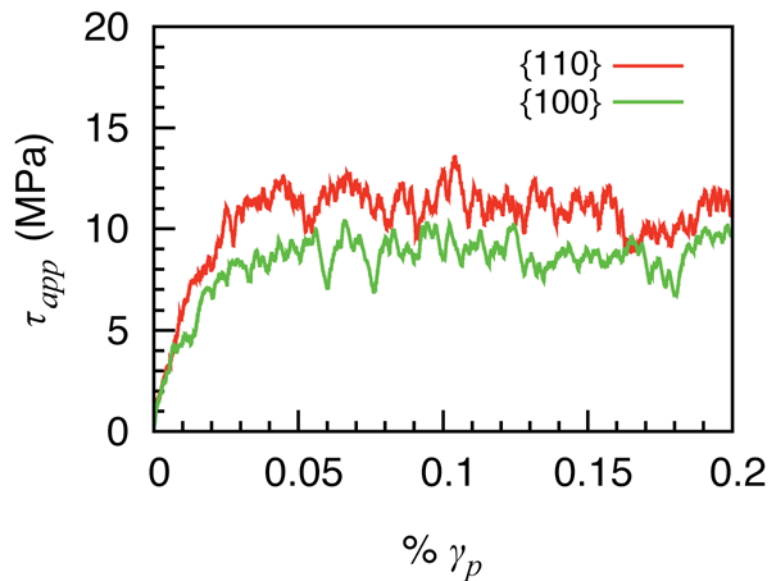


Fig. III.14 Evolution de la contrainte appliquée en fonction du cisaillement plastique. La vitesse de déformation est de 10 s^{-1} . Les températures sont de 1000 K et 2000 K respectivement pour $\{110\}$ et $\{100\}$. τ_μ est de l'ordre de 10 MPa pour les deux systèmes de glissement.

Dans le régime athermique, on peut définir une vitesse de déformation de transition $\dot{\varepsilon}_c$ entre deux régimes. Pour des vitesses inférieures à $\dot{\varepsilon}_c$, la contrainte d'écoulement est constante par rapport à la vitesse de déformation, elle est gouvernée par les interactions entre dislocations, on parle de régime « statique » ou « quasi-statique » (Kubin *et al.* 1998). C'est le cas des essais mécaniques réalisés en laboratoire à des vitesses de déformation de l'ordre de 10^{-4} s^{-1} . Au-dessus de la vitesse de transition, on parle de régime dynamique pour lequel la contrainte est à nouveau fonction de la vitesse de déformation. Dans le régime « dynamique », toutes les dislocations sont mobiles ; contrainte et vitesse de déformation sont à nouveau liées par la loi d'Orowan.

À haute température, il n'est donc pas nécessaire de réaliser des calculs aux vitesses de déformation du laboratoire afin d'avoir des résultats représentatifs. La vitesse de déformation peut être augmentée, sans changer les mécanismes de déformation, afin de diminuer le temps de calcul. Cette propriété est uniquement valable sous réserve de rester dans le régime quasi-statique.

Afin de vérifier que la contrainte d'écoulement est bien gouvernée par la force de la forêt, nous avons refait les deux calculs présentés Fig. III.14 à trois vitesses de déformation différentes : 1 s^{-1} , 10 s^{-1} et 100 s^{-1} . Les courbes contrainte-cisaillement plastique présentées Fig. III.15a sont identiques pour les deux vitesses de déformation les plus faibles. Le calcul à 100 s^{-1} de vitesse de déformation présente des valeurs de contrainte légèrement supérieures.

La figure III.15b montre que dans les trois cas, la vitesse de déformation imposée est atteinte. L'ajustement linéaire des courbes de déformation en fonction du temps a été calculé. Il présente des pentes de $0,98 \text{ s}^{-1}$; $9,96 \text{ s}^{-1}$ et $99,40 \text{ s}^{-1}$ respectivement pour les trois essais. Dans cette étude, la déformation s'effectue donc dans le régime quasi-statique pour des vitesses de déformation inférieure à 100 s^{-1} . Ces valeurs sont similaires à celles qui sont présentées dans *Devincre & Kubin 1997* ; *Madec 2001* et *Queyreau 2008* pour des paramètres de loi de mobilité comparables.

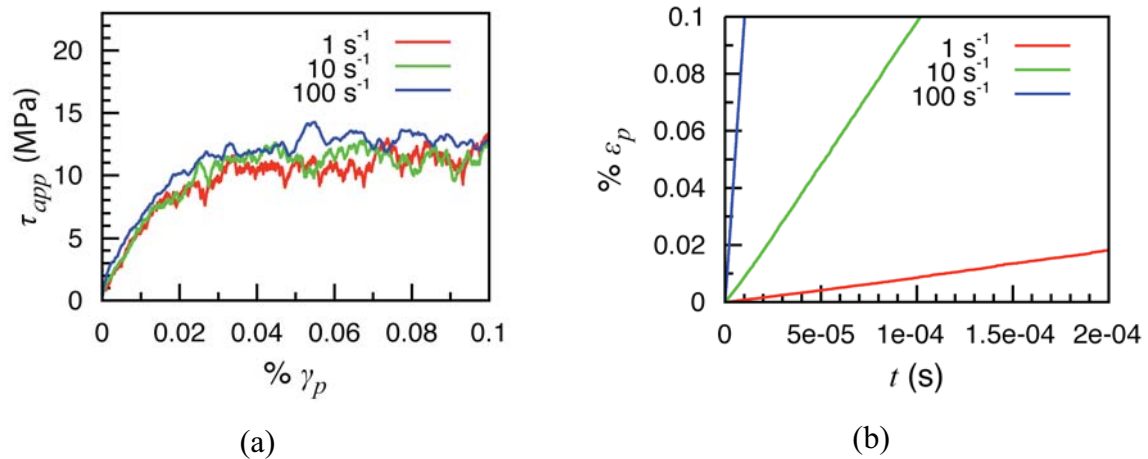


Fig. III.15 Influence de la vitesse de déformation. (a) Courbes contrainte en fonction du cisaillement plastique. Les valeurs de contraintes à 100 s^{-1} de vitesse de déformation montrent la limite du régime quasi-statique. (b) Courbes de déformation en fonction du temps. Le régime de vitesse de déformation imposée est atteint dans les trois essais.

III.4 Discussion

Depuis les années 60, de nombreuses expériences de déformation ont été menées sur MgO monocristallin (voir chapitre I). Ces expériences fournissent des données auxquelles les résultats de notre MME peuvent être confrontés.

III.4.1 De la structure de cœur à la mobilité des dislocations

Les contraintes de Peierls, calculées par *Ph. Carrez*, à l'aide de la méthode PNG, sont en accord avec les données expérimentales (*Barthel 1984* ; *Appel & Wielke 1985*). En comparaison aux calculs présentés dans *Carrez et al. 2009*, la prise en compte de la tridimensionnalité des structures de cœur des dislocations vis, via la méthode PNG, fournit

des résultats plus réalistes (40 MPa avec la méthode PN-1D dans *Carrez et al. 2009*, 150 MPa avec la méthode PNG dans *Amodeo et al. 2011a* pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$). Ces résultats ne sont pas en accord avec les calculs réalisés en PN-1D, présentés dans *Miranda & Scandolo 2005*.

Le régime thermiquement activé peut être décrit par la théorie des double-décrochements. La méthode IE (*Koizumi et al. 1993*) est une des techniques qui permet de définir l'énergie et la géométrie des kinks à basse contrainte.

Dans le modèle IE, l'énergie ΔH_0 d'un double-décrochements à contrainte nulle est égale au double de l'énergie U_k d'un décrochement isolé (voir section II.2.2). Les valeurs de ΔH_0 peuvent être comparées aux valeurs U_k calculées à partir du modèle de tension de ligne. D'après *Dorn & Rajnak (1964)*, l'énergie d'un décrochement isolé U_k , formé au travers d'un potentiel de Peierls sinusoïdal, est définie par l'équation (III.10).

$$U_k = \frac{2^{3/2}}{\pi} a' \sqrt{E_0 \frac{a' b \tau_p}{\pi}} \quad (\text{III.10})$$

Si on ne connaît pas l'énergie E_0 d'une dislocation droite dans sa vallée de Peierls, on peut supposer qu'elle est en grande partie élastique. Elle ne dépend donc pas du plan de glissement considéré pour une dislocation vis. On peut alors calculer le rapport des valeurs de U_k , dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$, qui ne dépend plus de E_0 , équation (III.11).

$$\frac{U_k^{\{100\}}}{U_k^{\{110\}}} \approx \left(\frac{b}{a}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{\tau_p^{\{100\}}}{\tau_p^{\{110\}}}} \quad (\text{III.11})$$

On trouve, pour les dislocations vis, des rapports de 1,94 et 2,17 respectivement pour la méthode TL et notre calcul. Ces résultats sont en bon accord. Dans le modèle de TL, U_k ne dépend pas du rayon de coupure (équation (III.10)) contrairement au modèle IE (équations (II.15) et (II.16)). La compatibilité des résultats issus de ces deux approches nous permet donc, entre autres, de conforter notre choix des rayons de coupure r_c .

L'extrapolation des valeurs de $\Delta H^*(\tau)$ aux contraintes intermédiaires, à l'aide du formalisme de Kocks, permet d'évaluer des volumes d'activation de l'ordre de quelques dizaines de b^3 . On retrouve l'ordre de grandeur généralement attribué à ce mécanisme (*Ewans & Rawlings 1969* ;

Messerschmidt 2010) et les résultats sont en accord avec les valeurs mesurées par Singh & Coble 1974a à température ambiante. Néanmoins, on remarque que peu d'études expérimentales font référence à la nucléation de double-décrochements plus larges à faible contrainte, pourtant prévue par les modèles théoriques (Seeger & Schiller 1962 ; Dorn & Rajnak 1964 ; Koizumi et al. 1993). L'évolution non linéaire de $w^*(\tau)$ à basse contrainte (voir Fig. III.5 et équation (III.2)) conduit à un volume d'activation plus important. L'étude Singh & Coble 1974a présente des mesures de volume d'activation à des contraintes avoisinant le MPa (Fig. I.14). Les auteurs attribuent l'augmentation du volume d'activation à basse contrainte à un mécanisme d'épinglage par les impuretés (bien que leurs échantillons soient très purs), mécanisme qui n'est plus dominant au-delà de 5 MPa. L'hypothèse de larges double-décrochements à faible contrainte n'est pas abordée. Les calculs de volume d'activation présentés section III.2.1 sont toutefois en accord avec les mesures de Singh & Coble 1974a. (Fig. III.16).

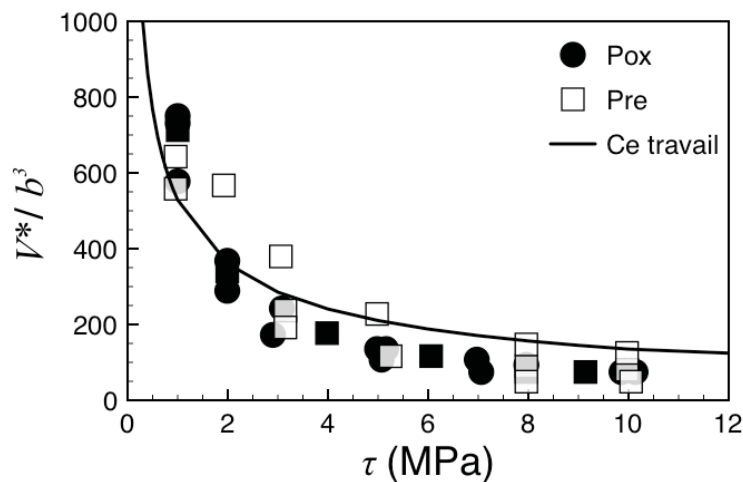


Fig. III.16 Evolution du volume d'activation à basse contrainte. Les symboles représentent les mesures expérimentales présentées dans Singh & Coble 1974a pour les dislocations vis dans le plan $\{110\}$. Les échantillons « Pre » ont subi un traitement thermique supplémentaire afin de réduire le degré d'oxydation des impuretés. Pas les échantillons « Pox » (voir section I.2.6). La température est comprise entre 300 K et 450 K. La courbe en trait plein représente l'ajustement, pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, des calculs de $V^*(\tau)$ réalisés à partir de l'équation (III.3a).

La loi de mobilité de type double-décrochements implémentée dans le code *microMegas* est très proche de celle décrite par l'équation (II.28). Seul $w^*(\tau)$ est remplacée par une largeur critique constante w_c . Les paramètres utilisés pour ajuster les lois de mobilité

des dislocations vis dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ sont présentés *Tab. III.2* et *Tab. III.3*. Les valeurs de w_c sont rappelées *Tab. III.4*.

La prise en compte des variations en contrainte de $w^*(\tau)$ entraîne des vitesses plus faibles uniquement aux basses contraintes (*Fig. III.17*). Lorsque les variations de $w^*(\tau)$ sont prises en compte, le formalisme en exponentiel (équation (II.18)) et la forme en sinus hyperbolique (équation (II.28)) convergent vers les mêmes valeurs sur l'ensemble de la gamme de contrainte, excepté à très basses contraintes où la forme (II.18) donne des vitesses du même ordre de grandeur mais plus importantes. Ces deux propriétés expliquent pourquoi les calculs de DD (pour lesquels $w^*(\tau)=w_c$ dans la forme en sinus hyperbolique) et l'approche analytique de la résolution de l'équation d'Orowan (pour laquelle on tient compte de $w^*(\tau)$ dans la forme en exponentielle de la loi de vitesse) fournissent des valeurs de CRSS comparables sur une large gamme de contrainte (section III.3.2). Enfin, la différence entre les formalismes en exponentielle et en sinus hyperbolique s'accroît lorsqu'on augmente la température, avec un rapport constant entre les vitesses, de quatre ordres de grandeurs, à 0,1 MPa.

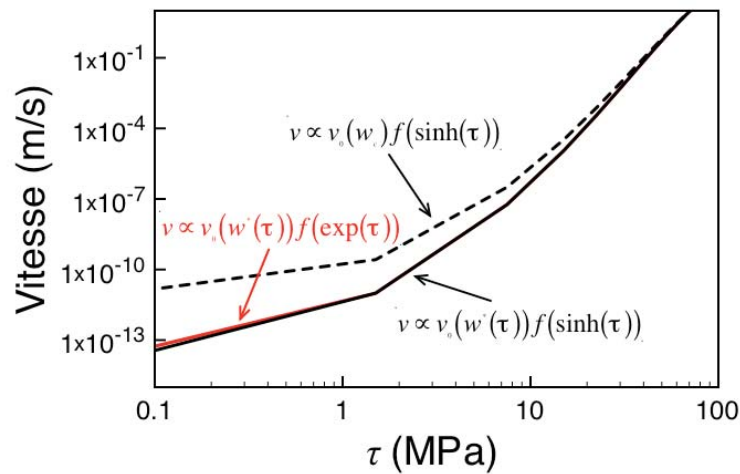


Fig. III.17 Influence de la largeur des double-décrochements sur la mobilité de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. La température est fixée à 400 K. Les variations de $w^(\tau)$ (équation (III.2)) sont significatives pour des contraintes inférieures à 15% de la contrainte de Peierls. On remarque que, pour $w^*(\tau)$ variable, la forme exponentielle (équation (II.18)) et la forme en sinus hyperbolique (équation (II.28)) donnent des vitesses identiques.*

Les calculs de vitesse, pour les dislocations vis dans les plans $\{110\}$, sont en accord avec les mesures présentées dans *Singh & Coble 1974a* (*Fig. III.11*). Dans cette étude, la concentration en impuretés est très faible (6 ppm de Fe^{3+} dans les échantillons « Pre ») et la

vitesse des dislocations peut donc s'apparenter à une vitesse de vol. Les mesures de vitesse référencées dans des échantillons moins purs (*Sato & Sumino 1980*) concordent moins avec nos calculs ; elles sont toujours inférieures. En effet, notre calcul ne tient pas compte de l'épinglement des dislocations par les impuretés qui réduit la vitesse du glissement dans un régime intermédiaire de température.

III.4.2 CRSS, impuretés et lois de mélange

L'effet des impuretés sur les CRSS de MgO monocristallin a été abordé en détail dans la littérature (*Gorum et al. 1960 ; Srinivasan & Stoebe 1970 ; Messerschmidt et al. 1985*). Les espèces chimiques les plus souvent identifiées sont le fer, l'aluminium, le calcium et le silicium.

Dans un régime de température intermédiaire, elles réduisent la mobilité des dislocations en les épinglant, augmentant la valeur des CRSS. A plus basse température, les fortes contraintes induites par la friction de réseau écrantent l'effet des impuretés (*Appel & Wielke 1985*). Enfin, à haute température (au dessus de T_a , *Fig. III.18a*), la concentration en impuretés n'influence plus les valeurs de CRSS (*Copley & Pask 1965*).

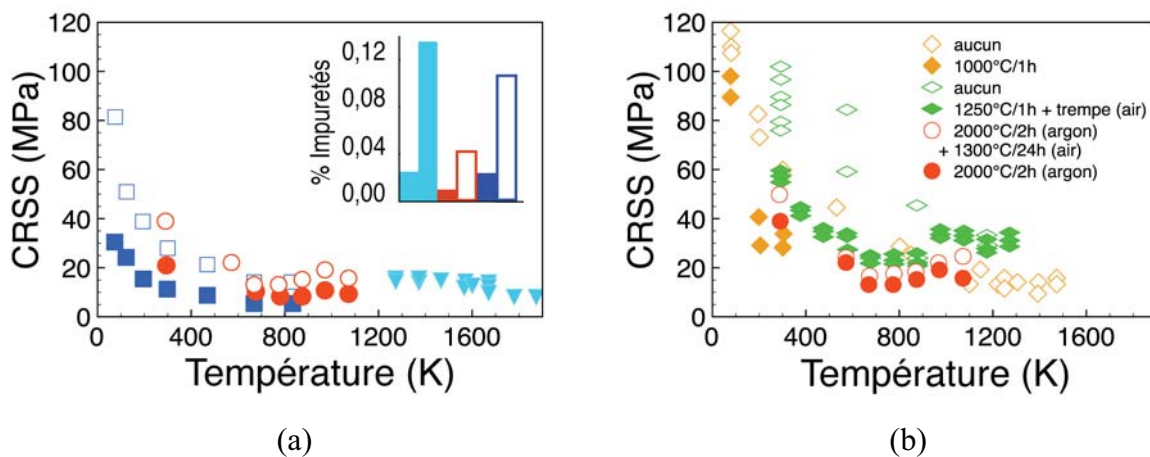


Fig. III.18 Influence des impuretés et du traitement thermique sur les CRSS dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. (a) Bleu : Srinivasan & Stoebe 1974, Rouge : Sato & Sumino 1980, Bleu ciel : Copley & Pask 1965. Les concentrations présentées dans l'encadré font référence aux impuretés en fer, aluminium, calcium et silicium. (b) Orange : Hulse & Pask 1960, Vert : May & Kronberg 1960, Rouge : Sato & Sumino 1980. Les traitements thermiques sont fournis en légende. L'atmosphère dans laquelle est effectué le traitement thermique est précisée entre parenthèses.

Les impuretés sont présentes sous forme d'ions divalents ou trivalents. L'atmosphère, oxydante ou réductrice, des traitements thermiques fixe le rapport redox. Les traitements thermiques réalisés en atmosphère oxydante (dans l'air par exemple) entraînent des mesures de CRSS plus importantes que ceux qui sont réalisés en atmosphère réductrice (*Sato & Sumino 1980*). Ils favorisent la présence d'ions trivalents qui interagissent plus fortement avec les dislocations. Néanmoins, ces études présentent des CRSS plus faibles que celles réalisées sans traitement thermique (*Fig. III.18b*). Température de chauffe et vitesse de trempe influencent la distribution spatiale de ces impuretés (homogénéisation, précipitation, migration sur les dislocations) et donc leur effet sur la mobilité des dislocations (*Gorum et al. 1960*). La vitesse de déformation imposée, le type de traitement thermique et la concentration en impuretés des études présentées dans les chapitres I et III sont présentés *Tab. III.6*.

Référence	Label	Vitesse de déformation (s ⁻¹)	Traitement thermique	Impuretés
<i>Hulse & Pask 1960</i>	A	4,4 10 ⁻⁴	Aucun	5600 (1200) ⁴
	B	4,4 10 ⁻⁴	1000 °C/1h	5600 (1200)
<i>Copley & Pask 1965</i>	A	4,4 10 ⁻⁴	ND	290
	B	4,4 10 ⁻⁴	ND	1390
<i>Sinha et al. 1973</i>		1,3 10 ⁻⁵	1250 °C/24h (argon)	239-244
<i>Sato & Sumino 1980</i>	A	4,1 10 ⁻⁴	2000 °C/24h (argon)	140
	B	4,1 10 ⁻⁴	2000 °C/24h (argon)	560
	C	4,1 10 ⁻⁴	2000 °C/24h (argon) + 1300 °C/24h (air)	560
<i>Barthel 1984</i>		1 10 ⁻⁴	ND	100
<i>Appel & Wielke 1985</i>		4,2 10 ⁻⁴	ND	~100
<i>Srinivasan & Stoebe 1974</i>	A	10 ⁻⁴ – 10 ⁻²	2000 °C/2h (argon)	240
	B	10 ⁻⁴ – 10 ⁻²	2000 °C/2h (argon)	1050
<i>May & Kronberg 1960</i>	A	Relative (inch/min)	Aucun	500
	B	Relative (inch/min)	1250 °C/1h (air) + trempe (air)	500

Tab. III.6 Les conditions expérimentales. Les labels (A, B et C) permettent de différencier les conditions de vitesse de déformation, le traitement thermique ou la concentration en impuretés, au sein d'une même étude. Les mesures de CRSS sont peu sensibles à la vitesse de déformation, mais dépendent de la concentration en impuretés (donnée en ppm) et du traitement thermique appliqué à l'échantillon.

Une comparaison directe entre nos résultats et les mesures expérimentales dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ n'est donc possible que si les effets liés aux impuretés sont minimisés

⁴ Dans *Hulse & Pask 1960*, les échantillons contiennent respectivement 500, 400, 200 et 100 ppm d'aluminium, de silicium, de fer et de calcium. Ces espèces chimiques sont présentées comme les éléments les plus abondants. Cependant, les auteurs précisent que les échantillons contiennent 5600 ppm d'impuretés...

(concentration faible ou traitement thermique). Nous pouvons comparer nos calculs aux CRSS expérimentales à l'aide d'une loi de mélange qui prend en compte la contrainte appliquée dans le régime thermiquement activé (présentée *Fig. III.13*) et le palier athermique τ_μ (*Fig. III.14*). Cette loi de mélange est définie par l'équation (III.12). Au-dessus de T_a , la CRSS est gouvernée par les interactions entre dislocations. Elle est définie par le palier athermique τ_μ . Pour les températures inférieures à T_a , les CRSS sont contrôlées par la vitesse des dislocations et obéissent à la loi d'Orowan, ce qui est en accord avec les résultats de simulation présentés section III.3.2. Les interactions locales entre dislocations étant moins fortes dans le régime athermique, τ_μ décroît linéairement si $T < T_a$ pour la loi de mélange utilisée dans notre étude (nous reviendrons sur cette propriété au cours du chapitre IV).

$$\begin{cases} CRSS = \tau_p \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{a' v_D b L}{2 w^{*2}} \frac{\rho b}{2 \varepsilon} \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} + \frac{T}{T_a} \tau_\mu, & \text{si } T < T_a \\ CRSS = \tau_\mu, & \text{si } T > T_a \end{cases} \quad (III.12)$$

La figure *III.19* montre que nos calculs, dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, sont en accord avec les mesures expérimentales issues d'échantillons pauvres en impuretés et/ou ayant subi les traitements athermiques adéquats (voir les conditions expérimentales *Tab. III.6*). Néanmoins, les mesures de *Srinivasan & Stoebe 1974* et *Barthel 1984* présentent encore des CRSS inférieures à nos calculs. Ces résultats confirment que, dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, la friction de réseau diminue très rapidement avec la température.

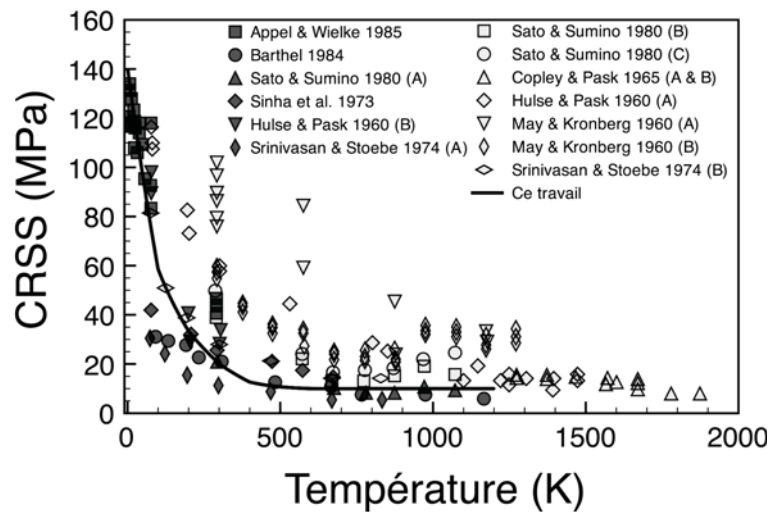


Fig. III.19 CRSS dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Les symboles foncés correspondent aux données expérimentales avec les plus faibles concentrations en impuretés et/ou ayant subi des traitements thermiques réducteurs. Les symboles plus clairs représentent les données pour lesquelles le traitement thermique n'a pas été efficace et/ou des échantillons trop concentrés en impuretés. Les labels (A, B et C) font référence aux conditions expérimentales présentées Tab. III.6. Nos résultats (trait plein) sont en accord avec les données expérimentales correspondant aux plus faibles concentrations en impuretés et/ou ayant subi des traitements thermiques réducteurs. Voir Tab. III.6 pour un descriptif des conditions expérimentales.

La variation des CRSS en fonction de la température, dans MgO et plus généralement dans les cristaux ioniques (voir la compilation récente *Takeuchi et al. 2009*), peut être décrite par trois régimes distincts. Un premier régime basse température-forte contrainte où le glissement des dislocations est gouverné par la friction de réseau. Un régime intermédiaire où le glissement est contrôlé par la friction et/ou par les impuretés et enfin, un régime de haute température-faible contrainte où la CRSS est déduite du comportement collectif des dislocations. Les CRSS résultent donc de trois contributions : une contrainte de friction du réseau τ_{lf} , une contrainte liée aux impuretés τ_i et la contrainte athermique τ_μ fonction des interactions avec la forêt. Dans *Takeuchi et al. 2009*, les auteurs rappellent que le franchissement d'obstacles ponctuels est un mécanisme thermiquement activé (*Kocks et al. 1975 ; Appel et al. 1984*) et décrivent l'évolution de la contrainte τ_i comme une fonction linéaire de la température.

Il existe très peu de données relatives aux CRSS, pour la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, dans la littérature (*Hulse et al. 1963 ; Copley & Pask 1965 ; Barthel 1984*, voir Fig. I.8). Néanmoins, les trois régimes décrits précédemment sont identifiables. Ces mesures montrent que les données expérimentales présentent de l'activation thermique au-delà de la température

$T_a=1200$ K, calculée à partir de la loi de mobilité de type double-décrochements. Afin d'interpréter ce comportement, nous avons supposé que la décroissance linéaire des CRSS observée entre 1200 K et 2000 K était due aux interactions dislocations-impuretés. Afin de comparer nos résultats aux mesures expérimentales dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, nous avons utilisé la loi de mélange (III.13).

$$\begin{cases} CRSS = \tau_p \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{a' v_D b L \rho b}{2 w^{*2} 2 \varepsilon} \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} + 200 - \frac{T}{10} + \frac{T}{T_a} \tau_\mu, \text{ si } T < T_a \\ CRSS = 200 - \frac{T}{10} + \tau_\mu, \text{ si } T > T_a \end{cases} \quad (III.13)$$

Dans l'équation (III.13), le terme $200-T/10$ correspond à τ_i , calculée à partir d'un ajustement linéaire des mesures de CRSS présentées dans *Hulse et al. 1963* entre $T_a=1200$ K et 2000 K. En tenant compte de l'influence des impuretés par la méthode exposée dans *Takeuchi et al. 2009*, les résultats de notre MME sont en accord avec les CRSS expérimentales dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (*Fig. III.20*). Comme pour les mesures dans la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, ces résultats montrent que la concentration en impuretés gouverne le comportement des CRSS dans un régime de températures intermédiaires.

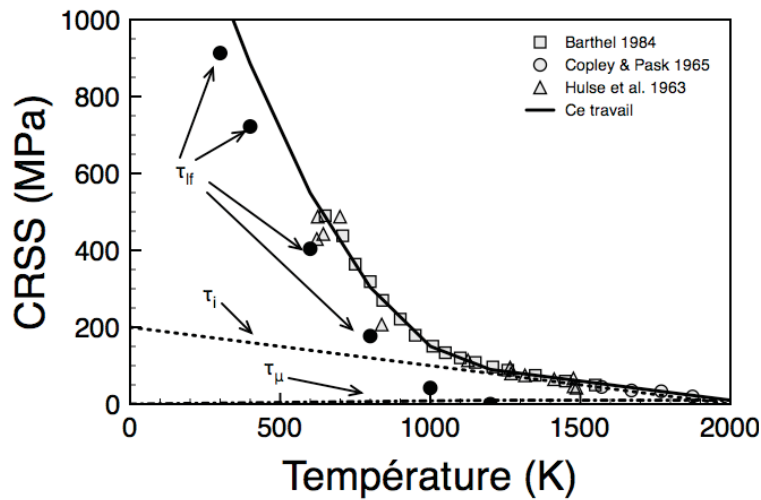


Fig. III.20 Evolution des CRSS en fonction de la température pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Le résultat final du calcul tient compte de la contrainte appliquée dans le régime thermiquement activé τ_{If} calculée en DD, de la contribution des impuretés τ_i et du palier athermique τ_μ .

Le but de ce premier chapitre de résultats était de tester la viabilité de notre approche multi-échelle via une comparaison directe aux données expérimentales. Cette approche s'appuie sur des calculs de structures de cœur de dislocations réalisés par *Ph. Carrez*, à partir de la méthode PNG, qui incorporent des γ -surfaces calculés *ab initio* dans les plans $\{110\}$, $\{100\}$ et $\{111\}$. Le modèle PGN permet d'évaluer les contraintes de Peierls qui ont été utilisées afin de modéliser le glissement des dislocations dans le régime thermiquement activé, pour les plans $\{110\}$ et $\{100\}$, via la méthode des interactions élastiques (méthode IE). La contrainte d'écoulement, lors d'un essai à vitesse de déformation imposée, obéit à la loi d'Orowan au-dessous de T_a . Dans le régime athermique, la contrainte palier τ_μ est mesurée à partir de calculs de Dynamique des Dislocations.

Notre MME repose sur plusieurs hypothèses :

- La précision des calculs de cœur (structures et contraintes de Peierls) obtenue par la méthode PNG.
- L'extrapolation de la méthode IE aux contraintes intermédiaires via le formalisme de Kocks.
- Au-dessous de T_a , les interactions locales entre dislocations peuvent être négligées dans la modélisation.
- Une densité de 10^{12} m^{-2} est caractéristique des essais expérimentaux.

La comparaison entre nos calculs et les mesures expérimentales permettent de vérifier indirectement ces hypothèses. Les contraintes de Peierls évaluées à partir du modèle PNG ainsi que la vitesse des dislocations dans le régime thermiquement activé sont en accord avec les données expérimentales (*Singh & Coble 1974a* ; *Barthel 1984* ; *Appel & Wielke 1985*).

L'influence des impuretés sur la mesure des CRSS requiert une attention particulière quant à la comparaison entre calculs et expériences. Dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, le manque de mesures expérimentales et les détails relatifs à la composition des échantillons montrent un effet très important de la concentration en impuretés et des traitements thermiques excepté au voisinage de 0 K, où la friction de réseau devient plus importante. À haute température (au-dessus de T_a), les dislocations ne sont plus épinglées par les impuretés et leur concentration semble avoir un rôle mineur. Le manque de mesures de contraintes dans les plans $\{100\}$ ne

permet pas une étude approfondie de l'influence des impuretés sur le glissement des dislocations dans ces plans. Néanmoins, la comparaison des données expérimentales aux résultats de notre approche montre que leur effet est important entre 1200 K et 2000 K.

Disposer d'un modèle qui ne dépend d'aucun paramètre expérimental est de première importance quant à l'étude de la déformation dans des conditions inaccessibles en laboratoire. (Fe,Mg)O étant l'une des phases les plus abondantes du manteau inférieur, il est nécessaire de comprendre l'influence de la pression sur ses propriétés plastiques. Cette étude fera l'objet du chapitre V, mais avant, au chapitre IV, nous allons étudier plus en profondeur les mécanismes liés aux microstructures de déformation et au durcissement par écrouissage.

CHAPITRE IV

MICROSTRUCTURE ET DURCISSEMENT : ANALYSE PAR DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS

La Dynamique des Dislocations est un outil qui permet de modéliser le comportement collectif des dislocations lors d'essais numériques. Dans la section III.3.3, nous avons présentés des calculs réalisés à l'aide de *microMegas*, qui ont permis d'évaluer la contrainte palier τ_μ dans le régime athermique. Au cours de cette quatrième partie, nous allons entre autres revenir sur ces simulations afin d'étudier des propriétés liées à la microstructure et aux interactions entre dislocations dans MgO. Ce chapitre sera aussi l'occasion de détailler certaines analogies entre MgO et le fer- α , un autre matériau à friction de réseau auquel nous nous sommes intéressés.

La première section sera consacrée aux interactions entre dislocations dans MgO. Nous ferons quelques rappels sur les interactions locales et notamment sur les conditions de formation des jonctions. Des cartographies d'interactions seront présentées. Dans une deuxième partie, nous développerons certaines spécificités de la déformation de MgO dans le régime athermique. Nous prendrons comme point de départ les deux simulations présentées section III.3.3. Dans la troisième partie de ce chapitre, nous aborderons la déformation dans le régime thermiquement activé. Les calculs réalisés dans MgO et dans le fer- α montrent que les mécanismes qui gouvernent la déformation, et particulièrement le durcissement, sont très

différents entre les deux régimes de température. Enfin, ce chapitre s'achèvera par une discussion des résultats présentés.

IV.1 Interactions locales entre dislocations

IV.1.1 Rappels théoriques

F. Kroupa (1961) a proposé une expression de la force d'interaction qui agit entre deux segments de dislocation, droits et infinis, équation (IV.1). Les deux segments sont caractérisés par leur vecteur ligne \vec{l}_1 et \vec{l}_2 et leur vecteur de Burgers \vec{b}_1 et \vec{b}_2 . La force d'interaction est définie suivant la direction de la plus courte distance entre les deux dislocations \vec{R}_{12} . La limite entre interaction répulsive et attractive est définie par $\vec{F}_{12} = \vec{0}$.

$$\vec{F}_{12} = \frac{\mu}{|\vec{l}_1 \times \vec{l}_2|} \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \left\{ \frac{1}{2} (\vec{b}_1 \cdot \vec{l}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{l}_2) - (\vec{b}_1 \times \vec{b}_2) \cdot (\vec{l}_1 \times \vec{l}_2) + \frac{1}{1-\nu} \left[(\vec{b}_1 \times \vec{l}_1) \cdot \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \right] \left[(\vec{b}_2 \times \vec{l}_2) \cdot \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \right] \right\} \quad (\text{IV.1})$$

Dans le cas d'une interaction attractive ($F_{12} > 0$), le système défini par les deux dislocations peut minimiser son énergie en créant une troisième portion de dislocation appelée « jonction ». La direction de la jonction \vec{l}_j et son vecteur de Burgers \vec{b}_j sont définis respectivement par l'intersection des plans de glissement et la somme (ou la différence) des vecteurs de Burgers des deux dislocations mères. Une jonction n'est créée que sous réserve de conditions énergétiques et géométriques favorables, c'est ce qu'exprime le critère de Frank ($b_j^2 < b_1^2 + b_2^2$) dans une version simplifiée qui ne tient pas compte du caractère des dislocations. Si $F_{12} < 0$, on parle d'état répulsif.

Toujours dans l'hypothèse de segments rigides, on peut calculer les conditions de formation d'une jonction en intégrant la dépendance au caractère. D'après *de Wit & Koehler (1959)*, l'énergie d'une dislocation de longueur l est définie par l'équation (IV.2).

$$E(l, \beta) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left(1 - \nu \cos^2(\beta) \right) l \quad (\text{IV.2})$$

Où β est l'angle que fait le vecteur de Burgers avec le vecteur ligne de la dislocation. β définit le caractère de la dislocation.

Lors de la création d'une jonction, le point d'intersection des lignes (nœud quadruple) se sépare en deux nœuds triples à l'origine de la nouvelle portion de dislocation (*Fig. IV.1*). Le système est alors composé d'une jonction et de sections de dislocations, aux extrémités des nœuds triples, appelées « bras de jonction ». Les angles ϕ_1 et ϕ_2 que font initialement les deux dislocations (indiquées $i=1, 2$) avec la direction de jonction (indiquée j) augmentent jusqu'aux valeurs critiques ϕ_1^* et ϕ_2^* qui définissent l'équilibre au nœud triple. Remarque : Si les angles ϕ_1 et ϕ_2 initiaux sont supérieurs aux angles critiques ϕ_1^* et ϕ_2^* , la jonction ne peut pas se former et l'état entre les dislocations demeure attractif. Ce type d'interactions est encore appelé un « état croisé » (*Wickham et al. 1999 ; Madec et al. 2002a*).

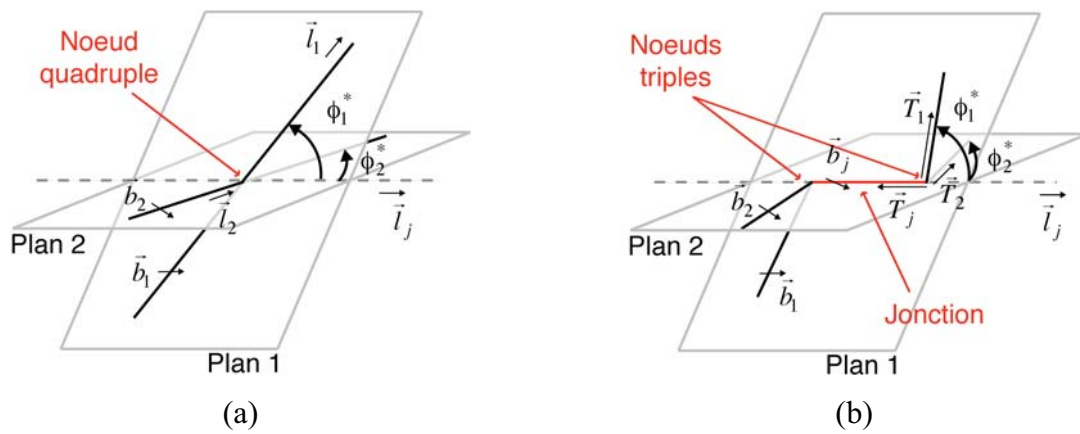


Fig. IV.1 Formation d'une jonction. (a) Définition d'un nœud quadruple à l'intersection entre les deux lignes. (b) La jonction se forme suivant la direction d'intersection des deux plans. La longueur de la jonction est fonction de l'équilibre des tensions de ligne aux nœuds triples. Ce modèle ne prend pas en compte les interactions à longue distance.

Si l'on néglige les interactions élastiques entre les bras de jonction, la configuration la plus favorable est uniquement définie par l'équilibre des tensions de ligne aux nœuds triples. Les nœuds ne pouvant se déplacer que suivant \vec{l}_j , on considère la relation d'équilibre projetée le long de cet axe (équation (IV.3)).

$$T_j = T_1 \cos(\phi_1^*) + T_2 \cos(\phi_2^*) \quad (\text{IV.3})$$

Lorsqu'un nœud triple est translaté, pendant la formation ou la destruction de la jonction, la taille des bras de jonction et leur caractère sont modifiés. Cependant, si la taille de la jonction évolue, son caractère β_j ne change pas. Le déplacement d'un nœud triple est contrôlé par la tension de ligne des différentes portions de dislocation. Les dérivées partielles de l'énergie par

rapport à l et ϕ permettent d'évaluer les composantes de la tension de ligne pour la jonction T_j et les bras de jonction T_i (équation (IV.4)).

$$T_j = \frac{\partial E_j}{\partial l_j} \quad (\text{IV.4a})$$

$$T_i = \frac{\partial E_i}{\partial l_i} + \frac{\partial E_i}{\partial \phi_i} \frac{\partial \phi_i}{\partial l_i} \quad (\text{IV.4b})$$

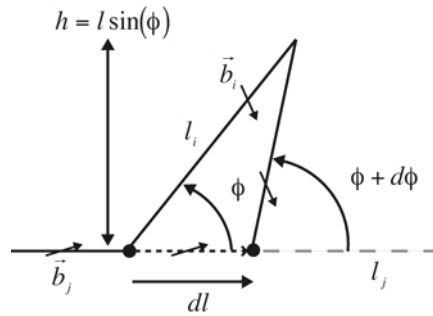


Fig. IV.2 Déplacement d'un nœud triple. Lorsqu'un nœud triple est déplacé d'une quantité dl , le caractère β_j de la jonction ne change pas contrairement à celui des bras de jonction.

Les deux dérivées partielles sont calculées directement à partir de l'expression (IV.2) dans le cadre d'un petit déplacement d'un nœud triple (Fig. IV.2). En posant $f(\beta) = 1 - \nu \cos^2(\beta)$ et en réinjectant l'expression de l'énergie dans les équations (IV.4a) et (IV.4b), les composantes de tension de ligne de la jonction T_j et des bras de jonction T_i sont définies par les expressions (IV.5a) et (IV.5b).

$$T_j = \frac{\mu b_j^2}{4\pi(1-\nu)} f(\beta_j) \quad (\text{IV.5a})$$

$$T_i = \frac{\mu b_i^2}{4\pi(1-\nu)} \left[f(\beta_i) - \tan(\phi_i^*) f'(\beta_i) \right] \quad (\text{IV.5b})$$

À partir des équations (IV.3), (IV.5a) et (IV.5b), la condition d'équilibre des tensions de ligne au nœud triple est définie par l'équation (IV.6).

$$f(\beta_j) b_j^2 = f(\beta_1) b_1^2 \cos(\phi_1^*) - f'(\beta_1) b_1^2 \sin(\phi_1^*) + f(\beta_2) b_2^2 \cos(\phi_2^*) - f'(\beta_2) b_2^2 \sin(\phi_2^*) \quad (\text{IV.6})$$

Les solutions de l'équation (IV.6) définissent l'ensemble des valeurs (ϕ_1, ϕ_2) favorables à la formation d'une jonction. Ce résultat est indépendant de la longueur initiale des deux dislocations mères. Un lobe de jonction est centré sur (0,0) et s'étend d'autant plus que les jonctions sont énergétiquement favorables (taille de \vec{b}_j relativement à \vec{b}_i). La contrainte critique de destruction d'une jonction τ_j est proportionnelle à $\mu b/l_j$. Le coefficient de proportionnalité dépend des angles ϕ_1 et ϕ_2 . τ_j est d'autant plus élevée que la taille de la jonction est grande. La résistance d'une jonction est donc directement liée à la longueur des bras de jonction (Saada 1960 ; Schoeck & Frydman 1972 ; Rodney & Philips 1999). L'étude des interactions locales entre deux systèmes de glissement donnés et leur classification en fonction de (ϕ_1, ϕ_2) est représentée par une « cartographie d'interactions ». Les calculs de cartographie peuvent être réalisés en utilisant le modèle élastique décrit précédemment (équations (IV.1) et (IV.6)) ou avec la Dynamique des Dislocations. La DD permet notamment de prendre en compte la courbure des lignes et les interactions entre portions de dislocation qui sont négligées dans le modèle élastique rappelé précédemment.

Hormis les jonctions, il existe deux autres interactions de contact entre dislocations (i) les annihilation colinéaires. Elles concernent les systèmes de glissement qui disposent du même vecteur de Burgers mais de plans différents. Un exemple typique est l'intersection d'un système primaire et de son système dévié (voir Madec *et al.* 2003 pour une application aux CFC). Ce sont des interactions fortes puisque les annihilations induisent, entre autres, la formation de débris de dislocations difficiles à remobiliser (Devincre *et al.* 2007) (ii) les interactions coplanaires. Elles font référence aux systèmes de glissement qui disposent de vecteur de Burgers différent mais du même plan de glissement. Leur probabilité d'apparition est négligeable puisqu'elle nécessite l'interaction entre deux dislocations, ayant des vecteurs de Burgers différents, mais situées dans le même plan de glissement à un instant t . Néanmoins, l'interaction coplaire devient importante dès lors où elle est délocalisée (plans de glissement différents mais de mêmes indices hkl). Dans ce cas, elle entraîne la formation de dipôles ou de multipôles.

De manière analogue, les interactions dipolaires entre dislocations issues d'un même système de glissement induisent du durcissement (Devincre *et al.* 2006 ; Queyreau 2008). On parle d'auto-écrouissage. Dans Kubin *et al.* 2003, les auteurs réalisent une revue des interactions locales entre dislocations dans les structures CFC et CC.

Avant d'explorer les propriétés plastiques de MgO dans des simulations en masse, nous avons étudié chacune des interactions locales dans les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Cette étude a été réalisée à la fois à l'aide du modèle élastique et en DD.

IV.1.2 Matrice et cartographies des interactions

Comme nous l'avons déjà décrit, le glissement des dislocations dans MgO, et plus généralement dans les matériaux de structure NaCl, est principalement localisé au sein de deux familles de systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, soit douze systèmes de glissement. Afin de simplifier la description des intersections entre les différents systèmes de glissement, ces derniers sont référencés et indicés *Tab. IV.1*.

$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$			$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$		
Indice	Plan	\vec{b}	Indice	Plan	\vec{b}
1	$(\bar{1}10)$	$\frac{1}{2}[110]$	7	(001)	$\frac{1}{2}[110]$
2	(110)	$\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$	8	(001)	$\frac{1}{2}[1\bar{1}0]$
3	$(0\bar{1}1)$	$\frac{1}{2}[011]$	9	(100)	$\frac{1}{2}[011]$
4	(011)	$\frac{1}{2}[01\bar{1}]$	10	(100)	$\frac{1}{2}[01\bar{1}]$
5	$(\bar{1}01)$	$\frac{1}{2}[101]$	11	(010)	$\frac{1}{2}[101]$
6	(101)	$\frac{1}{2}[10\bar{1}]$	12	(010)	$\frac{1}{2}[10\bar{1}]$

Tab. IV.1 Indexation des 12 systèmes de glissement de la structure NaCl. Les systèmes de glissement de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ sont indicés de 1 à 6, ceux de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ de 7 à 12.

On dénombre assez facilement le nombre d'interactions entre systèmes à traiter. Il est de 36 configurations par famille de systèmes de glissement auxquelles s'ajoutent 72 configurations entre systèmes de glissement issus de familles différentes que l'on appellera les « interactions croisées ». Soit un total de 12^2 configurations. Ce nombre est dans un premier temps réduit à l'aide d'un argument simple : l'interaction entre des systèmes i et j est du même type que celle entre les systèmes j et i . Ce qui réduit le nombre à 78 configurations

possibles. On peut réduire à un unique type de configuration les 12 interactions dipolaires issues de l'auto-écrouissage. Enfin, les symétries du cristal permettent de réduire le type d'interactions de 67 à seulement 8 (exemple : l'interaction entre les systèmes 1 et 2 est strictement identique d'un point de vue géométrique à celle entre les systèmes 3 et 4 ou 5 et 6). La classification des interactions en fonction des systèmes de glissement et du type d'interaction s'appelle la « matrice d'interactions » (Tab. IV.2). Elle peut être définie à l'aide du module *MatDinter* (développé par R. Madec), disponible dans le package *microMegas*.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1	2	3	3	3	3	4	5	6	6	6	6
2	2	1	3	3	3	3	5	4	6	6	6	6
3	3	3	1	2	3	3	6	6	4	5	6	6
4	3	3	2	1	3	3	6	6	5	4	6	6
5	3	3	3	3	1	2	6	6	6	6	4	5
6	3	3	3	3	2	1	6	6	6	6	5	4
7	4	5	6	6	6	6	1	7	8	8	8	8
8	5	4	6	6	6	6	7	1	8	8	8	8
9	6	6	4	5	6	6	8	8	1	7	8	8
10	6	6	5	4	6	6	8	8	7	1	8	8
11	6	6	6	6	4	5	8	8	8	8	1	7
12	6	6	6	6	5	4	8	8	8	8	7	1

Tab. IV.2 Matrice d'interactions de MgO (structure NaCl) pour les familles de systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Chaque système de glissement est repéré par un indice (voir Tab. IV.1) allant de 1 à 12. Les interactions sont numérotées de 1 à 8.

La matrice d'interactions est une matrice carrée, symétrique et composée de quatre sous-ensembles. Chaque sous-ensemble est symétrique ($M_{ij}=M_{ji}$) et est représentatif des interactions au sein d'une famille de systèmes de glissement ou d'interactions croisées entre les deux familles. Les deux sous-ensembles relatifs aux interactions croisées sont évidemment

identiques. On dénombre deux types d'interactions pour les sous-ensembles qui caractérisent les interactions au sein d'une même famille (trois si l'on tient compte de l'interaction dipolaire indicée 1) et 3 types d'interactions croisées. Pour décrire les intersections entre systèmes de glissement, l'indice de l'interaction qui figure dans la matrice *Tab. IV.2* ou les indices des systèmes concernés (ex : interaction 2-4 afin de décrire l'intersection entre les systèmes indicés 2 et 4 dans le *Tab. IV.1*) seront employés de manière indifférenciée.

IV.1.2.1 Interactions entre les systèmes de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$

L'intersection indicée 2 intervient lorsque les deux systèmes mis en jeu ont des plans orientés à 90° (la configuration 1-2 et ses équivalents par symétrie : 3-4 et 5-6). Les jonctions potentielles sont de caractère coin. Elles sont glissiles dans les plans $\{100\}$. Elles ont les mêmes caractéristiques que la jonction de Hirth des CFC (voir *Hirth 1961* pour une classification des jonctions dans la structure CFC). Néanmoins, le vecteur de Burgers $\vec{b}_j = \langle 100 \rangle$ de la jonction est trop grand pour que l'interaction soit énergétiquement favorable. Les interactions résultantes sont donc des états croisés ou des états répulsifs. L'exemple traité *Fig. IV.3a* correspond à l'intersection entre les systèmes indicés 1 et 2. Les résultats sont en accord avec les travaux de *Carrez et al. (2005)*.

Les états attractifs et répulsifs prédits par le calcul de DD (symbolisés respectivement par des croix et des cercles sur les cartographies présentées) sont en accord avec les prédictions du modèle élastique simplifié (équation (IV.1)), excepté pour les configurations (ϕ_1, ϕ_2) qui donnent une force d'interaction $|\vec{F}_{12}|$ légèrement supérieure à zéro. Pour des valeurs $0 < F_{12} < 0,2$, le calcul de DD prévoit régulièrement des interactions de type répulsif. Toujours pour la cartographie 1-2, pour des configurations angulaires singulières (ϕ_1, ϕ_2) proches de $(0[\pi], 0[\pi])$, le calcul en DD peut parfois mener à la formation de jonctions. Ces jonctions n'ont pas été représentées car leur présence est directement liée aux conditions de relaxation du calcul (absence de reproductibilité du résultat). De plus, dans la majeure partie des cas, leur longueur est négligeable devant la longueur initiale des dislocations mères.

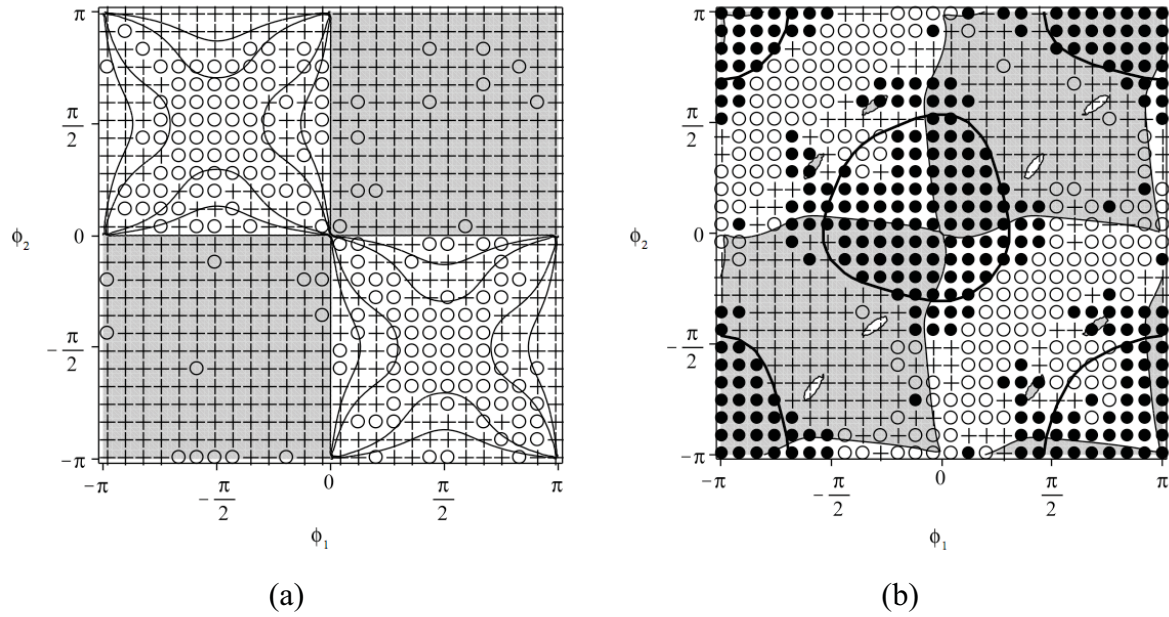


Fig. IV.3 Cartographies d'interactions entre les systèmes 1-2 (a) et 2-4 (b). Les domaines attractifs et répulsifs issus du modèle élastique sont représentés par les plages grises ($F_{12} < 0$) et blanches ($F_{12} > 0$). Les lobes de jonctions sont illustrés par un trait continu noir. Les résultats obtenus en DD sont représentés par des symboles. Les états croisés sont symbolisés par des croix, les états répulsifs par des cercles vides et les jonctions par des cercles pleins. (a) Les courbes de niveau $F_{12}=0,1$ et $F_{12}=0,2$ ont été ajoutées. Si le modèle élastique prévoit des interactions répulsives dans ces domaines, le calcul de DD y prédit régulièrement des interactions de type attractif.

L'intersection indicée 3 apparaît pour des systèmes dont les vecteurs de Burgers forment un angle de $60^\circ/120^\circ$ (2-4 et ses équivalents par symétrie : 1-3, 1-4, 1-5, 1-6, 2-3, 2-5, 2-6, 3-5, 3-6, 4-5 et 4-6). Les jonctions potentielles sont toujours de caractère coin. Elles disposent de vecteurs de Burgers de type $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$, énergétiquement favorables. Leurs vecteurs lignes sont de type $\langle 111 \rangle$. Elles sont sessiles dans des plans de type $\{112\}$ que nous ne considérons pas comme des plans de glissement favorable de la structure NaCl. L'exemple traité Fig. IV.3b est l'intersection entre les systèmes 2 et 4, $\vec{b}_i = \frac{1}{2}[10\bar{1}]$ et $\vec{l}_j = [1\bar{1}1]$.

Les résultats fournis par le modèle élastique (équations (IV.1) et (IV.6)) et les calculs de DD sont en accord. Ces résultats sont comparables à ceux présentés dans Carrez et al. 2005. On note cependant, une fois encore, quelques différences au niveau des zones où $F_{12}=0$ et un faible nombre de configurations supplémentaires de jonctions données par la DD principalement situées aux extrémités des lobes de jonction (Fig. IV.3b). Comme pour les états croisés additionnels de la cartographie 1-2, cette propriété est due au fait que, en DD, les dislocations peuvent se courber sous l'effet des interactions élastiques et induire des configurations différentes de celles du modèle élastique. Néanmoins, ces configurations

mènent principalement à des jonctions courtes et donc peu résistantes (lobes en vert Fig. IV.4). D'après la cartographie présentée Fig. IV.3b, on dénombre 42% de configurations (ϕ_1, ϕ_2) favorables à la formation d'une jonction¹.

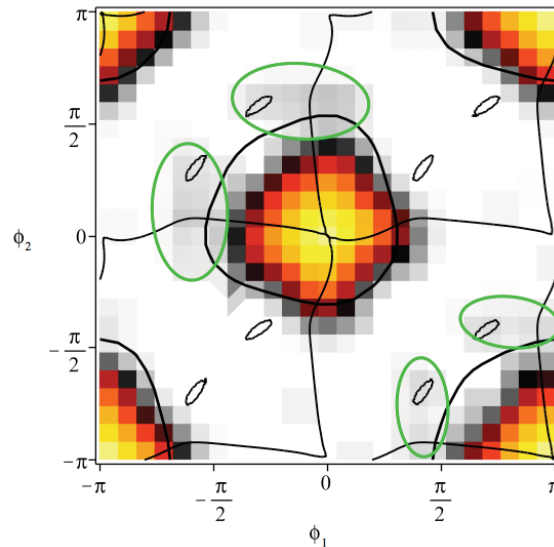


Fig. IV.4 Longueurs de jonction pour l'intersection 2-4. Les traits représentent les limites entre états croisés et répulsifs, ainsi que les lobes de jonction déjà présentés Fig. IV.3b. Au centre des lobes, la longueur des jonctions l_j tend vers la longueur initiale des dislocations mères l_0 (jaune) alors qu'elle tend vers 0 sur la bordure extérieure des lobes (gris). Les lobes verts illustrent des domaines d'interactions pour lesquels la longueur des jonctions est particulièrement faible.

D'après la figure IV.4, on remarque que les jonctions les plus longues, calculées en DD, sont définies pour les configurations les plus proches de $\phi_1 = \phi_2 = 0$. En effet, dans cette configuration critique, les deux dislocations mères se recombinent entièrement et la taille des bras de jonction est nulle. La contrainte de destruction de la jonction diverge alors vers l'infini (Kubin et al. 2003 ; Devincre et al. 2006).

IV.1.2.2 Interactions entre les systèmes de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$

L'intersection indicée 7 correspond aux systèmes coplanaires (7-8 et ses symétries : 9-10 et 11-12). Les jonctions potentielles disposent de vecteurs de Burgers de type $\langle 100 \rangle$ trop

¹ Le pourcentage de configurations (ϕ_1, ϕ_2) favorables à une interaction est calculé comme le rapport entre le nombre de configurations menant à la dite interaction et le nombre total de couples (ϕ_1, ϕ_2) testés. Dans le cas d'une jonction, l'ensemble des configurations favorables est pris en compte, y compris celles qui mènent à des jonctions de taille réduite.

grands pour être énergétiquement favorables. Ce type d'interactions contribue surtout à la formation de dipôles.

Il n'existe qu'un seul type d'interaction de contact dans les plans $\{100\}$; l'intersection indiquée 8 correspond aux systèmes à 90° de la famille $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (8-9 et ses équivalents par symétrie : 7-9, 7-10, 7-11, 7-12, 9-10, 8-11, 8-12, 9-11, 9-12, 10-11 et 10-12). Les jonctions sont de caractère coin et son vecteur de Burgers est de type $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$. Elles sont glissiles dans des plans $\{110\}$. L'exemple traité *Fig. IV.5* est l'intersection entre les systèmes 8 et 9. Comme pour les autres cartographies, les résultats sont applicables à l'ensemble des répliques obtenues par symétrie.

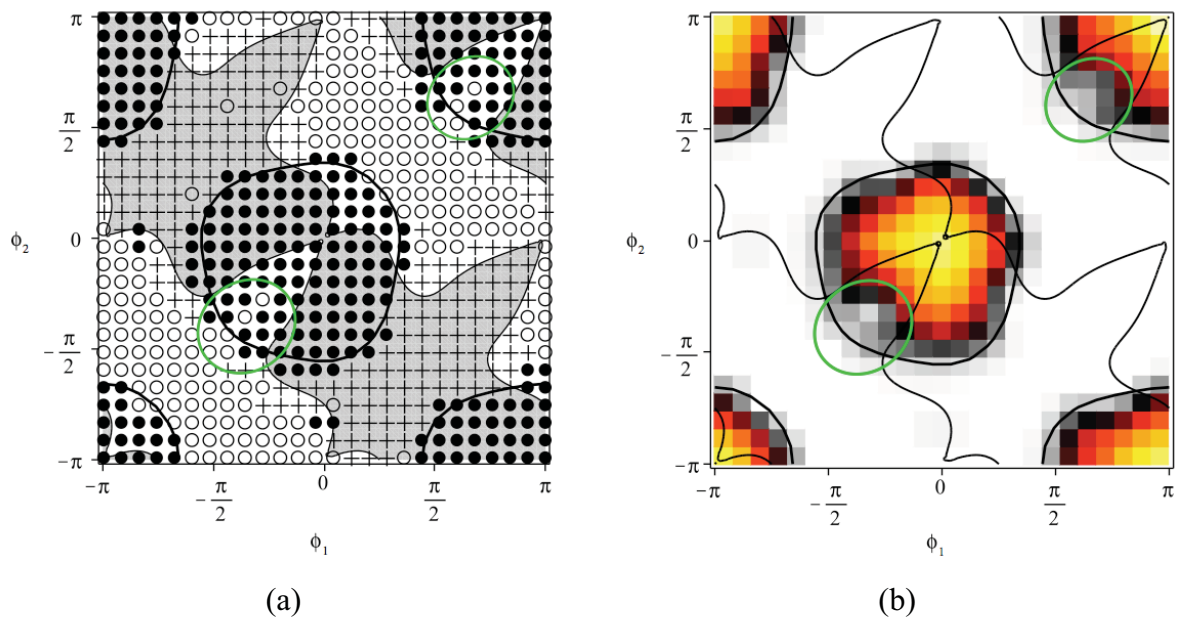


Fig. IV.5 Cartographie d'interactions 8-9 (a) et longueur de jonction (b). Les modes de représentation sont les mêmes que pour les figures IV.3 et IV.4. Les lobes en vert illustrent des zones où les jonctions sont de petite taille.

L'intersection entre les systèmes indicés 8 et 9 est favorable à la formation de jonctions coins de vecteurs de Burgers $\frac{1}{2}[101]$ et de vecteurs lignes $[010]$. Les jonctions sont glissiles dans les plans $(\bar{1}0\bar{1})$. D'après la cartographie 8-9, on dénombre 40% de configurations favorables à la formation de jonctions. Si les calculs de DD montrent que des jonctions existent dans des zones où le calcul élastique prévoit en partie des états répulsifs (lobes en vert *Fig. IV.5a*), nous noterons que ces jonctions sont de taille négligeable (*Fig. IV.5b*). Les résultats fournis par les deux approches sont donc toujours cohérents.

IV.1.2.3 Interactions croisées entre les deux familles de systèmes de glissement

L'intersection indiquée 4 correspond à une interaction de type colinéaire. Elle met en jeu les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ qui disposent des mêmes vecteurs de Burgers (1-7 et ses équivalents par symétrie : 2-8, 3-9, 4-10, 5-11 et 6-12). Ce type d'interaction peut donner lieu à des annihilations entre dislocations. L'exemple traité *Fig. IV.6* correspond à l'intersection entre les systèmes indicés 1 et 7.

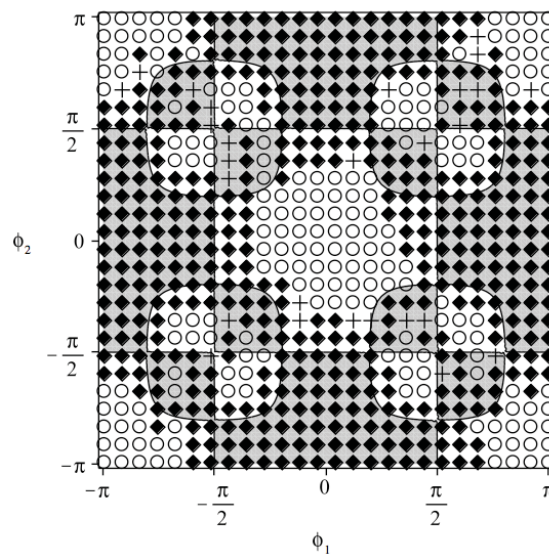


Fig. IV.6 Cartographie d'interactions entre les systèmes 1 et 7. Les annihilations colinéaires sont représentées par des losanges noirs.

La majeure partie des configurations attractives prédites par le modèle élastique donne lieu à des annihilations colinéaires. Le calcul de DD montre qu'une partie des interactions répulsives prédites par l'équation (IV.1) mène finalement à des annihilations. Cette particularité, déjà observée dans *Madec et al. 2003* et *Devincre et al. 2005*, met une nouvelle fois en évidence les limites du modèle élastique. Pour cette cartographie, on dénombre 68% de configurations (ϕ_1, ϕ_2) favorables aux annihilations colinéaires.

L'intersection de type 5 décrit les interactions croisées entre les systèmes dont les vecteurs de Burgers sont orthogonaux (1-8 et ses équivalents par symétrie : 2-7, 3-10, 4-9, 5-12 et 6-11). Les jonctions potentielles sont des jonctions mixtes glissiles dans $\{100\}$. Elles disposent cependant de vecteur de Burgers de type $\langle 100 \rangle$ qui ne sont pas favorables à leur création. L'exemple présenté *Fig. IV.7a* concerne l'intersection entre les plans indicés 1 et 7.

Le calcul élastique prévoit un nombre d'états croisés égal à celui des états répulsifs, alors que le calcul DD prévoit toujours un peu plus d'états croisés (55% de configurations favorables) que d'interactions répulsives (45% de configurations favorables).

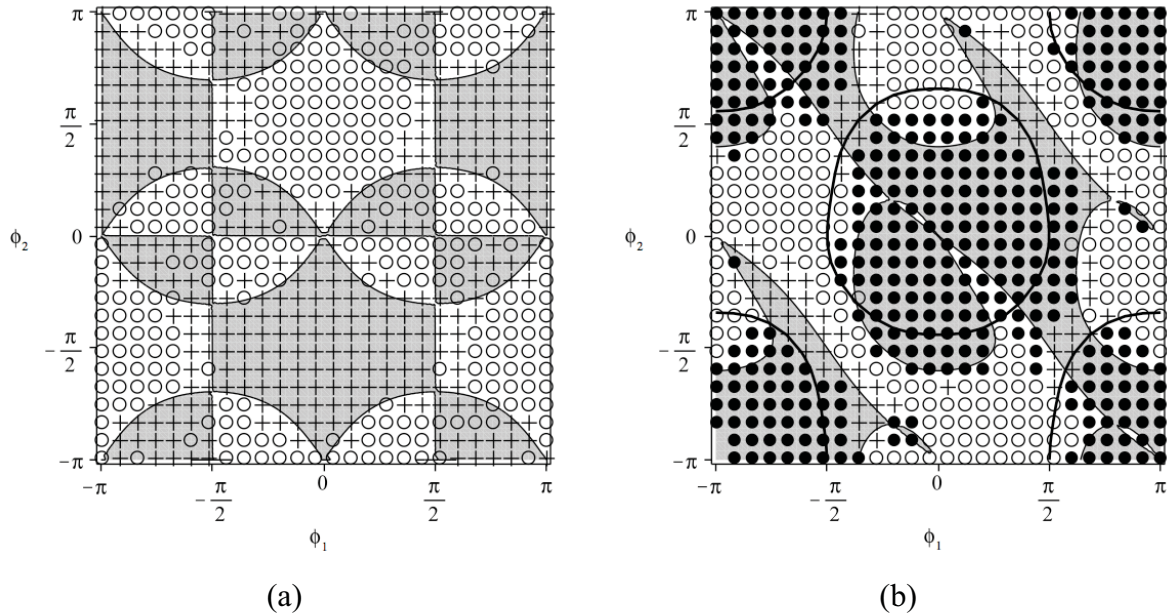


Fig. IV.7 Cartographies des interactions croisées entre les systèmes 1 et 8 (a), 3 et 12 (b).

Enfin, l'intersection de type 6 correspond aux interactions croisées entre systèmes dont les vecteurs de Burgers forment un angle de $90^\circ/120^\circ$ (3-12 et ses équivalents par symétrie : 1-9, 1-10, 1-11, 1-12, 2-6, 2-10, 2-11, 2-12, 3-7, 3-8, 3-11, 4-7, 4-8, 4-11, 4-12, 5-7, 5-8, 5-9, 5-10, 6-7, 6-8, 6-9 et 6-10). Les jonctions potentielles sont de type mixte, glissiles dans $\{100\}$ et disposent d'un vecteur de Burgers de type $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ énergétiquement favorable à leur formation. L'exemple illustré Fig. IV.7b correspond à l'intersection entre le système 3 et le système 12, $\vec{b}_j = \frac{1}{2}[110]$ et $\vec{l}_j = [\bar{1}00]$. La jonction est mixte, glissile dans (001). Comme pour les cartographies 2-4 et 8-9, les jonctions obtenues par le calcul de DD, en dehors des lobes de jonction sont de taille négligeable devant l_0 . Le nombre de configurations favorables à la formation d'une jonction est de 54%.

IV.2 Déformation et durcissement dans le régime athermique

IV.2.1 Microstructure et mécanismes de déformation

IV.2.1.1 Densité de jonction et anisotropie plastique

Dans la section III.3.3, nous avons présenté des courbes contrainte-cisaillement plastique issues d'essais numériques réalisés en DD (*Fig. III.14*). Ces simulations en masse, réalisées dans le régime quasi-statique de déformation (faible vitesse de déformation imposée), ont permis de calculer un palier athermique, dans les deux familles de systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, de l'ordre de 10 MPa pour une densité de dislocation initiale de 10^{12} m^{-2} . Ces calculs sont réalisés respectivement à 1000 K et 2000 K (dans le régime athermique pour les deux familles de systèmes). Des conditions limites périodiques sont appliquées aux volumes de simulation et la base de vecteur est tournée de telle sorte à éviter les artéfacts d'auto-annihilation (voir *Fig. II.10* pour plus de détails sur la matrice de rotation). Les volumes simulés sont de taille $10,70 \mu\text{m} \times 11,70 \mu\text{m} \times 11,80 \mu\text{m}$ et $8,00 \mu\text{m} \times 9,09 \mu\text{m} \times 10,32 \mu\text{m}$ respectivement pour les simulations dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$. Étant donné le peu d'information sur les propriétés d'activation du glissement dévié dans MgO, le mécanisme n'a été activé dans aucun des calculs présentés dans la suite de ce travail. Les axes de sollicitation sont respectivement $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ de manière à activer quatre plans $\{110\}$ avec un facteur de Schmid de 0,5 (les deux derniers systèmes étant inactifs) et quatre plans $\{100\}$ avec un facteur de Schmid de $\sqrt{2}/4$ ($\sim 0,35$) (les deux derniers systèmes étant inactifs). Les deux familles de systèmes de glissement sont traitées de manière totalement indépendante et aucune simulation ne tenant compte de l'activation simultanée des deux familles n'a été réalisée (ce type d'essai n'est pas décrit dans la littérature et induit des complexités en termes de conditions aux limites dans les simulations). Dans *mM*, toutes les jonctions sont traitées comme si elles étaient sessiles.

La microstructure initiale et l'évolution de la densité de dislocation adjointe à la courbe contrainte-déformation dans les plans $\{110\}$ sont présentées *Fig. IV.8*.

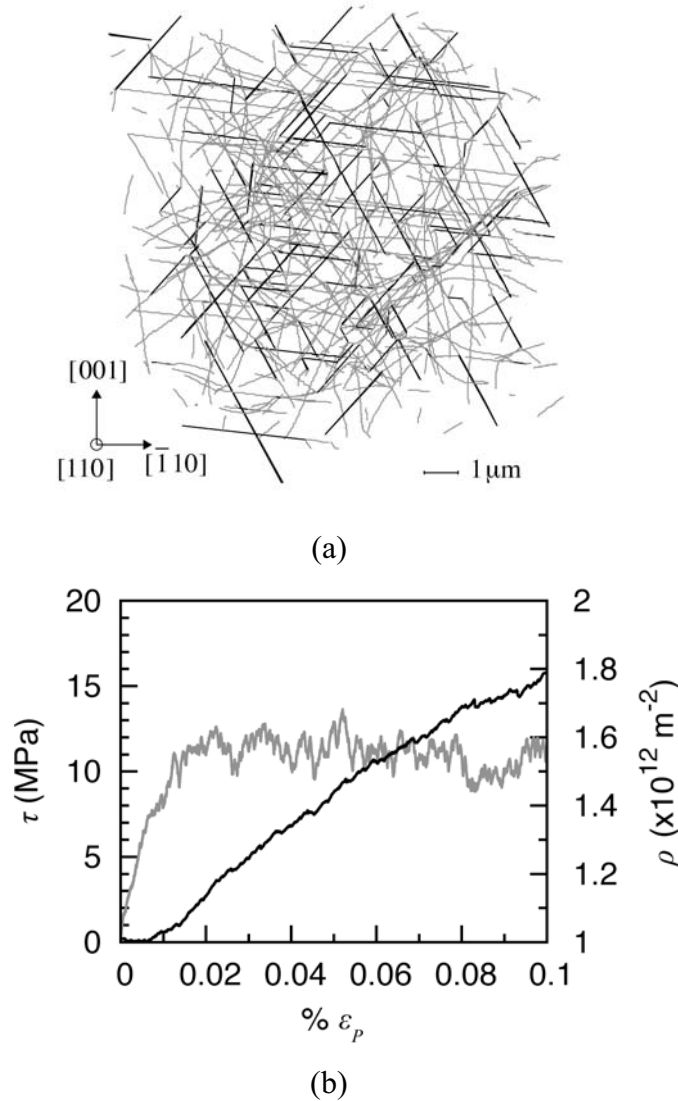


Fig. IV.8 DD en masse dans les plans $\{110\}$ à 1000 K. (a) Microstructure initiale. Les dislocations, indépendamment de leur plan de glissement, sont représentées en gris. Les jonctions, orientées suivant les directions $\langle 111 \rangle$, sont en noir. (b) Contrainte de cisaillement et densité de dislocation. La courbe contrainte-déformation est en gris, l'évolution de la densité au cours de l'essai numérique est représentée en noir. Les résultats sont analogues dans les plans $\{100\}$.

Comme nous l'avons déjà abordé au chapitre III, la contrainte d'écoulement est de l'ordre de 10 MPa dans les deux familles de système de glissement. Elle est peu sensible à la vitesse de déformation dans la gamme de vitesse étudiée. Une sensibilité des résultats à la vitesse est observée à partir de $\dot{\epsilon} \sim 100 \text{ s}^{-1}$ (Fig. III.15). D'après la figure IV.8, on observe que la densité augmente au cours de l'essai. Néanmoins, la pente de la courbe est plus importante en début qu'en fin d'essai. Nous reviendrons sur cette propriété plus loin dans ce chapitre.

Pendant les simulations, on observe la formation de nombreuses jonctions. Après indexation, on retrouve bien les interactions présentées dans la section précédente : des jonctions suivant $\langle 111 \rangle$ issues de l'intersection des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ qui disposent de vecteurs de Burgers à $60/120^\circ$ et des jonctions suivant $\langle 100 \rangle$ entre systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ orthogonaux (Fig. IV.9).

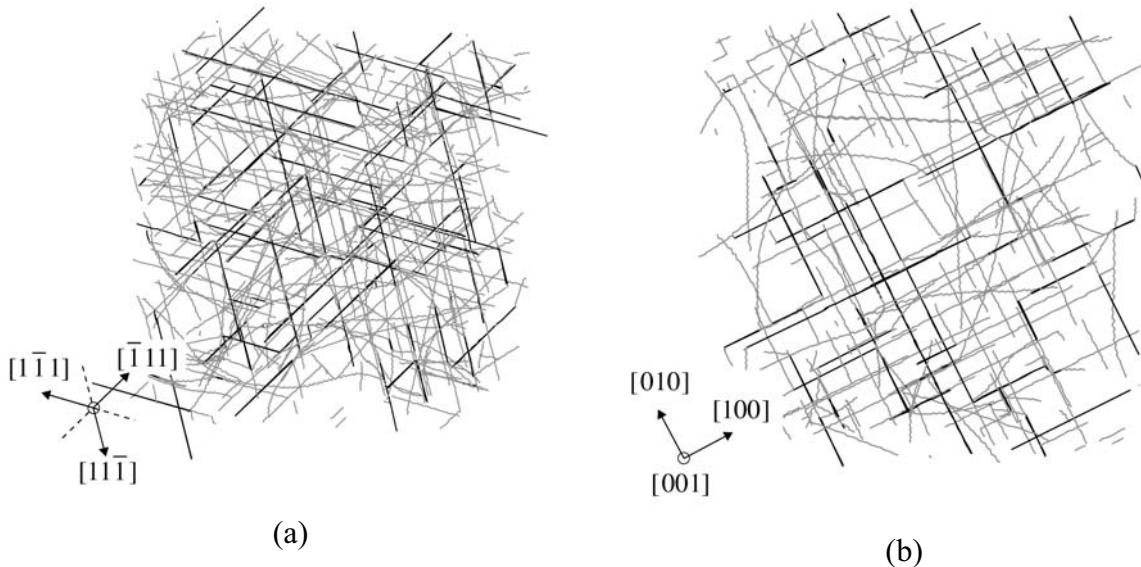


Fig. IV.9 Indexation des directions de jonction dans (a) $\{110\}$ et (b) $\{100\}$. Les dislocations sont représentées en gris et les jonctions en noir.

L'évolution des microstructures issues de l'activation des plans $\{110\}$ et $\{100\}$ mène à des résultats comparables. Dans les deux cas, les densités de dislocation et de jonction augmentent pendant l'essai (Fig. IV.10). Néanmoins, le ratio entre la densité de jonction et la densité de dislocation sature très vite (à partir de $\varepsilon_P=0,04\%$) à une valeur comprise entre 30% et 40% (Fig. IV.11).

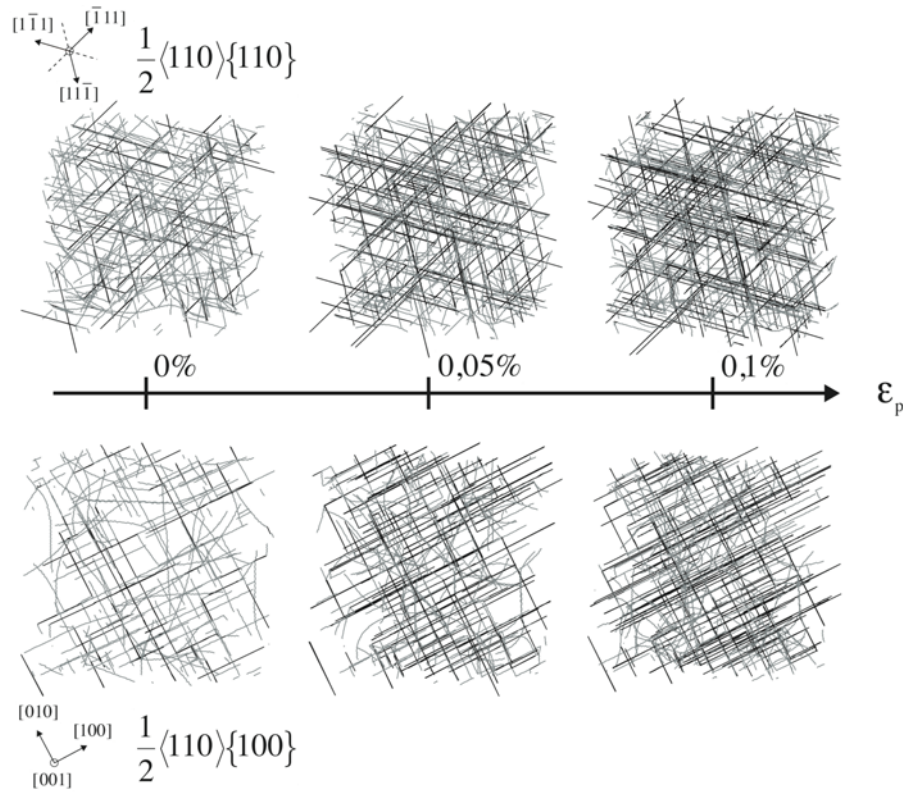


Fig. IV.10 Evolution microstructurale. Pour les deux familles, le nombre de jonction augmente entre les clichés initiaux et ceux à 0,05%. La différence entre les deux derniers est moins marquée. En effet, la densité de jonction sature rapidement (Fig. IV.11).

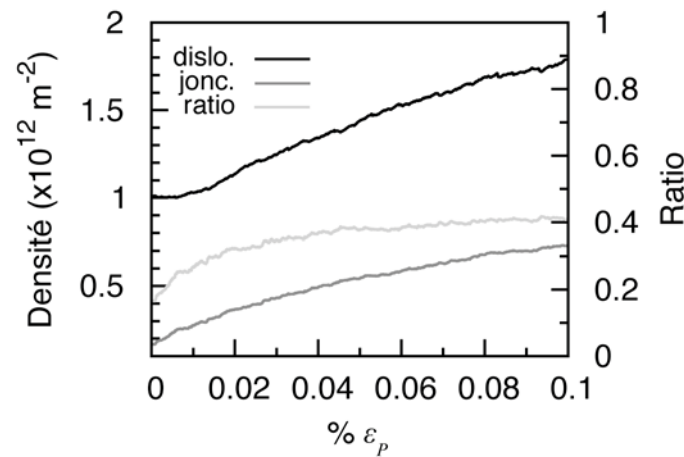


Fig. IV.11 Densité de dislocation et de jonction dans $\{110\}$. Dans les plans $\{110\}$, la densité de jonction sature à une valeur de l'ordre de 40% de la densité totale de dislocation. Cette valeur est légèrement inférieure dans les plans $\{100\}$, de l'ordre de 35%.

La distribution des jonctions entre les différents systèmes de glissement d'une même famille n'est pas homogène (Fig. IV.12). On observe rapidement (à partir de $\epsilon_p = 0,02\%$) une différenciation entre les systèmes activés et inactifs, puis, au sein même des systèmes activés (à partir de $\epsilon_p = 0,05\%$). À la fin du calcul dans $\{110\}$, le système 1 contient presque deux

fois plus de jonctions que le système 3 et presque trois fois plus de jonctions qu'un système inactif².

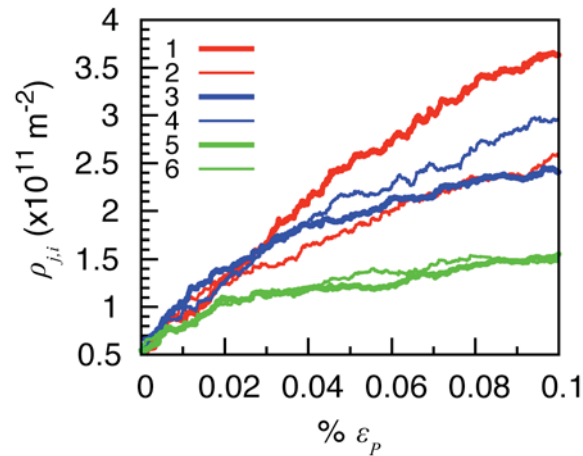


Fig. IV.12 Evolution de la distribution de la densité de jonction $\rho_{j,i}$ par systèmes de glissement $i \frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ en fonction de la déformation plastique. Les systèmes de glissement sont indicés suivant le tableau IV.1. Les systèmes conjugués sont illustrés par des couleurs identiques mais avec un type de ligne différent.

L'hétérogénéité de distribution de la densité de jonction est induite par la répartition de la densité de dislocation. L'évolution de la densité de dislocation par système de glissement au cours de la déformation est présentée Fig. IV.13a ; si la densité de dislocation est répartie équitablement entre les différents systèmes au début de la simulation, on remarque qu'elle finit par ne plus être homogène. Alors, la distribution du cisaillement est différenciée, incluant des quantités variables en fonction du système de glissement observé (Fig. IV.13b). Dans le cas de cette simulation dans $\{110\}$, la déformation est gouvernée par les systèmes 1 et 2. Précisons tout de même que, si l'anisotropie plastique apparaît quelles que soient les conditions de simulations pour les deux familles de systèmes de glissement, le ou les plans qui accommodent la déformation sont dépendants de la distribution initiale des dislocations (non reproductibilité des systèmes dominants).

² Nous avons aussi observé l'anisotropie de distribution de densité de jonction dans les simulations où seuls les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ sont actifs.

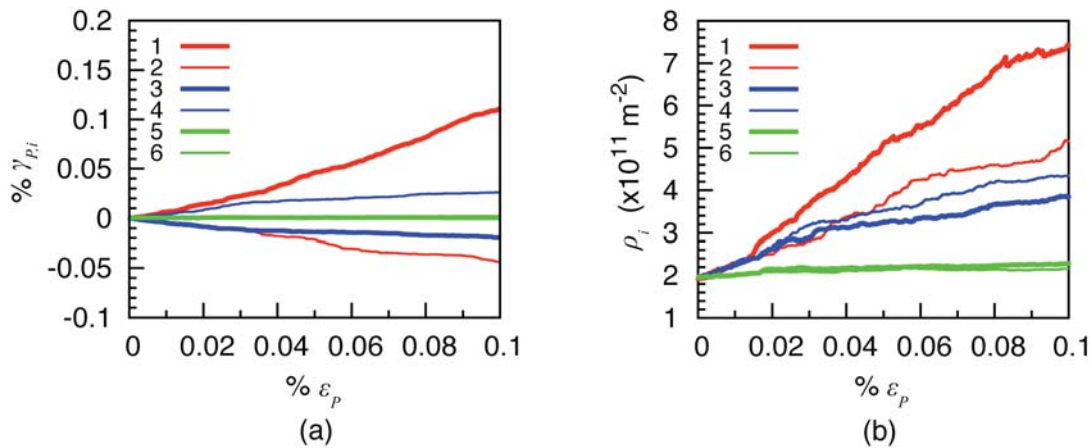


Fig. IV.13 Cisaillement plastique et densité de dislocation en fonction de la déformation plastique dans {110}. Les légendes sont identiques à celles de la Fig. IV.12. Les résultats sont comparables dans les plans {100}

IV.2.1.2 Influence des mécanismes de déformation sur la densité de dislocation

Pour les deux familles de système de glissement, les calculs (et particulièrement l'interface graphique de *mM*) montrent que la déformation n'est pas continue. Elle est composée d'une succession de temps d'attente et d'incréments de cisaillement conjugués à des changements microstructuraux tels que la rupture de jonctions ou de dipôles. La déformation semble être gouverné par le mécanisme d'avalanche comme cela a été observé dans la glace ou les métaux CFC (Weiss & Marsan 2003 ; Devincere et al. 2008 ; Devincere & Kubin 2010).

Afin de rendre compte de ce phénomène, la figure IV.14 illustre l'évolution de la contrainte et de la densité de dislocation pour la famille de systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, dans l'intervalle de déformation plastique [0,07-0,10]. La contrainte est décrite par une succession de pics et de décroissances corrélés à une évolution non-linéaire de la densité. Si les flèches représentées sur la figure rendent compte de l'évolution globale, on observe aussi des pics de croissance-décroissance de la densité de dislocation.

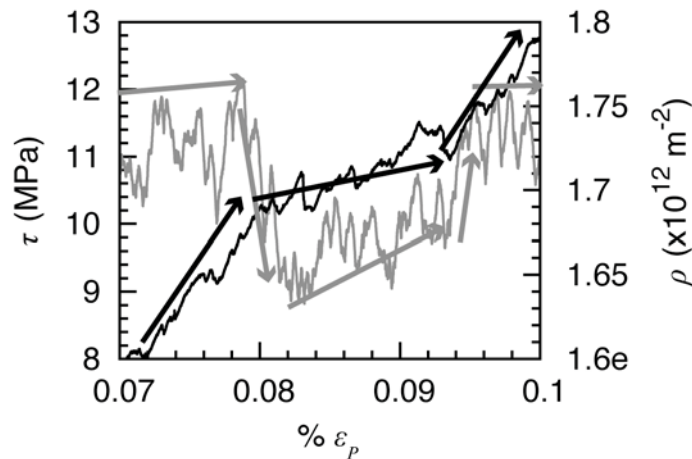


Fig. IV.14 Evolution de la contrainte de cisaillement et de la densité de dislocation sur l'intervalle [0,07-0,10] de déformation plastique dans $\{110\}$. Les flèches illustrent le comportement général des deux courbes.

On peut observer Fig. IV.14, une décroissance de près de 3 MPa de la contrainte juste avant $\epsilon_p=0,08\%$. L'évolution de la densité dans l'intervalle est scindée en trois régimes, avec une croissance de celle-ci juste avant la rupture de contrainte, un régime intermédiaire où la pente de la courbe est plus faible et enfin un dernier régime où la pente $d\rho/d\epsilon_p$ est comparable à celle du premier régime.

Au regard de l'évolution de la densité de dislocation par système de glissement ρ_i (Fig. IV.13b), on peut supposer que la déformation, ou plus précisément l'accroissement de la densité de dislocation, est gouvernée par le système 1 dans cet intervalle de déformation, voire par les systèmes 1 et 2. La figure IV.15 confirme cette hypothèse : les variations de densité dans le système 1 reproduisent parfaitement l'évolution de la distribution globale dans cet intervalle, jusqu'à $\epsilon_p = 0,092\%$, valeur à partir de laquelle l'accroissement de la densité de dislocation est accommodée par le système 2.

Certains mécanismes ont pu être identifiés à l'aide de lame mince réalisées en DD. Par exemple, la diminution de la contrainte entre 0,785% et 0,0816% de déformation plastique est liée à un mécanisme particulièrement isolé dans le système indicé 1. Il est décrit par la figure IV.16. Sur cette figure, huit clichés ont été superposés. Les différences entre chaque image sont représentées en rouge. On observe en particulier le déplacement d'une dislocation (de la position 1 à la position 8) qui fait suite à la rupture de trois jonctions respectivement en positions 1 et 4. La dislocation cisaille ensuite entièrement la lame mince avant d'être à nouveau bloquée (en position 8) par la formation de deux jonctions et d'un dipôle. On remarque que le reste de la microstructure est très peu mobile au sein de la lame mince.

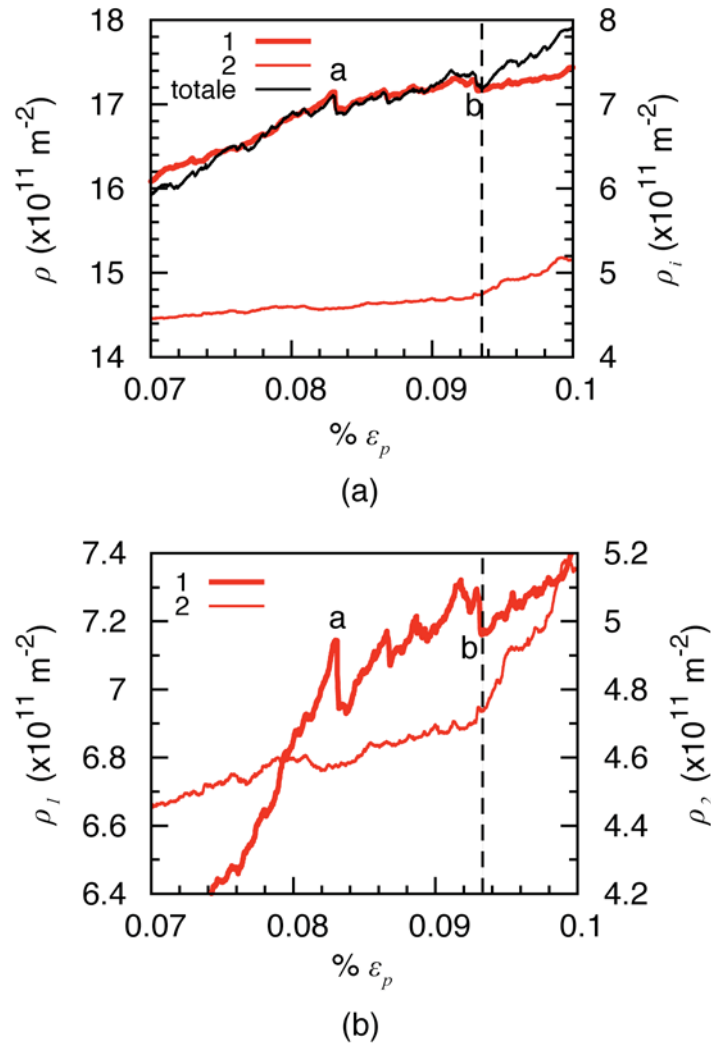


Fig. IV.15 Evolution de la densité de dislocation dans les systèmes indicés 1 et 2 en comparaison directe à la densité totale de dislocation sur l'intervalle $[0,07-0,1]$ de déformation plastique. Les lignes en pointillés correspondent à une délocalisation de la déformation, du système 1 vers le système 2. Les lettres a et b correspondent à des épisodes de diminution significative de densité de dislocation.

Le mécanisme présenté Fig. IV.16 est instantanément suivi d'un second événement du même ordre, visible dans la même lame mince (il correspond à la fin du pic a, Fig. IV.15). Ces deux événements représentent les deux principales évolutions en termes de microstructure, qui ont lieu dans l'ensemble du volume de simulation, lors de la décroissance en contrainte présentée précédemment³.

³ Afin de visualiser les événements au sein d'un plan de glissement donné, l'ensemble du volume simulé est découpé en une série de lames minces de 1 à 2 μm d'épaisseur, orientées suivant le plan, qui sont successivement visualisées et corrélées à l'évolution de la densité de dislocation dans le système considéré.

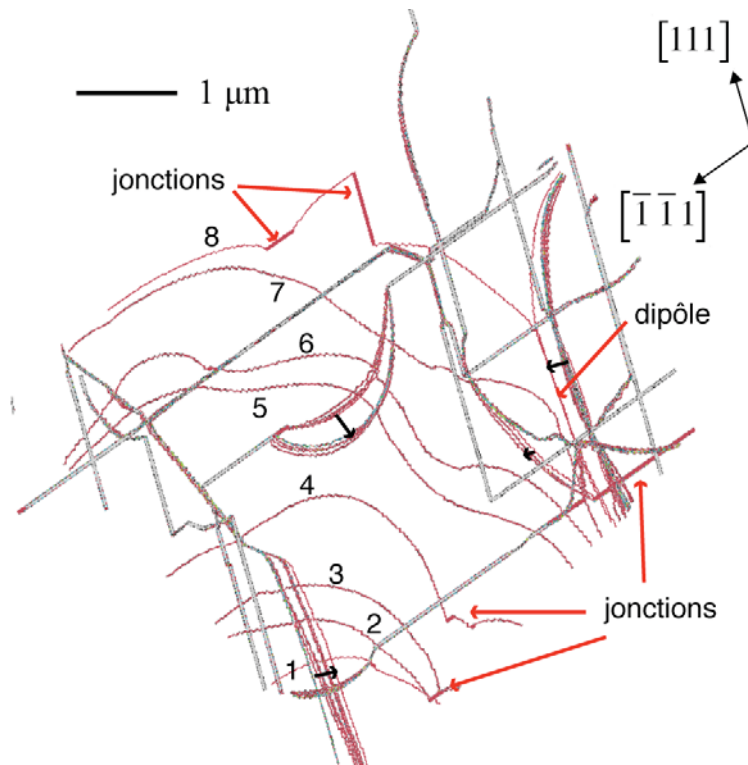


Fig. IV.16 Avalanche de dislocation dans les plans $\{110\}$. Lame mince de $1\ \mu\text{m}$ orientée suivant $(\bar{1}10)$. La figure est composée de huit images superposées, sur l'intervalle de déformation plastique $[0,0785-0,0816]$. Elle illustre particulièrement le glissement d'une dislocation dans la lame mince (de la position 1 à 8). La différence entre chaque image est illustrée en rouge, la microstructure initiale en gris. Les flèches noires indiquent les faibles déplacements des autres dislocations dans la lame mince. Par souci de visibilité, seules les dislocations et jonctions issues du plan indicé 1 ont été représentées.

Comme l'illustrent les représentations graphiques de la densité de dislocation dans les systèmes 1 et 2, des décroissances de densité peuvent être observées localement (événements *a* et *b*, Fig. IV.15). Ces décroissances ne sont liées ni aux conditions limites périodiques, ni aux interactions colinéaires (le glissement dévié étant inhibé). L'évènement *a* est caractérisé par l'interaction locale entre deux dipôles qui disposent d'une dislocation en commun (Fig. IV.17). Lorsque les deux dipôles s'attirent et entrent en contact, la dislocation partagée s'auto-annihile en un point. Ce mécanisme donne lieu à la création d'une boucle qui collapse rapidement et à une nouvelle portion de dislocation, plus courte que la portion de dislocation initiale. La densité de dislocation dans le plan diminue d'une quantité de l'ordre $10^{10}\ \text{m}^{-2}$, ce qui correspond à une réduction de $10\ \mu\text{m}$ de ligne (taille initiale des dislocations) dans un volume de $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$. Cette quantité est en accord avec la diminution de longueur de ligne induite par ce mécanisme.

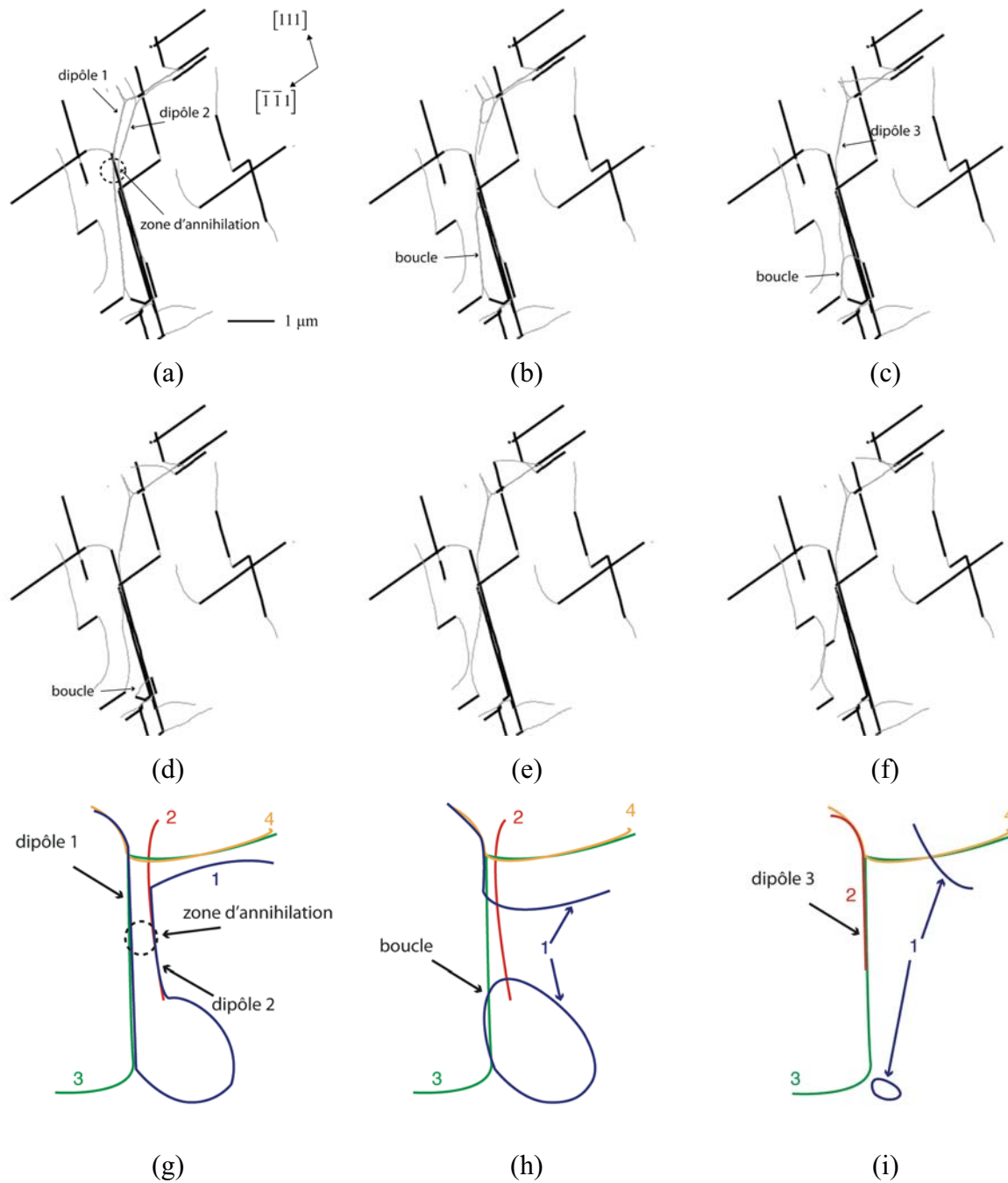


Fig. IV.17 Annihilation dipôle-dipôle. Lamme mince de 2 μm d'épaisseur dans le plan $(\bar{1}10)$. (a)-(f) : Deux dipôles qui partagent la même dislocation interagissent et entraînent localement une auto-annihilation. Les dislocations sont représentées en gris, les jonctions en noir. Par souci de visibilité, seules les dislocations et jonctions appartenant au plan $(\bar{1}10)$ ont été représentées. (g)-(i) : Schématisation du mécanisme. (g) La dislocation 1 appartient à deux dipôles qui s'attirent. (h) Les dipôles interagissent localement. Au point d'intersection, la dislocation 1 (dislocation partagée) s'auto-annihile et entraîne la formation d'une boucle de dislocation. (i) La boucle de dislocation collapse. Une portion de la dislocation 1 reste dans le plan. Après recombinaison, il ne reste qu'un arrangement dipolaire dont les différentes portions sont formées par les dislocations 2, 3 et 4.

L'événement *b* (Fig. IV.15) a aussi été isolé et caractérisé dans une lame mince. Il correspond à un mécanisme plus intuitif que celui de l'événement *a*. Initialement, on observe une portion de dislocation longue et courbée, bloquée par une jonction. Sous l'effet de la contrainte, la jonction casse et laisse la dislocation relaxer (Fig. IV.18) ce qui induit une diminution de la densité dans le plan. Suite à l'événement *b*, nous avons pu observer que la déformation est délocalisée du système 1 vers le système 2, dans lequel des avalanches commencent à apparaître, alors qu'aucune activité n'avait été perçue dans ce plan dans le domaine de déformation plastique précédent *b*.

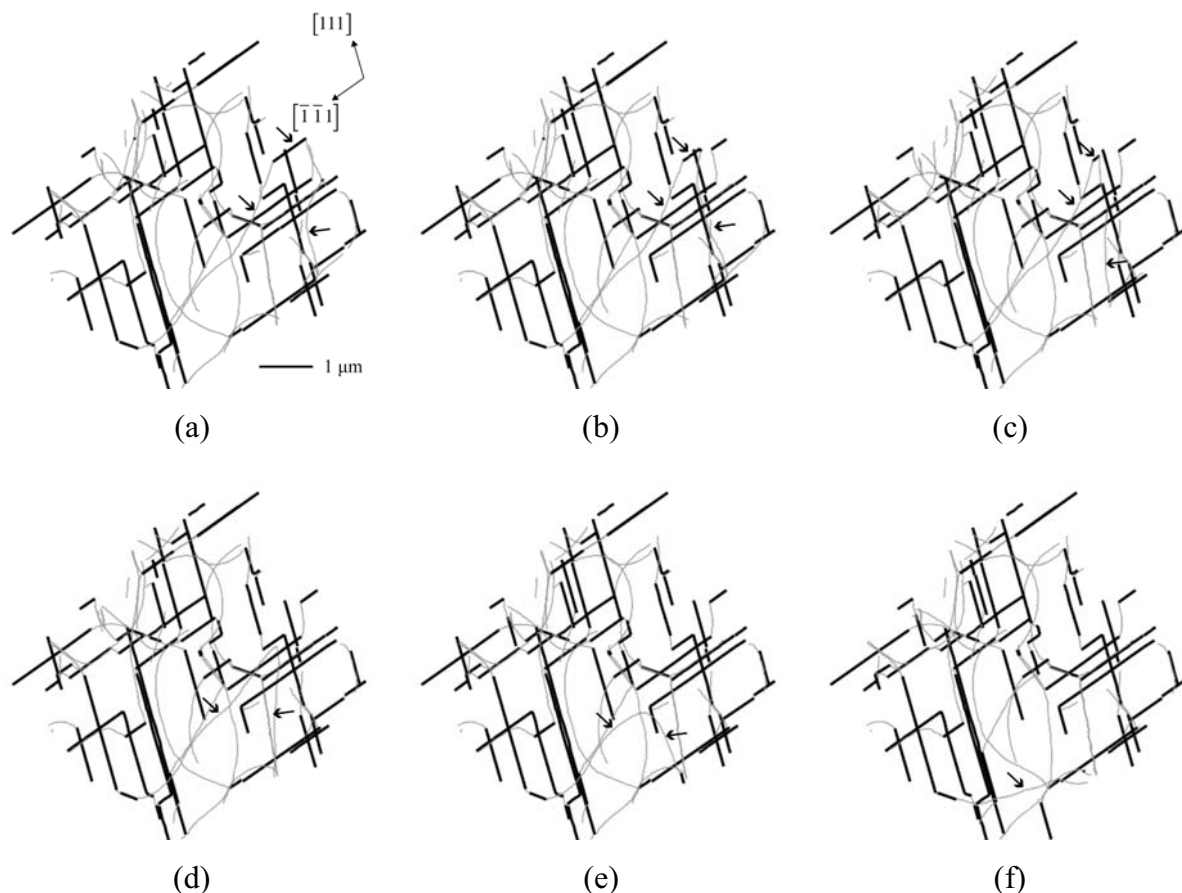


Fig. IV.18 Destruction d'une jonction. Lame mince de 5 µm d'épaisseur, orientée dans le plan $(\bar{1}10)$ (a) On observe une longue portion de dislocation courbée par la présence d'une jonction. (b)-(d) La jonction casse entre les clichés (c) et (d) sous l'effet de la contrainte. (f) La dislocation résultante est beaucoup plus courte que celle initialement observée sur le cliché (a). Les flèches indiquent les portions de dislocation concernées.

IV.2.2 Durcissement de la forêt

IV.2.2.1 Rappels théoriques

Dans le domaine athermique, et plus particulièrement en régime quasi-statique, la déformation plastique est gouvernée par les interactions locales et attractives entre dislocations glissant sur des plans sécants (*Saada 1960*). Nous avons vu précédemment que ces interactions attractives pouvaient donner lieu à la formation de jonctions. Ces interactions font obstacle au glissement des dislocations et induisent du stockage via l'immobilisation de portions de dislocation. Dans *Saada 1960*, l'auteur introduit la distance entre obstacles λ comme un paramètre clé du durcissement par interactions entre dislocations (équation (IV.7)). Ce modèle est appelé le modèle de la forêt (*Fig. IV.19*).

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{\rho_f}} \quad (\text{IV.7})$$

Où ρ_f est la densité de dislocation de la forêt.

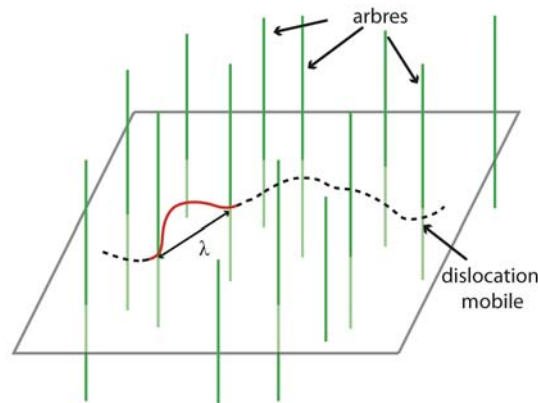


Fig. IV.19 Schéma du modèle de la forêt. Une portion de dislocation (en rouge) passe au travers de deux dislocations sécantes à son plan de glissement (en vert). λ est la distance moyenne entre les obstacles de la forêt.

La tension de ligne induite par la courbure d'une dislocation entre deux arbres est d'autant plus importante que les arbres sont rapprochés (densité de dislocation de la forêt élevée). La contrainte d'écoulement est donc intrinsèquement corrélée à la densité des dislocations obstacles. À partir de la contrainte de Frank-Read, on retrouve facilement une loi de type Taylor qui relie la contrainte d'écoulement τ à la densité de dislocation de la forêt ρ_f .

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} \quad (\text{IV.8})$$

Où α est un coefficient qui mesure l'intensité moyenne de l'ensemble des interactions entre dislocations.

Cette constante est généralement comprise entre 0 et 0,5. Elle permet d'évaluer l'intensité moyenne des interactions entre dislocations dans le régime athermique. Pour les métaux CFC, α est de l'ordre de 0,3 (*Basinski & Basinski 1979 ; Madec et al. 2002b*). Dans la structure NaCl, les mesures conduisent à des résultats compris entre 0,2 et 0,4 (*Davidge & Pratt 1964*). En l'absence d'interactions locales fortes (jonctions, annihilations, états croisés) ou dans le régime thermiquement activé, la loi de durcissement par interactions ne s'applique pas (voir *Durinck 2005* pour un exemple dans l'olivine).

Le modèle a par la suite subi une évolution majeure qui consiste à décomposer le coefficient d'interaction moyen α en une série de coefficients α_{ij} (relatif à l'intersection des plans i et j) qui permet de quantifier l'intensité de chacune des interactions définies par la matrice d'interactions (voir *Franciosi et al. 1980 ; Madec & Kubin 2004b ; Devincre et al. 2006 ; Kubin et al. 2008a ; Queyreau 2008 ; Monnet et al. 2009* pour des applications dans les métaux CFC et CC).

Dans ce travail, nous nous sommes principalement intéressés à une évaluation du facteur α moyen dans les familles de systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$.

D'après l'équation (IV.8), en supposant constante l'intensité des interactions en cours de déformation, la contrainte n'est liée qu'à la seule évolution de la densité de dislocations de la forêt pendant la déformation plastique (*Mecking & Kocks 1981 ; Kocks & Mecking 2003*). En dérivant l'équation (IV.8) par rapport au cisaillement plastique, on définit $\theta = d\tau/d\gamma$ le taux de durcissement :

$$\theta = \frac{(\alpha \mu b)^2}{2\tau} \frac{d\rho_f}{d\gamma} \quad (\text{IV.9})$$

L'évolution de la densité $d\rho_f/d\gamma$ provient de deux contributions opposées (i) les mécanismes de stockage, qui induisent l'immobilisation de portions de dislocation sous la forme de jonctions et qui augmentent la densité de dislocation (ii) les mécanismes de restauration,

comme les annihilations induites par le glissement dévié ou la montée des dislocations, qui font décroître la densité de dislocation.

IV.2.2.2 Simulations et résultats

Afin de quantifier l'influence de la densité de dislocation dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$, plusieurs simulations en masse ont été réalisées. La méthode du facteur d'échelle, introduite dans *Madec 2001*, a été appliquée aux microstructures initiales des deux simulations présentées dans la section précédente. Cette technique permet, à partir d'une simulation de référence, de générer des boîtes de simulation pour lesquelles l'ensemble des longueurs caractéristiques (principalement la taille de boîte et la longueur des dislocations) a été multiplié par un facteur d'échelle e .

Par exemple, prenons le cas d'une simulation de référence, qui dispose d'une boîte cubique de dimensions $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ et d'une densité de dislocation de $10^{12}\ \text{m}^{-2}$. Une multiplication de e d'un facteur dix induit une multiplication de la longueur de ligne de dislocation cumulée d'un même facteur dix. Néanmoins, le volume de simulation étant agrandi d'un facteur 10^3 , la densité de dislocation est divisée d'un facteur cent ($\rho=10^{10}\ \text{m}^{-2}$).

Les paramètres principaux des simulations sont présentées *Tab. IV.3*.

e	$\rho\ (\text{m}^{-2})$	$V\ (\mu\text{m}^3)$	$dt\ (\times 10^{-10}\ \text{s})$	$\dot{\epsilon}\ (\text{s}^{-1})$	$\Phi\ (\mu\text{m})$
31,6	$1\ 10^{11}$	~ 31600	2	1	0,63
10	$1\ 10^{12}$	~ 1000	0,66	10	0,20
4,47	$5\ 10^{12}$	~ 89	0,30	50	0,09
3,16	$1\ 10^{13}$	~ 32	0,066	100	0,06

Tab. IV.3 Récapitulatif des paramètres clés pour les simulations en masse. Le même jeu de paramètres a été utilisé pour les deux familles de systèmes de glissement. Les paramètres de la simulation de référence sont indiqués en gras. Le volume est indiqué pour une boîte de référence de $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$. Le paramètre Φ correspond à la longueur de discrétisation des segments appartenant aux systèmes actifs.

Augmenter la densité de dislocation à l'aide du facteur échelle permet notamment d'augmenter la vitesse de déformation. Cependant, ce paramètre doit être fixé avec attention sous peine de faire basculer le régime de déformation dans le mode dynamique (voir section

III.3.3 pour plus de détails sur les régimes dynamiques et quasi-statiques). La vitesse de déformation étant plus élevée pour les plus hautes densités, il est nécessaire de réduire le pas de temps d'intégration dt afin de préserver une résolution comparable entre chacune des simulations. Les courbes contrainte-déformation plastique obtenues, pour chacun des quatre essais, dans $\{110\}$ et $\{100\}$, sont présentées *Fig. IV.20*.

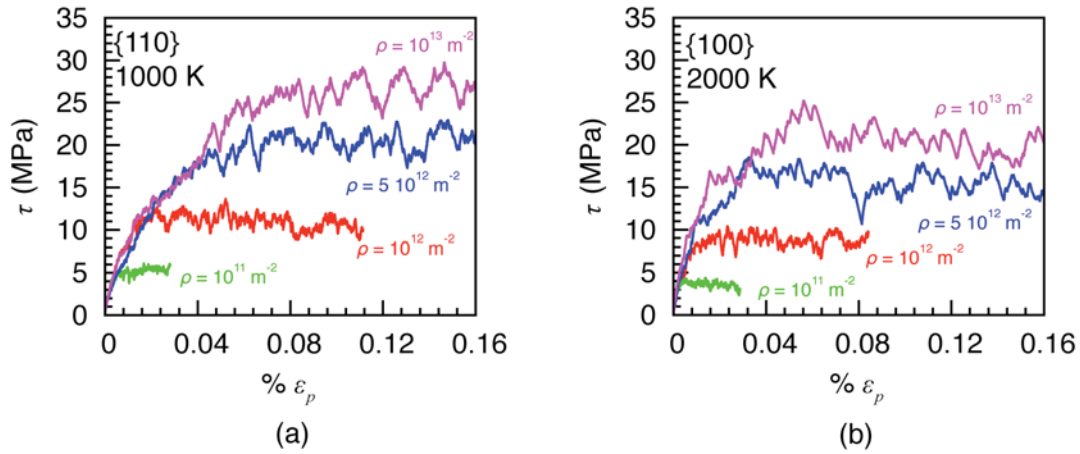


Fig. IV.20 Influence de la densité de dislocation sur la contrainte d'écoulement (a) dans $\{110\}$ (b) dans $\{100\}$. Les densités de dislocations, initialement introduites dans les volumes simulés sont : 10^{11} m^{-2} (vert), 10^{12} m^{-2} (rouge), $5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (bleu) et 10^{13} m^{-2} (rose).

Pour les deux familles de systèmes de glissement, la figure *IV.20* montre que la contrainte de cisaillement est d'autant plus élevée que la densité de dislocation initiale est importante. Néanmoins, cette dépendance n'est pas linéaire.

Pour les plus fortes densités, la contrainte d'écoulement est légèrement plus faible dans $\{100\}$ que dans $\{110\}$. Rappelons que les températures sont respectivement de 2000 K et 1000 K et qu'une telle variation induit une variation du module de cisaillement de l'ordre de 25 GPa (116,5 GPa à 1000 K et 91 GPa à 2000 K).

L'anisotropie plastique observée *Fig. IV.13* dans les simulations à 10^{12} m^{-2} de densité de dislocation est récurrente dans l'ensemble des calculs présentés. Néanmoins, on remarque qu'elle apparaît d'autant plus tardivement que la densité de dislocation est élevée.

On définit la densité de la forêt ρ_f effective, pour un plan de glissement donné, comme la densité de dislocation sécante à ce plan. Dans l'hypothèse d'une distribution de densité de dislocation homogène entre chaque plan d'une même famille de systèmes de glissement, 5/6

de la densité dans les plans $\{110\}$ et $2/3$ de celle dans $\{100\}$ font office de densité de forêt pour un plan, dans chacune des familles.

Afin de calculer des valeurs de α moyen qui intègrent chaque type d'interaction de façon équivalente, les mesures de contraintes et de densité ont été soumises au protocole suivant : (i) les mesures sont réalisées avant l'apparition de l'anisotropie plastique afin de tenir compte de l'influence de chaque système de façon équivalente (ii) le régime de vitesse de déformation imposée doit être atteint avant chaque mesure (iii) la contrainte d'écoulement doit être atteinte avant chaque mesure.

L'évolution de la contrainte de cisaillement appliquée en fonction de la densité de la forêt est présentée Fig. IV.21.

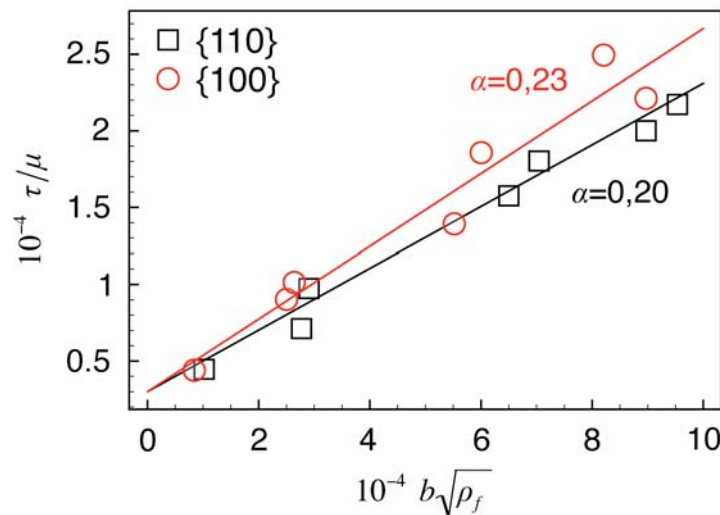


Fig. IV.21 Vérification de la loi de Taylor. L'équation Eq. (IV.8) est appliquée aux différentes simulations réalisées dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$. Les températures sont respectivement de 1000 K et 2000 K. La contrainte de cisaillement varie linéairement avec la racine de la densité de dislocation de la forêt. Le coefficient d'interaction moyen α est de l'ordre de 0,2 pour les deux systèmes de glissement.

Les courbes représentées Fig. IV.21 montrent une dépendance linéaire entre la contrainte de cisaillement et la racine carrée de la densité de dislocation de la forêt pour les deux systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. La loi de Taylor est donc vérifiée. Le coefficient α est de l'ordre de 0,2 pour les deux systèmes de glissement.

% $\Delta\varepsilon$	[0,02-0,12]	[0,02-0,04]	[0,04-0,06]	[0,06-0,08]	[0,08-0,10]	[0,10-0,12]
a, b, c	-3,38 10¹⁷	-5,45 10 ¹⁷	4,93 10 ¹⁷	7,92 10 ¹⁷	1,86 10 ¹⁸	-8,69 10 ¹⁷
	1,21 10¹⁵	1,33 10 ¹⁵	4,98 10 ¹⁴	-3,45 10 ¹⁴	-2,90 10 ¹⁵	2,46 10 ¹⁵
	9,17 10¹¹	9,00 10 ¹¹	1,06 10 ¹²	1,45 10 ¹²	2,92 10 ¹²	1,93 10 ¹¹
% ε	0,11	0,04	0,04	0,06	0,08	0,11
$\bar{\tau}$ (MPa)	11,00	11,57	11,39	11,20	10,27	10,28
$d\rho/d\gamma$ (m ⁻²)	2,09 10¹⁴	4,49 10 ¹⁴	4,46 10 ¹⁴	3,03 10 ¹⁴	4,00 10 ¹³	2,14 10 ¹⁴
θ (MPa)	461	942	950	656	94	505
μ/θ	253	124	123	177	1233	231

Tab. IV.4 Calculs du coefficient θ dans les plans $\{110\}$ à 1000 K. La densité est ajustée à l'aide d'un polynôme du second degré de la forme $\rho(\varepsilon)=a\varepsilon^2+b\varepsilon+c$ sur des intervalles $\Delta\varepsilon$. On en déduit $d\rho/d\gamma=S(2a\varepsilon+b)$ pour une valeur de déformation donnée (S =facteur de Schmid). $S=0,5$ dans les plans $\{110\}$ actifs pour une sollicitation $<100>$. Les valeurs de θ et de μ/θ sont déduites de l'équation (IV.9) pour laquelle la contrainte $\bar{\tau}$ est moyennée sur l'intervalle $\Delta\varepsilon$. $\alpha=0,2$ et $\mu=116,5$ GPa.

% $\Delta\varepsilon$	[0,02-0,12]	[0,02-0,04]	[0,04-0,06]	[0,06-0,08]	[0,08-0,10]	[0,10-0,12]
a, b, c	-3,76 10¹⁴	-2,02 10 ¹⁸	1,17 10 ¹⁸	-1,18 10 ¹⁸	-2,80 10 ¹⁸	9,11 10 ¹⁷
	1,18 10¹⁵	2,53 10 ¹⁵	-4,88 10 ¹⁴	2,73 10 ¹⁵	6,04 10 ¹⁵	-3,82 10 ¹⁴
	9,62 10¹¹	7,42 10 ¹¹	1,36 10 ¹²	4,59 10 ¹¹	-1,14 10 ¹²	1,57 10 ¹²
% ε	0,11	0,04	0,04	0,08	0,08	0,10
$\bar{\tau}$ (MPa)	8,78	9,01	8,70	8,63	8,61	8,98
$d\rho/d\gamma$ (m ⁻²)	4,15 10¹⁴	3,24 10 ¹⁴	3,10 10 ¹⁴	2,99 10 ¹⁴	5,52 10 ¹⁴	5,09 10 ¹⁴
θ (MPa)	700	532	527	514	949	839
μ/θ	130	171	173	177	96	108

Tab. IV.5 Calculs du coefficient θ dans les plans $\{100\}$ à 2000 K. La densité est ajustée à l'aide d'un polynôme du second degré de la forme $\rho(\varepsilon)=a\varepsilon^2+b\varepsilon+c$ sur des intervalles $\Delta\varepsilon$. On en déduit $d\rho/d\gamma=S(2a\varepsilon+b)$ pour une valeur de déformation donnée (S =facteur de Schmid). $S=\sqrt{2}/4$ dans les plans $\{100\}$ actifs pour une sollicitation $<110>$. Les valeurs de θ et de μ/θ sont déduites de l'équation (IV.9) pour laquelle la contrainte $\bar{\tau}$ est moyennée sur l'intervalle $\Delta\varepsilon$. $\alpha=0,2$ et $\mu=91$ GPa.

En ajustant les courbes de densité de dislocation sur un intervalle de cisaillement plastique donné à l'aide d'un polynôme du second degré, on définit $d\rho/d\gamma$ pour une valeur de γ fixée. En prenant une valeur de α moyen égale à 0,2, on peut calculer des valeurs de θ à partir de l'équation (IV.9). Les tableaux IV.4 et IV.5 récapitulent les principaux résultats relatifs à ce calcul, respectivement pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Les calculs sont réalisés à partir des simulations à 10^{12} m^{-2} de densité de dislocation initiale. Ces valeurs seront discutées section IV.4.1.

IV.3 Introduction à la déformation dans le régime de friction de réseau

Cette dernière section est consacrée au régime thermiquement activé. Elle s'appuie sur des observations tirées de calculs de DD dans MgO et dans le fer- α (travaux réalisés pendant ma thèse en collaboration avec B. Devincere, Laboratoire d'Etudes des Microstructures (LEM), ONERA/CNRS, Châtillon). Le fer- α est un matériau à forte friction de réseau. Il dispose d'une structure CC. Son système de glissement principal est $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$. La contrainte de Peierls expérimentale pour ce système est de 350 MPa et la température athermique de l'ordre de 300 K (Aono *et al.* 1979 ; Kuramoto *et al.* 1979). Il existe un second système de glissement dans le fer, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{112\}$. Ce système de glissement est plus dur et ne sera pas abordé dans cette étude. Peu d'études ont été menées, à l'aide de la Dynamique des Dislocations, sur le fer- α à basse température. Elles ont été principalement réalisées par M. Tang (Tang *et al.* 1998, 1999, 2001 ; Tang & Kubin 2001) et S. Naamane (Naamane 2008 ; Naamane *et al.* 2010), toujours en étroite collaboration avec le LEM. On notera aussi le travail de J. Chaussidon (Chaussidon *et al.* 2006, 2008, 2010). Malgré ces avancées, l'étude du comportement collectif des dislocations dans le fer à basse température reste un sujet ouvert, sur lequel de nombreuses questions restent sans réponse (mobilité des dislocations, influence du champ de contrainte à longue distance, durcissement, etc.)

IV.3.1 Dislocations vis et interactions locales

IV.3.1.1 Généralités

Au cours du chapitre III, section III.3, nous avons montré que, dans le régime thermiquement activé, la déformation était accommodée par le glissement des dislocations vis. Contrairement au régime athermique pour lequel les dislocations sont indifférenciées en termes de caractère et glissent de façon discontinue mais rapide ($\sim m/s$) ; les dislocations vis, au-dessous de T_a , glissent lentement ($\sim \mu m/s$), de façon collective et continue (absence d'avalanches). Ces propriétés sont valables à la fois pour α -Fe et pour MgO.

Dans *Louchet et al. 1979*, les auteurs ont observé au MET des lames minces de niobium (structure CC) déformées à basse température, dans le régime de friction. Des jonctions entre dislocations ont été vues ; elles sont courtes et présentes en faible proportion. Les travaux de *Keh & Weissman (1963)* montrent que la friction de réseau induit une diminution du durcissement de la forêt et que la loi de durcissement par interactions n'est plus vérifiée dans le régime thermiquement activé. Néanmoins, l'étude réalisée en DD par *Naamane (2008)* ne montre qu'une très faible réduction de la taille des jonctions dans le régime thermiquement activé.

Les cartographies d'interactions dans la structure CC sont présentées dans *Kubin et al. 2003* ou encore dans *Perrera Da Costa 2004*. Quatre interactions entre systèmes $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ sont possibles, dont trois jonctions : la jonction « mixte symétrique », la jonction « mixte asymétrique » et la jonction « coin ». Le dernier type d'interaction concerne des annihilations colinéaires.

Les coefficients d'interactions α_{ij} relatifs aux différentes jonctions ont été calculés dans le régime athermique (*Madec & Kubin 2004a* ; *Queyreau et al. 2009*). Ces deux études arrivent à la même conclusion : la jonction mixte symétrique induit le plus fort durcissement. Nous nous intéresserons plus particulièrement à cette jonction dans la suite de cette étude.

Comme le rappellent les auteurs dans *Kubin et al. 2003*, les cartographies d'interactions (prises dans leur intégralité) n'ont que peu d'intérêt dans le régime thermiquement activé puisque les dislocations vis sont prépondérantes. Dès lors, les cartographies peuvent être réduite à quelques couples (ϕ_1, ϕ_2) , caractéristiques de l'orientation vis des dislocations mères. La véritable question est : est-ce que l'interaction entre dislocation vis et un arbre vis donne lieu à une jonction dans MgO ou dans le fer ?

Reprenons le cas de l'interaction entre les systèmes 2 et 4 dans MgO, vue dans la section IV.1.2.1. Potentiellement, elle permet la formation de la seule jonction possible entre dislocations issues des plans $\{110\}$. La jonction est orientée suivant la direction coin $[1\bar{1}1]$. En $\phi_1 = \phi_2 = 0$, les deux dislocations mères sont orientées suivant la direction de jonction. Étant donné leur vecteur de Burgers, il s'agit de dislocations coins. Ce qui signifie que les interactions entre dislocations vis sont caractérisées par les couples $(\phi_1, \phi_2) = \left(\pm \frac{\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2}\right)$.

La figure IV.22 montre bien que ces configurations ne contribuent qu'à la formation d'états attractifs ou répulsifs. La même propriété a été vérifiée dans les plans $\{100\}$ sur la cartographie d'interactions 8-9 (Fig. IV.5). De manière analogue, aucune jonction mixte symétrique ne peut être issue de l'interaction entre deux dislocations vis dans la structure CC.

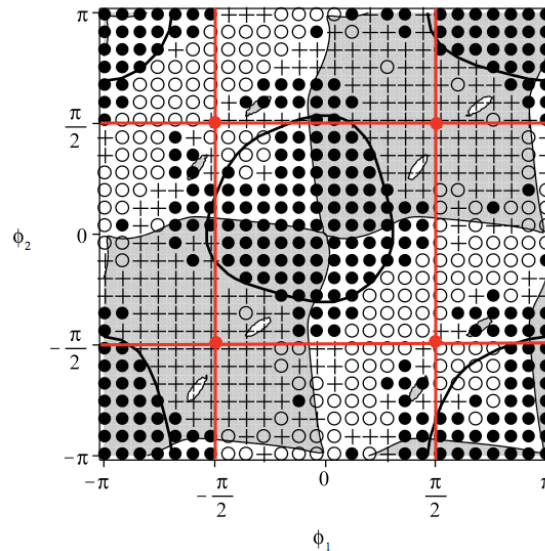


Fig. IV.22 Cartographie d'interactions 2-4 dans les plans $\{110\}$ de MgO. Les directions vis des dislocations sont représentées par les traits rouges. Les interactions vis-vis ne contribuent pas à la formation de jonction.

Théoriquement, dans le régime thermiquement activé, les jonctions ne devraient se former ni dans le fer, ni dans MgO. Néanmoins, cette hypothèse n'est valable que si les dislocations restent pures vis ce qui n'est vrai qu'à très faible température. De plus, lorsqu'elles se rapprochent l'une de l'autre, deux dislocations peuvent se courber sous l'effet de leur champ de contrainte respectif, et donc induire un autre type d'interaction que l'interactions vis-vis. Une fois de plus, cette propriété n'a de sens que si la friction de réseau n'est pas assez forte pour empêcher la courbure. Donc finalement, au-delà de l'interactions vis-vis, il nécessaire de réaliser des tests concernant l'influence de la friction de réseau sur la formation des jonctions, indépendamment du caractère des dislocations mères.

Afin d'étudier de manière qualitative l'influence de la friction de réseau, deux séries de tests ont été menées sur l'interaction 8-9 (jonction issue de l'intersection entre deux plans $\{100\}$). Pour les deux séries, les portions de dislocations choisies sont les segments (i) 57 (voir base de vecteurs dans l'annexe 1), segment de caractère vis, direction $[\bar{1}10]$ dans le plan (001) (ii) 70, segment mixte, aligné suivant la direction de jonction potentielle $[0\bar{1}0]$, dans le plan (100). Pour chaque calcul, la vitesse des dislocations est thermiquement activée (voir sections II.3.5.1 et III.3.1). La première série de calculs consiste en un essai de relaxation (à contrainte appliquée nulle) à des températures comprises entre 200 K et 1200 K. La seconde série tient compte de l'influence de la contrainte sur la formation des jonctions.

IV.3.1.2 Tests de relaxation

Au début du calcul, les deux dislocations sont droites et se croisent en leur milieu. On laisse ensuite relaxer la configuration qui mène à la formation de la jonction. La mobilité des bras de jonction est activée thermiquement et rend compte de l'influence de la friction de réseau sur l'interaction. Le premier résultat provenant de ces simulations est que, si l'orientation des dislocations mères est favorable à la formation d'une jonction, elle se formera de la même façon quelle que soit la température. Néanmoins, le temps de relaxation δ nécessaire pour atteindre une configuration de jonction stable augmente lorsque l'on baisse la température (Fig. IV.23).

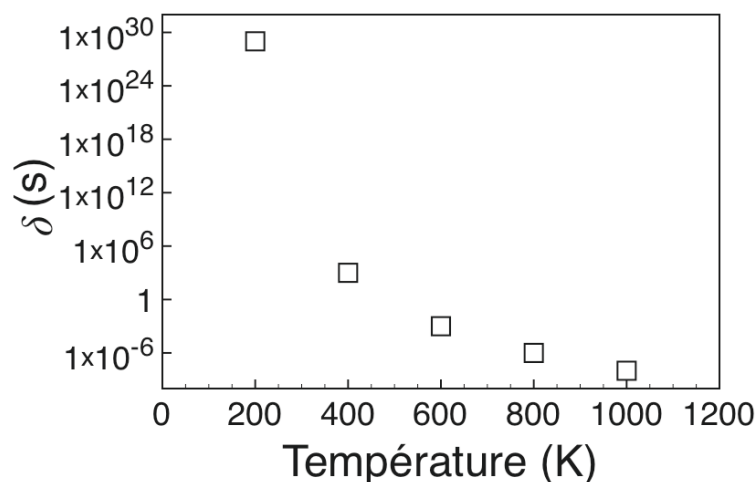


Fig. IV.23 Temps caractéristique de formation d'une jonction dans le régime thermiquement activé. Le calcul est réalisé à l'aide de deux dislocations issues des systèmes 8 et 9 (famille de plans $\{100\}$) dans MgO.

Le temps caractéristique δ est calculé comme le pas de temps d'intégration nécessaire en DD pour rejoindre la configuration stable de jonction en 10 000 pas de calculs. Il varie de 10^{-6} s à haute température à 10^{30} s à 200 K. À basse température, la mobilité des bras de jonction est réduite par la friction de réseau, ce qui induit une augmentation du temps de formation de la jonction. Cette propriété est en accord avec les observations expérimentales.

IV.3.1.3 Tests avec contrainte

Les dislocations utilisées pour les tests avec contrainte sont les mêmes que celles des tests de relaxation. Néanmoins, on notera deux changements important par rapport à cette première phase de test : (i) la dislocation mixte est soumise à un chargement qui n'est pas vu par la dislocation vis. Cette dernière agit donc comme un arbre statique (ii) les dislocations ne sont initialement plus en contact. Elles sont éloignées l'une de l'autre de telle sorte que la dislocation mobile puisse se courber, sous l'effet de la contrainte, avant l'interaction. Les calculs ont été réalisés à 300 K et 1000 K pour des contraintes de cisaillement respectives de 915 MPa et 50 MPa (les contraintes sont de l'ordre de la CRSS aux deux températures).

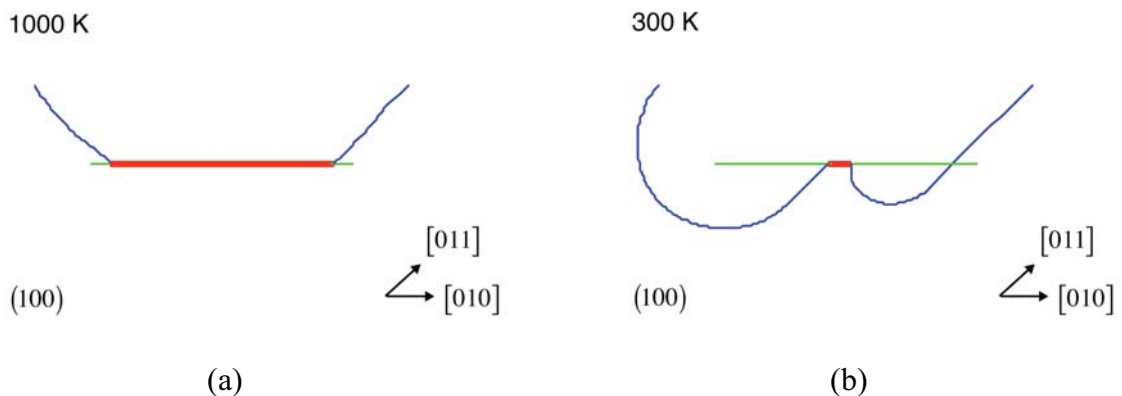


Fig. IV.24 Formation d'une jonction sous contrainte dans MgO à (a) 1000 K et (b) 300 K. Orientation suivant le plan (100). La dislocation soumise au chargement est représentée en bleu. L'arbre est en vert. La jonction est représentée en rouge.

La figure IV.24 montre que la longueur de la jonction varie entre les deux calculs. La jonction est beaucoup plus grande à 1000 K (température légèrement inférieure à $T_a=1200$ K, faible friction de réseau) qu'à 300 K où la friction de réseau est plus importante dans les plans $\{100\}$ de MgO. Sur la figure IV.24b, on remarque l'orientation préférentielle de la dislocation mobile suivant la direction vis $[011]$. La mobilité des portions vis étant plus faible que celle

des coins dans le régime thermiquement activé, on observe que la rigidité de ces dernières s'oppose à la formation de la jonction suivant [010]. Enfin, les deux bras de jonction s'orientent suivant la direction vis. À terme, leur déplacement relatif va induire la réduction puis la destruction de la jonction. Ce test qualitatif soutient donc l'hypothèse selon laquelle la friction de réseau induit une réduction de la taille des jonctions.

IV.3.2 Simulations en masse dans le domaine thermiquement activé

IV.3.2.1 Jonctions et microstructures

Les observations présentées dans la section précédente laissent présager que, dans le régime de friction de réseau, les jonctions sont de taille inférieure à celle observée pour $T > T_a$. Par conséquent, elles devraient induire un durcissement moins important que dans le régime athermique. Les travaux réalisés dans le fer à basse température en DD ne vont pas entièrement dans ce sens (*Naamane 2008*). Dans ses travaux de thèse, *S. Naamane* arrive aux conclusions suivantes (i) le durcissement induit par la forêt décroît lorsque la température diminue dans le régime thermique (ii) il est d'autant plus fort que la densité de dislocation de la forêt est importante (iii) la taille moyenne et le nombre de jonctions ne varient pas avec la température. Cette dernière propriété est en contradiction avec les observations expérimentales (*Louchet et al. 1979 ; Obrlik et al. 2005*) et avec nos analyses préliminaires. En émettant l'hypothèse d'une erreur commise sur la statistique des jonctions, les calculs réalisés par *S. Naamane* dans le fer ont été refaits pendant ma thèse en intégrant au préalable une modification à *microMegas*. En effet, en collaboration avec *B. Devincere* du LEM, nous avons développé une nouvelle routine (disponible dans le module *Histo* du code) qui permet de calculer le nombre et la longueur exacte de jonctions à chaque pas de sauvegarde du calcul. En simple, cette procédure agit de manière itérative, isole un segment de dislocation en jonction, et teste successivement ses premiers, deuxièmes ... n -ièmes voisins jusqu'à trouver un segment de dislocation qui n'est pas caractérisé comme un segment en jonction. La jonction est alors indexée et ses propriétés sont gardées en mémoire (longueur de jonction, nombre et indices des segments qui la composent, systèmes de glissement concernés, etc.).

Les conditions de simulations ayant largement été détaillées dans *Naamane 2008* et *Naamane et al. 2010*, nous n'en préciserons ici que l'essentiel. Comme dans la section du chapitre III relative au régime thermiquement activé, on utilise des dislocations vis rendues « infinies »

grâce aux conditions limites périodiques. Quatre dislocations vis infinies ($\rho=6,9 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$) sont distribuées dans le système $\frac{1}{2}[110](\bar{1}\bar{1}1)$, alors que des dislocations vis de la forêt sont distribuées dans les systèmes $\frac{1}{2}[0\bar{1}1](111)$ et $\frac{1}{2}[\bar{1}0\bar{1}](11\bar{1})$. Les intersections entre le système primaire et les systèmes de la forêt peuvent donner lieu à la formation d'un unique type de jonction de la structure CC : la jonction mixte symétrique. La jonction mixte symétrique est orientée suivant $[\bar{1}11]$ et dispose d'un vecteur de Burgers de type $\frac{1}{2}[0\bar{1}0]$. Elle représente l'interaction de type jonction la plus forte dans la structure CC (*Madec & Kubin 2004a ; Queyreau et al. 2009*). Deux densités de forêt, réparties de façon homogène entre les deux systèmes, ont été testées : $6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ et $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Le volume des boîtes de simulation est de $V=5\mu\text{m} \times 5\mu\text{m} \times 5\mu\text{m}$, de telle sorte que la longueur initiale des sources du système primaire soit de $8,7 \mu\text{m}$ et de $5 \mu\text{m}$ pour celles de la forêt.

Les essais sont réalisés à vitesse de déformation imposée, à des températures comprises entre 50 K et 250 K ($T_a=300 \text{ K}$). La vitesse de déformation est fixée de telle sorte que la vitesse des dislocations vis mobiles soit de l'ordre du $\mu\text{m/s}$. La figure IV.25 illustre des microstructures représentatives de ces simulations. D'autres micrographies sont disponibles dans *Naamane 2008* et *Naamane et al. 2010*.

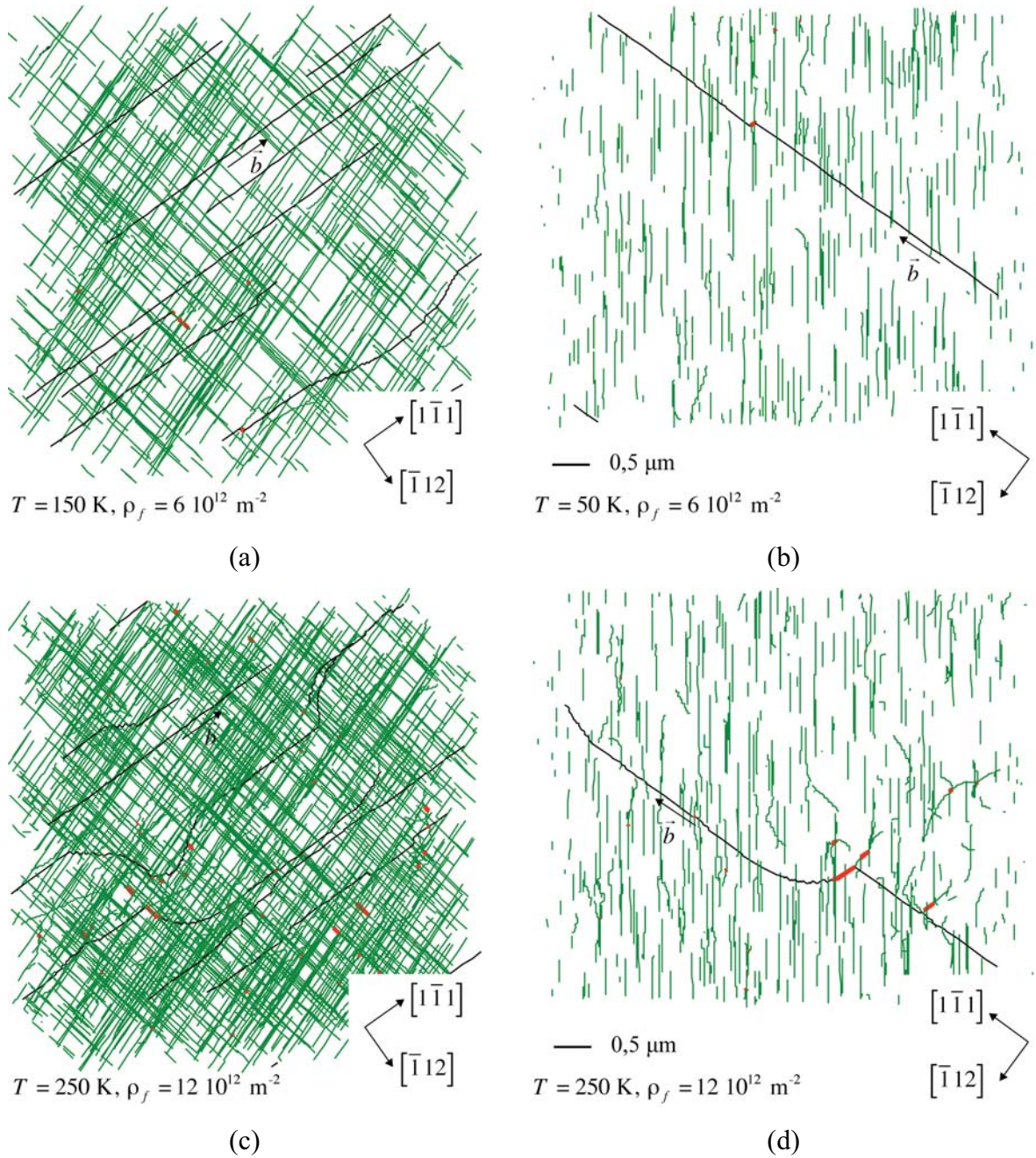


Fig. IV.25 Microstructures des dislocations dans le régime athermique. Application au fer- α . Les dislocations mobiles sont représentées en noir, la forêt en vert et les jonctions en rouge. (a) vue d'ensemble du volume simulé, suivant la direction $[111]$, à 150 K , $\rho_f = 6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. (b) lame mince de $1 \mu\text{m}$ d'épaisseur orientée suivant le plan de glissement $(\bar{1}\bar{1}1)$ des dislocations mobiles. $T = 50 \text{ K}$, $\rho_f = 12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. (c) Vue d'ensemble du volume simulé à 250 K (orientation $[111]$), $\rho_f = 12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. (d) lame mince de $1 \mu\text{m}$ d'épaisseur orientée dans la plan de glissement $(\bar{1}\bar{1}1)$ des dislocations mobiles, $T = 250 \text{ K}$, $\rho_f = 12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

On remarque que, quelle que soit la densité de la forêt, les dislocations mobiles sont plus courbées à 250 K qu'elles peuvent l'être aux plus basses températures (*Fig. IV.25*). De plus, très peu de jonctions sont observables à 50 K et 100 K alors qu'elles semblent plus nombreuses à 150 K et 250 K. Dans ces deux dernières simulations, on remarque aussi que les bras de jonctions sont courbes contrairement aux plus faibles températures.

Les statistiques sur la longueur moyenne des jonctions \bar{l}_j et leur nombre N_j confirment nos premières hypothèses : dans le régime thermiquement activé, la taille et le nombre de jonctions sont plus importants à haute température qu'à basse température (*Fig. IV.26*).

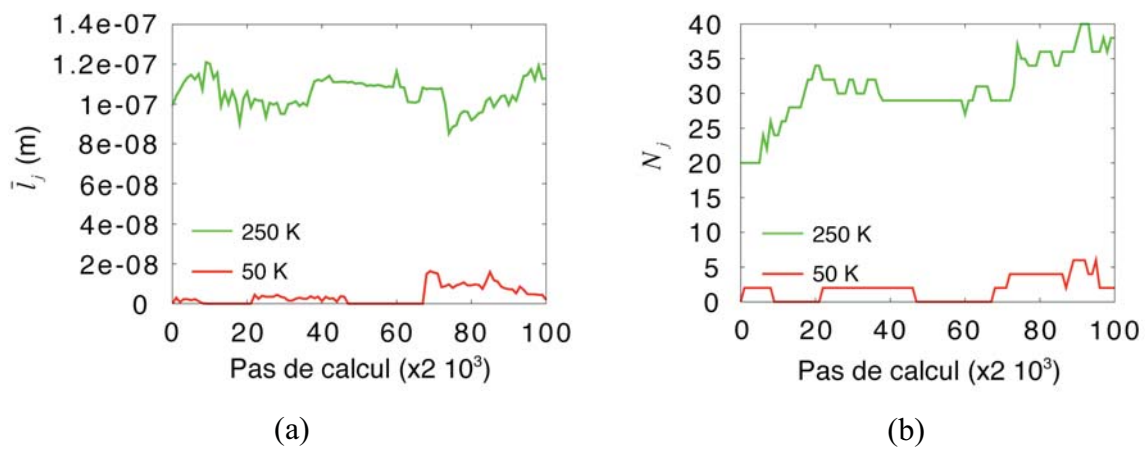


Fig. IV.26 Longueur et nombre de jonctions. Les mesures ont été réalisées sur $2 \cdot 10^5$ pas de calcul. $\rho_f = 6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$.
(a) La longueur moyenne des jonctions dans les simulations à 50 K (en rouge) et 250 K (en vert) (b) Nombre de jonctions dans les simulations à 50 K (en rouge) et 250 K (en vert).

La figure *IV.27* permet une analyse plus approfondie des résultats présentés *Fig. IV.26*. En effet, à l'aide du module programmé dans *Histo*, il est maintenant possible avec *microMegas* de réaliser des histogrammes N_j-l_j sur un intervalle de mesure. Cela permet de calculer le nombre N_j de jonctions de longueur l_j apparues pendant toute une simulation (ou sur un intervalle de pas de calculs donné). On remarque que le nombre de jonctions formées, sur un intervalle de $2 \cdot 10^5$ pas de calculs, est un ordre de grandeur plus important dans les simulations pour lesquelles la densité de la forêt est la plus élevée (*Fig. IV.27b*).

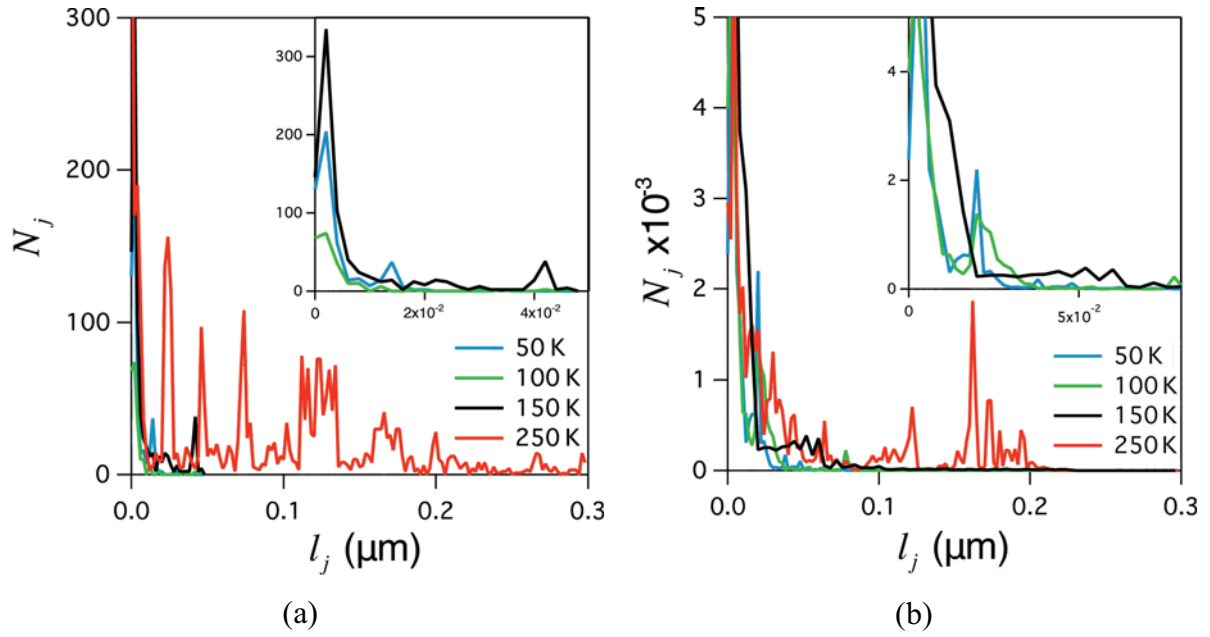


Fig. IV.27 Histogrammes de jonctions. (a) $\rho_f = 6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (b) $\rho_f = 12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. L'encart correspond à un agrandissement sur les plus basses températures qui donnent lieu à des jonctions plus petites.

De plus, comme le montrent déjà les résultats présentés Fig. IV.26a, la longueur des jonctions formées est d'autant plus grande que la température est élevée. Les longueurs moyennes de jonction aux quatre températures et pour les deux densités de forêt sont présentées Tab. IV.6. Elles n'excèdent pas les $0,1 \mu\text{m}$, ce qui est en accord avec les mesures de Queyreau *et al.* 2009 qui prévoient des longueurs de jonction de l'ordre de $0,2\text{-}0,3 \mu\text{m}$ dans le régime athermique (pour lequel des jonctions plus longues sont attendues).

	T (K)				$\rho_f (\text{m}^{-2})$
	50	100	150	250	
	5	6	9	93	
$\bar{l}_j (\text{nm})$	5	6	9	93	$6 \cdot 10^{12}$
	9	11	11	52	$12 \cdot 10^{12}$

Tab. IV.6 Longueur moyenne de jonction. Les calculs sont présentés à 50 K, 100 K, 150 K et 250 K pour les deux densités de dislocations de la forêt. Les calculs sont moyennés sur l'intervalle de mesure introduit précédemment.

IV.3.2.2 Application au modèle de Louchet et al. 1979

Sur la base d'observations *in situ* réalisées en MET dans le niobium, *F. Louchet* et collaborateurs ont mis en place un modèle de durcissement induit par la forêt dans le régime thermiquement activé. Dans ce modèle, les dislocations mobiles sont ancrées sur les arbres de la forêt par l'intermédiaire de sections efficaces très courtes, voir ponctuelles. Entre deux points d'ancrage, la portion vis de la dislocation continue d'avancer grâce au mécanisme de nucléation-propagation de double-décrochements. Ces double-décrochements viennent s'accumuler sur les points d'ancrage, ce qui entraîne la formation de portions non-vis plus ou moins courbées en fonction de la température. Deux régimes critiques de franchissement d'obstacles sont décrits (*Fig. IV.28*).

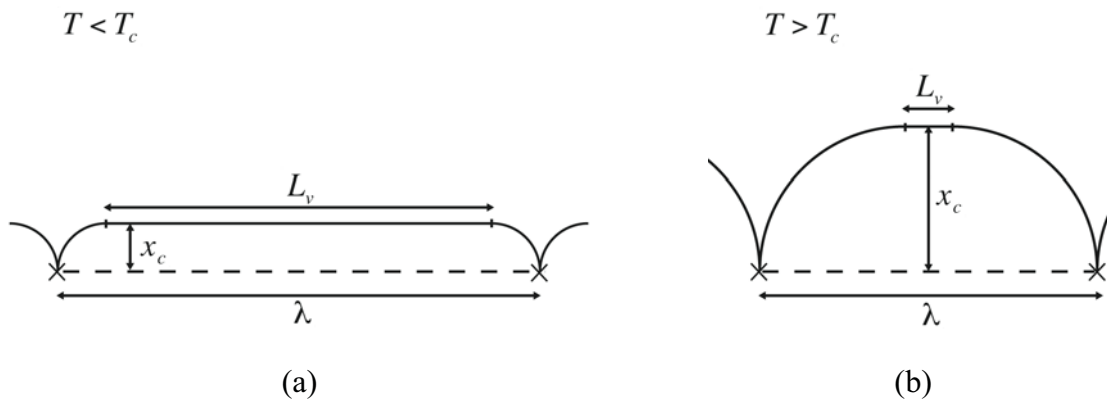


Fig. IV.28 Dislocation vis en interaction avec deux arbres de la forêt. (a) $T < T_c$. (b) $T > T_c$. L_v correspond à la longueur de la portion vis, x_c est la distance critique avant décrochement de l'arbre et λ est la distance entre obstacle.

Les deux régimes se différencient par une température de transition T_c . On appelle x_c la distance limite parcourue par la portion vis L_v jusqu'au franchissement de l'obstacle. Pour $T < T_c$, c'est le déplacement de la portion vis L_v entre les deux obstacles qui gouverne le franchissement. Pour $T > T_c$, L_v est faible et la dislocation est courbée entre deux obstacles. C'est le déplacement des portions non-vis qui gouverne le franchissement des obstacles dans ce régime de température.

Les mesures de x_c , réalisées dans *Louchet & al. 1979*, sont de première importance puisqu'elles permettent de définir précisément la longueur caractéristique L qui apparaît dans la loi de mobilité thermiquement activée (équation (II.28)) et de modéliser la déformation plastique via l'équation d'Orowan. Lorsque x_c est petit devant L_v , la longueur de la portion vis

est comparable à la distance entre obstacles λ . Cette simplification revient à négliger la courbure des portions de dislocation non-vis et à ne les considérer que comme des segments purement coins. La surface S balayée par la dislocation vis entre un ancrage et un désancrage est alors égale au produit $L_v \cdot x_c$. Par définition, S est l'inverse de la densité surfacique de la forêt ρ_f . L_v est alors définie par l'équation (IV.10).

$$L_v = \frac{1}{\rho_f x_c} \quad (\text{IV.10})$$

Dans le cadre de l'hypothèse $x_c \ll L_v$, on peut évaluer une valeur moyenne \bar{x}_c , à partir de la densité de dislocation non-vis ρ_{nv} et du nombre de jonctions N_j mesurés en DD. Sachant que la longueur de ligne non-vis est égale au produit $V \cdot \rho_{nv}$ et que chaque portion vis est ancrée sur deux arbres, \bar{x}_c est définie par l'équation (IV.11).

$$\bar{x}_c = \frac{V \rho_{nv}}{2N_j} \quad (\text{IV.11})$$

De manière analogue, on peut définir \bar{L}_v comme le rapport entre la longueur totale de ligne vis $V \cdot \rho_v$ et le nombre de jonctions N_j .

Nous avons appliqué l'équation (IV.11) aux simulations présentées figures IV.25 et IV.27. Des valeurs de \bar{x}_c ont été calculées à chaque pas de sauvegarde, puis moyennées sur l'ensemble de chaque simulation. Les résultats aux quatre températures et pour les deux densités de dislocation de la forêt testées sont présentées Fig. IV.29, conjointement aux mesures issues de *Louchet et al. 1979*.

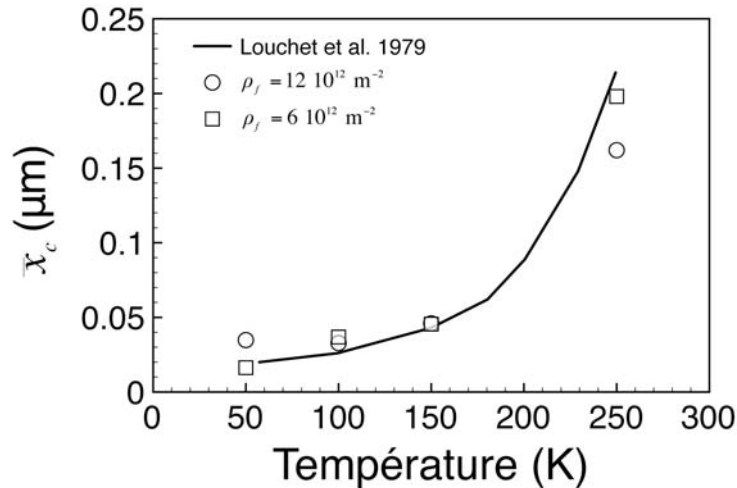


Fig. IV.29 Calculs de \bar{x}_c . L'équation (IV.11) est appliquée aux simulations de DD dans le régime thermiquement activé à 50 K, 100 K, 150 K et 250 K, pour deux densités de forêt $6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (carrés) et $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (cercles). Le trait plein correspond aux mesures de Louchet et al. 1979.

Les valeurs de \bar{x}_c expérimentales et calculées sont faibles à basse température ce qui souligne le fait que, en l'absence de courbure à basse température, les points d'ancrage ne résistent pas aux déplacements des portions vis. À 250 K, les valeurs sont un peu plus élevées et notre calcul commence à s'éloigner des données expérimentales. La différence est d'autant plus grande que la densité de forêt prise en compte est élevée. L'équation de base du modèle de Louchet n'est plus justifiée car les sections non-vis deviennent importantes⁴. Néanmoins, les valeurs fournies par le modèle restent assez proches des mesures expérimentales pour la gamme de densité de forêt simulée.

⁴ Tout ces aspects sont discutés dans le cas plus simple du durcissement par précipitation à froid dans Monnet et al. 2011.

IV.4 Discussion

IV.4.1 Microstructure et durcissement dans le régime athermique

À haute température, les interactions locales entre dislocations contrôlent la microstructure et la déformation. La matrice d'interaction (*Tab. IV.2*) montre qu'il existe principalement deux types de jonctions coins $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ dans MgO (i) un type de jonctions issues de l'intersection entre plans $\{110\}$ qui forment un angle de $60^\circ/120^\circ$. Elle sont orientées suivant $\langle 111 \rangle$ et sont sessiles dans les plans $\{112\}$ (ii) un second type de jonctions orientées suivant $\langle 100 \rangle$ et glissiles dans les plans $\{110\}$. Elle est issue de l'intersection entre plans $\{100\}$ à 90° . Notons que les jonctions issues de l'intersection entre plans $\{100\}$ ne sont pas considérées comme glissiles par *mM*. Elles ne peuvent pas glisser pendant les simulations. Pour les simulations en masse dans les plans $\{100\}$, l'axe de sollicitation $\langle 110 \rangle$ impose des facteurs de Schmid de 0,25 dans les plans $\{110\}$ et de $\sim 0,35$ dans les plans $\{100\}$. La contrainte projetée est donc 30% plus faible dans les plans $\{110\}$ que dans $\{100\}$ alors que leur contrainte d'écoulement à haute température est comparable (voir section III.3.3). De plus, la petite taille des jonctions ne favorise pas leur glissement par rapport aux autres dislocations. D'après ces deux arguments, on peut supposer que ce biais introduit par le code n'a que peu d'influence sur les résultats de nos simulations.

Les cartographies de ces deux interactions sont représentées *Fig. IV.3b* et *Fig. IV.5*. On remarque que la taille des lobes de jonction et le nombre de configurations géométriques favorables (de l'ordre de 40%) sont comparables entre les deux calculs.

Les jonctions issues de l'intersection entre plans $\{110\}$ de MgO (ou de la structure NaCl) ont été décrites dans la littérature dans *Kear et al. 1959* ; *Copley & Pask 1965* ou encore *Nakada & Keh 1969*. L'influence de ces jonctions sur l'activation préférentielle de certains systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ a été discutée à plusieurs reprises dans la littérature (voir *Fig. I.15*) et montre que MgO se déforme via l'activation d'un unique couple de systèmes conjugués (*Hulse & Pask 1960* ; *Day & Stokes 1960* ; *Copley & Pask 1965*).

L'activation des plans $\{100\}$ a très peu été étudiée d'un point de vue microstructural. On notera néanmoins les travaux de *Copley & Pask (1965)* qui ont souligné un durcissement plus important dans $\{100\}$ que dans $\{110\}$ entre 1000 K et 2000 K.

La microstructure initiale, que nous avons utilisé dans les simulations réalisées dans le régime athermique, est composée de sources de Frank-Read de tailles relativement importantes ($10\ \mu\text{m}$ pour la simulation de référence à $10^{12}\ \text{m}^{-2}$ de densité de dislocation initiale). Nous avons fixé une longueur de source relativement grande de façon à ce que la contrainte plateau ne soit pas gouvernée par la contrainte d'ouverture des sources mais bien par la contrainte de la forêt. Ce choix induit néanmoins la formation de jonctions longues en début de simulation qui voient leur longueur réduire pendant la déformation. \bar{l}_j vaut $0,6\ \mu\text{m}$ dans les simulations à $5\ 10^{12}\ \text{m}^{-2}$ de densité ; $0,4\ \mu\text{m}$ pour les simulations à $\rho=10^{13}\ \text{m}^{-2}$. Les dimensions sont du même ordre pour les simulations dans les deux familles de système de glissement. Finalement, il est probable que la formation de longues jonctions en début d'expérience n'ait que peu d'influence sur les mesures de durcissement ; comme les jonctions sont petites par rapport à la taille initiale des sources, la longueur des bras de jonction (qui gouverne la rupture des jonctions) n'est sûrement que très peu affectée par leur dimension. Enfin, la saturation de la densité de jonction observée (*Fig. IV.11*) et plus particulièrement l'apparition du mécanisme d'avalanche dans le régime athermique confirment que la déformation est gouvernée par un mécanisme de formation-destruction des jonctions.

Dans le régime athermique, les simulations en masse montrent que la déformation est très vite accommodée par un système de glissement, voir un couple de systèmes (voir section *IV.2.1.1*). Nous avons montré que cette propriété était directement liée à la formation des jonctions mais aussi à la distribution initiale des dislocations dans la boîte de simulation. Si ces deux arguments répondent directement aux observations expérimentales⁵, il n'en reste pas moins que nos simulations, réalisées dans des volumes microscopiques, souffrent d'une statistique réduite. Néanmoins, les mécanismes de déformation et leurs conséquences sur l'anisotropie plastique observée à l'échelle mésoscopique semblent à même de justifier les observations expérimentales.

Dans les simulations pour lesquelles uniquement les plans $\{110\}$ sont activés, nous avons remarqué une densification le long des directions $\langle 111 \rangle$, liée à la formation des jonctions à l'intersection entre les plans de glissement, ce qui confirme les observations de *Washburn et al. 1960*.

⁵ Dans *Day & Stokes (1964)*, les auteurs font directement référence à l'influence de la microstructure initiale sur les systèmes de glissement activés et favorisés dans leurs essais.

Les mesures de durcissement de la forêt, dans des simulations en masse, sont très délicates à réaliser et encore plus à interpréter. Elles ont pour but d'évaluer l'intensité moyenne α des interactions entre dislocations, mais l'apparition rapide de l'anisotropie plastique rend ces calculs difficiles. En effet, si l'activité de certains systèmes est favorisée, certaines interactions apparaissent plus que d'autres et le calcul ne s'apparente plus à une évaluation « moyenne » de l'intensité des interactions mais à l'évaluation d'un coefficient représentatif de l'interaction statistiquement la plus représentée. Cette particularité est visible si l'on analyse l'évolution de α tout au long d'une simulation : il n'est pas constant (Fig. IV.30).

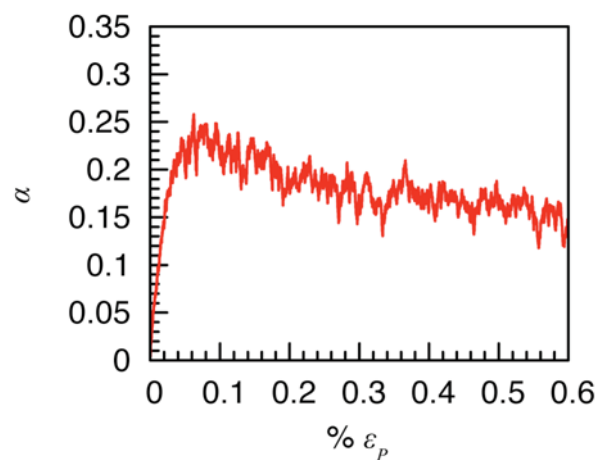


Fig. IV.30 Décroissance du coefficient α en fonction de la déformation. Le calcul fait référence à la simulation dans les plans $\{110\}$, à $5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ de densité initiale et à $T=1000 \text{ K}$.

Pour pallier à ce problème, toutes les mesures de contraintes et de densités présentées dans ce chapitre ont été réalisées avant l'apparition de l'anisotropie plastique. Les valeurs de α déduites de la loi de Taylor (équation (IV.8)) sont de 0,2 et 0,23 respectivement dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$. Le fait que ces valeurs soient très comparables, confirment les résultats préliminaires issues des calculs de cartographies d'interactions : un type d'interaction majeur (jonction coin) pour chacune des deux familles de systèmes, avec des tailles de lobe et des probabilités d'apparition comparables, mène à un durcissement du même ordre. Les valeurs de α sont en accord avec les prédictions de *Davidge & Pratt 1964*.

À partir de courbes contrainte-cisaillement plastique, il est possible de calculer des valeurs de taux de durcissement θ (θ étant défini comme la pente $d\tau/d\gamma$). Contrairement aux mesures de α , on trouve dans la littérature plusieurs références à des mesures de θ (*Hulse & Pask 1960* ;

Copley & Pask 1965 ; Srinivasan & Stoebe 1974 ; Routbort 1979), spécialement dans $\{110\}$. On notera les travaux de *Routbort (1979)* dans lesquelles l'évolution de θ en fonction de la déformation est détaillée à haute température ($T > 1500$ K) et ceux de *Copley & Pask 1965*. Ces derniers présentent des courbes contrainte-déformation, pour les deux familles de système de glissement, pour lesquelles les valeurs de θ dans $\{100\}$ sont supérieures à celles dans $\{110\}$.

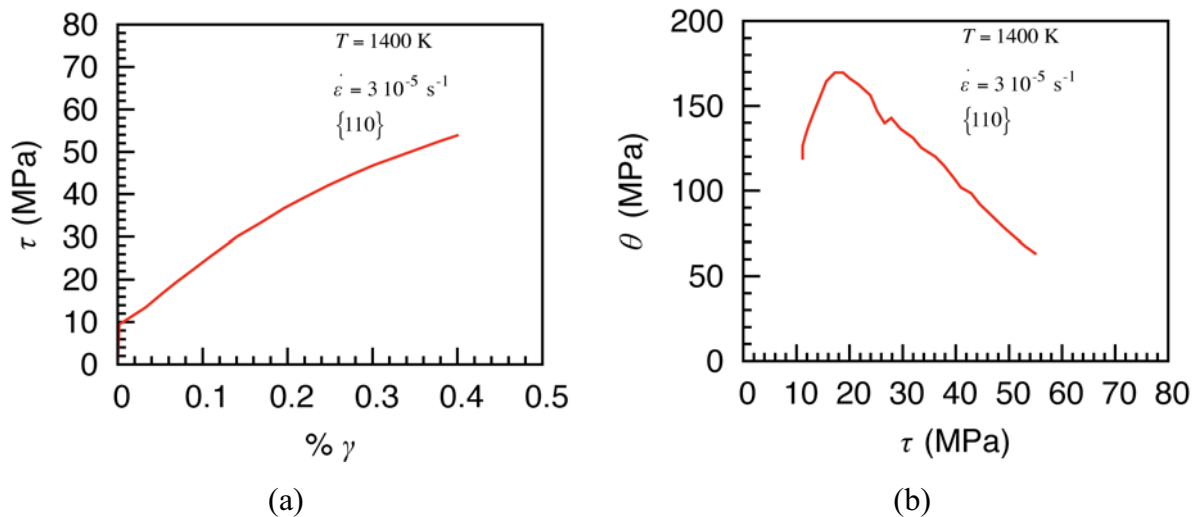


Fig. IV.31 Evolution de θ au cours d'un essai à vitesse de déformation imposée, à 1400 K. Seul le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est activé. (a) Courbe contrainte-cisaillement (b) Variation de θ en fonction de la contrainte. On remarque que θ varie continuellement avec la déformation (très court stade I et quasi-absence de stade II). D'après *Routbort 1979*.

Les essais expérimentaux, à des températures comprises entre 1000 K et 1500 K, montrent généralement un stade I très court puis un stade de déformation où la pente θ des courbes contrainte-cisaillement décroît lorsque la déformation augmente (*Fig. IV.31*). Ce qui suppose que le stade II (défini par θ constant) est court et que les mécanismes de restauration qui gouvernent le stade III apparaissent assez rapidement pendant la déformation. θ est donc intrinsèquement lié à la quantité de déformation accumulée au cours de l'essai.

A partir de l'évolution de la densité de dislocation en fonction du cisaillement plastique mesurée en DD, il est possible de prévoir des valeurs de θ à partir du modèle simplifié de *Kocks & Mecking 2003* (équation (IV.3)).

Néanmoins, nous avons rencontré plusieurs difficultés pour réaliser ces mesures. En plus des problèmes induits par l'apparition d'anisotropie plastique que nous avons déjà présentée, la

dépendance aux mécanismes de restauration n'a pas été intégrée dans nos calculs puisque le glissement dévié a volontairement été inhibé.

Dans le modèle de *Kocks & Mecking 2003*, on peut négliger dans un premier temps le terme de restauration dynamique, mais ce n'est pas le cas des essais expérimentaux. Les valeurs de θ , présentées dans la littérature, sont mesurées à plusieurs pourcents de déformation et intègrent déjà ces mécanismes. Il y a donc, à partir de notre modèle, un risque de constamment surévaluer les valeurs de θ .

De plus, en l'absence de restauration dynamique, $dp/d\gamma$ varie proportionnellement avec la contrainte (*Devincre et al. 2008 ; Kubin et al. 2008b*). En intégrant la loi de Taylor, on montre que ρ varie comme le carré du cisaillement plastique. Or les courbes de densités observées dans nos simulations ont une forme commune de parabole convexe. Cette particularité est due à la surmultiplication de la densité de dislocation en début de calcul. En effet, en début d'une simulation, l'arrangement des dislocations n'est pas caractéristique d'une microstructure d'écrouissage. De ce fait, on observe un mécanisme de surmultiplication des dislocations qui n'est pas réaliste. Ensuite, lorsque le régime de forêt est installé, la densité de dislocation est régulée par les interactions, ce qui entraîne des valeurs de $dp/d\gamma$ plus faibles qu'en début de simulation (d'où la forme convexe des courbes de densité). Cette particularité des simulations en masse ajoute une certaine complexité puisqu'il serait idéalement nécessaire de prendre des valeurs de $dp/d\gamma$ faibles et réalistes (donc mesurées aux grandes déformations) tout en évitant le domaine d'anisotropie plastique.

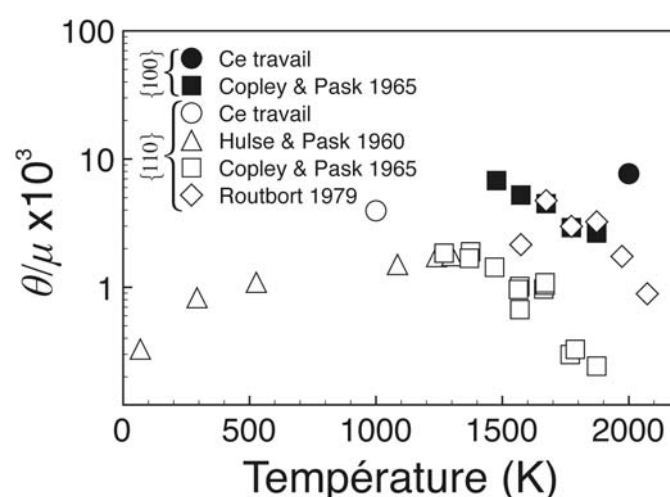


Fig. IV.32 Taux de durcissement θ en fonction de la température. Les valeurs de θ dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ sont respectivement représentées par des symboles blanc et noir.

Les calculs, présentés à la fin de la section IV.2.2, mènent à des valeurs de θ de l'ordre de $\mu/250$ à 1000 K dans $\{110\}$ et $\mu/130$ à 2000 K dans $\{100\}$. Ces valeurs sont un peu plus élevées que celles qui sont présentées à quelque pourcents de déformation par *Hulse & Pask 1960 ; Copley & Pask 1965* et *Routbort 1979* (*Fig. IV.31*). On notera que seules les valeurs de *Routbort 1979* reflètent des mesures prises en début de déformation plastique. Si les simulations d'écrouissage latent (*Queyreau 2008 ; Devincere et al. 2008*) restent la meilleure méthode afin de quantifier le durcissement en DD, il n'en demeure pas moins que les essais en glissement multiple peuvent fournir un ordre de grandeur de θ cohérent avec l'expérience, sous réserve de tenir compte du glissement dévié et de prendre certaines précautions quant aux mesures.

IV.4.2 Déformation dans le régime thermiquement activé

Les travaux sur la déformation à froid présentés dans ce chapitre ont été réalisés à la fois sur MgO et sur le fer, un autre matériau dont la déformation est gouverné par la friction de réseau à basse température (*Spitzig & Keh 1970a, 1970b ; Quesnel et al. 1975 ; Aono et al. 1979 ; Louchet et al. 1979*).

Des tests et des simulations réalisés en glissement simple ont été réalisés pour les deux structures. Les premiers tests, réalisés dans MgO, ont montré que la taille des jonctions sous contrainte diminuait d'autant plus que la température était faible par rapport à T_a (*Fig. IV.23*). Les simulations en glissement simple dans le fer, initialement présentées dans *Naamane 2008*, ont été refaites suite à l'intégration dans *microMegas* d'un nouveau module de statistique visant à calculer de façon plus réaliste les tailles et le nombre de jonctions dans les simulations. Les résultats présentés section IV.3.2.2 sont en très bon accord avec les observations de *Louchet et al. 1979*. En effet, *F. Louchet* et ses collaborateurs n'ont remarqué que très peu de jonctions à basse température, lors d'expériences *in situ* réalisées dans le niobium. Nous avons rappelé que cette propriété était liée à deux spécificités du régime thermiquement activé :

- Dans les cas de la jonction mixte symétrique de la structure CC et des deux jonctions dans MgO, l'interaction entre une dislocation mobile vis et un arbre vis ne permet pas la formation d'une jonction (*Fig. IV.22*).

- Dans le cas où la dislocation mobile n'est pas de caractère vis (courbure induite par le champ de contrainte ou la température), la friction de réseau sur les bras de jonction réduit leur mobilité et empêche la jonction de se zipper (*Fig. IV.24*).

Enfin, nous avons montré que notre modèle reproduisait bien les valeurs de \bar{x}_c (distance critique avant désancrage des dislocations) mesurées *in situ* dans *Louchet al. 1979* (*Fig. IV.29*). Comme le montre l'équation (IV.10), L_v peut être définie comme une fonction de x_c et de la densité de la forêt ρ_f . En couplant l'expression de la contrainte de Frank-Read τ_{FR} à la contrainte de la forêt τ_f définie par la loi de durcissement par interactions pour le régime athermique, on peut définir un coefficient de durcissement α' qui permet d'évaluer le durcissement de la forêt en fonction de L_v , dans le régime de friction de réseau (équation (IV.12)). Les calculs de α' en fonction de la température sont présentés *Fig. IV.33*.

$$\left. \begin{array}{l} \tau_{FR} = \frac{\mu b}{L_v} \\ \tau_f = \alpha' \mu b \sqrt{\rho_f} \end{array} \right\} \alpha' = \frac{1}{L_v \sqrt{\rho_f}} \quad (IV.12)$$

On remarque que, en comparaison aux valeurs de α définie pour $T > T_a$ (*Queyreau et al. 2009*), les valeurs de α' dans le régime thermiquement activé sont faibles. Ce résultat confirme que les interactions locales entre dislocations sont plus faibles dans le régime thermiquement activé que dans le régime athermique.

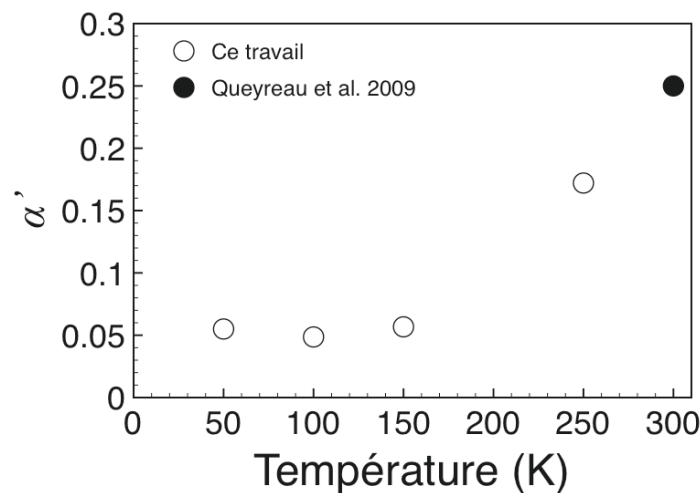


Fig. IV.33 Coefficient α' dans le système $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ du fer. Calculs réalisés à partir de l'équation (IV.12), pour des simulations réalisées en glissement simple.

La définition de x_c et de L_v n'est que la première étape du modèle de *Louchet*. En effet, la suite du modèle permet de définir l'incrément de contrainte $\Delta\tau$ nécessaire afin de combler une décroissance ΔL_v de section vis dans un essai à vitesse constante. Ce calcul se fait à partir l'équation d'Orowan, pour les valeurs de L_v calculées (ou mesurées expérimentalement).

Des calculs préliminaires sur le fer ont permis d'évaluer des valeurs de $\Delta\tau$ de quelques MPa (2 à 3 MPa pour la simulation à 50 K, $6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ de densité de forêt), mais ils n'ont pas été poursuivis à cause d'un problème qui apparaît de façon récurrente dans les simulations que nous avons réalisées dans le régime thermique.

La figure IV.34 présente des courbes contrainte-déformation issues des simulations en glissement simple dans le fer. La contrainte plateau en début de déformation représente la contrainte critique obtenue en absence de forêt. Alors que nous nous attendions à ce que la présence de forêt induise un durcissement, on observe systématiquement un adoucissement en début de simulation. Ce phénomène est d'autant plus marqué que la densité de dislocation est importante dans le volume de simulation. Ce phénomène apparaît aussi lorsque l'on augmente la densité de dislocation du système primaire.

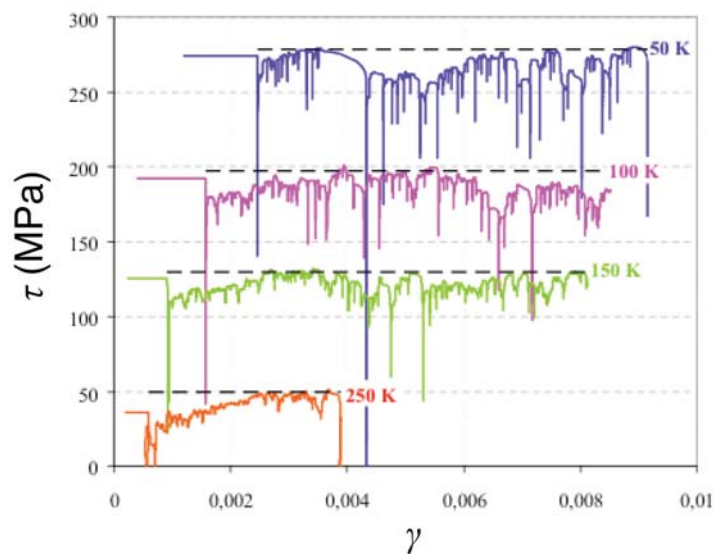


Fig. IV.34 Courbes contraintes déformation dans le fer. Les calculs sont réalisés à 50 K, 100 K, 150 K et 250 K pour une densité de forêt de $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. La portion droite en début de déformation correspond à la contrainte critique de cisaillement en l'absence de forêt. D'après Naamane 2008.

L'adoucissement observé en début de déformation sur les courbes de la figure IV.34 est lié à la sensibilité de la loi de vitesse à la contrainte. Dans le volume simulé, une dislocation est toujours soumise au champ de contrainte interne induit par ses voisines. Si, intuitivement, on

peut croire que l'effet du champ de contrainte issu d'une distribution homogène de dislocations sur la vitesse d'une dislocation isolée est nulle, cette propriété n'est en fait valable que dans le cadre d'une dépendance linéaire entre la vitesse et la contrainte. Dans nos simulations de la déformation dans le régime thermiquement activé, la vitesse des dislocations varie en sinus hyperbolique avec la contrainte (équation (II.28)). La figure IV.35 est une représentation schématique de la loi de vitesse en sinus hyperbolique. Prenons le cas simple d'une dislocation, à l'équilibre, dans un état de contrainte caractérisé par τ . Imaginons que la dislocation soit successivement perturbée par un champ de contrainte qui l'accélère (caractérisé par une contrainte $\tau + \Delta\tau$) puis par un champ de contrainte qui la freine (caractérisé par une contrainte $\tau - \Delta\tau$). Emettons les hypothèses suivantes (i) le système subit un bref retour à l'équilibre entre les deux configurations (ii) la variation $\Delta\tau$ est de même amplitude pour les deux perturbations. La figure IV.35 montre que l'accélération induite par une variation de contrainte $+\Delta\tau$ est plus importante en amplitude que la décélération induite par la variation $-\Delta\tau$.

On peut appliquer le même raisonnement à une population de dislocations dans un cristal. Le champ de contrainte interne tend statistiquement à accélérer les dislocations dans le régime thermiquement activé, c'est pourquoi on observe un adoucissement sur les courbes de la figure IV.34.

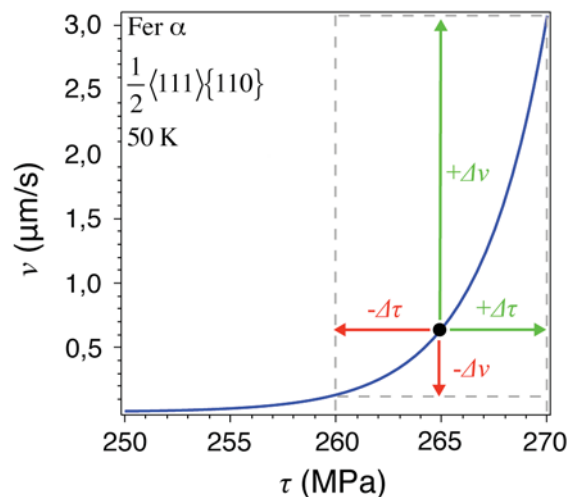


Fig. IV.35 Sensibilité de la vitesse à la contrainte. Les paramètres de la loi de vitesse des dislocations vis, dans le système $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ du fer, sont présentés dans Naamane 2008 et Naamane et al. 2010. Calculs réalisés à 50 K, CRSS ~ 265 MPa.

La variation de vitesse induite par un incrément/décroissement de contrainte $\Delta\tau$ est fonction de la dérivée de la vitesse en τ . À une température donnée, l'effet de la contrainte interne sur la

vitesse sera donc d'autant plus important que la contrainte effective est élevée. La figure IV.35 illustre un exemple d'application, pour les dislocations vis, dans le système $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ du fer, à $T=50$ K. De plus, comme la vitesse est aussi fonction de la température ; à contrainte fixée, la sensibilité de la vitesse à la contrainte varie avec T .

Afin de décrire la capacité qu'ont les dislocations à accommoder les variations de contraintes à une température donnée, on définit S , la sensibilité à la vitesse, comme le rapport entre la variation de contrainte $\Delta\tau = \tau_2 - \tau_1$ (induite par un saut de vitesse de déformation $\dot{\epsilon}_1 \rightarrow \dot{\epsilon}_2$) et le logarithme du rapport des vitesses. En émettant l'hypothèse d'une densité de dislocation constante entre deux sauts de vitesse et à l'aide de l'équation d'Orowan, on peut remplacer le rapport des vitesses de déformation en un simple rapport de vitesses de dislocation (équation (IV.13)).

$$S = \frac{\Delta\tau}{\ln(v_2 / v_1)} \quad (\text{IV.13})$$

Les évolutions de S dans les plans $\{110\}$ du fer et de MgO sont présentées Fig. IV.36 en fonction de la température.

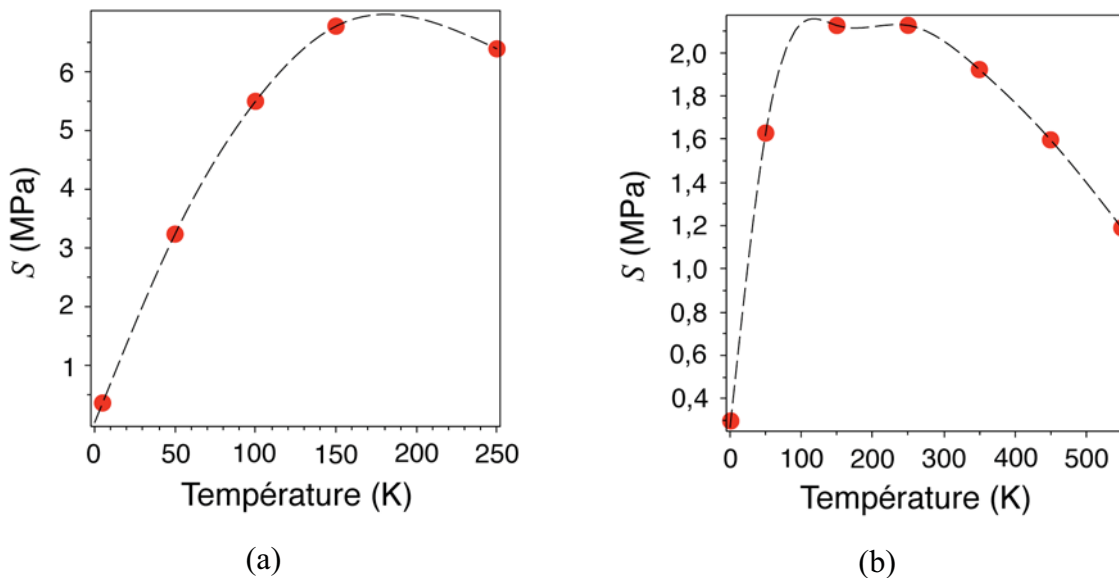


Fig. IV.36 Sensibilité à la vitesse en fonction de la température. $\dot{\epsilon}_1 = 5,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\epsilon}_2 = 2,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (a) Pour le système $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ du fer. Les paramètres de la loi de mobilité des dislocations vis sont présentés dans Naamane 2008, 2010 (b) Dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ de MgO. Les paramètres de la loi de mobilité des dislocations vis sont présentés Tab. III.3 et Tab. III.4.

On remarque que S peut varier d'un facteur six, en fonction de la température, dans le système $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$ du fer. Plus la température est faible, et plus le $\Delta\tau$ nécessaire pour accroître la vitesse des dislocations est faible. En d'autres termes, plus la sensibilité à la vitesse est forte et plus la pente $dv/d\tau$ est faible. Le même constat est valable pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ de MgO. On peut donc en déduire que l'effet du champ de contrainte interne sur la mobilité des dislocations est d'autant plus important que la température est proche de zéro, pour les deux systèmes.

L'effet du champ de contrainte à longue distance sur la vitesse des dislocations est mal connu et donc peu abordé dans la littérature (*Groger & Vitek 2007*). Pendant ma thèse, la contrainte effective sur une portion de dislocation vis dans *microMegas* était calculée comme la moyenne des contraintes de chaque segment de la portion de dislocation (voir section II.3.5). Bien qu'étant capable de reproduire les microstructures expérimentales, cette vision ne s'appuie sur aucune base physique. Il va sans dire que le calcul de la contrainte d'écoulement dans un essai à vitesse de déformation imposée pour $T < T_a$ dépend directement de la physique de déplacement des lignes vis dans le code. La résolution de cette question est toujours d'actualité. Ce mécanisme pourrait-il contribuer à l'explication de l'écart systématiquement observé à 0 K entre les mesures expérimentales et le calcul de la contrainte de Peierls dans le fer ? La différence venant de l'existence ou pas d'une microstructure de dislocation dans la modélisation. De plus, la découverte des effets non locaux dans le régime thermique peut remettre en cause les méthodes d'ajustement des lois de mobilité sur les CRSS expérimentales, méthodes couramment utilisées par les usagers de la DD. En effet, si l'on suppose que les CRSS expérimentales sont influencées par le champ de contrainte interne, elles ne peuvent pas être utilisées directement pour ajuster la loi de mobilité d'une dislocation isolée. Dans ce cadre, notre MME peut se positionner comme une alternative de choix puisqu'elle n'est basée que sur les propriétés intrinsèques d'une dislocation isolée.

L'objectif de ce chapitre était d'étudier les propriétés microstructurales liées à la déformation de MgO. Nous avons notamment pu observer des différences concrètes qui concernent les mécanismes de déformation et de durcissement, en fonction du régime de déformation exploré. Au-dessus de T_a , un type de jonction, dans chaque famille de système de glissement, gouverne le durcissement de la forêt qui semble finalement plus important dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ à 2000 K, que dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ à 1000 K. Le coefficient

d'interaction α est de l'ordre de 0,2, ce qui est en accord avec les attentes expérimentales pour les cristaux ioniques de structure NaCl (*Davidge & Pratt 1964*). Cette valeur est inférieure à celle qui est mesurée dans les métaux CFC (*Madec 2001*). Dans le régime thermiquement activé, pour deux matériaux à friction de réseau (MgO et le fer- α), nous avons observé que la formation des jonctions était rapidement inhibée par la force de friction. D'un point de vue local, le durcissement est alors davantage contrôlé par le nombre de points d'ancrage et la longueur L_v des portions de dislocation vis. De plus, dans ce régime de déformation, les interactions longue distance (champ de contrainte interne) peuvent aussi jouer un rôle sur le durcissement. Néanmoins, notre étude n'a pour le moment pas permis de modéliser leur influence sur le durcissement.

Après ce chapitre largement orienté vers la modélisation à l'échelle mésoscopique du comportement collectif et dynamique des dislocations, la partie suivante sera consacrée à une application de notre MME dans des conditions de haute pression.

CHAPITRE V

INFLUENCE DE LA PRESSION HYDROSTATIQUE

Reproduire en laboratoire les conditions de pression dans lesquelles se déforment les minéraux de la Terre profonde constitue un défi technique malgré les récentes avancées expérimentales (*Wang et al. 2003 ; Karato & Weidner 2008 ; Ratterron & Merkel 2009*). Dans ce chapitre, notre MME est utilisée en intégrant des structures de cœur de dislocations calculées à 30, 60 et 100 GPa, pressions caractéristiques du manteau inférieur terrestre.

Dans une première section, nous présenterons brièvement les résultats obtenus par *Ph. Carrez* sur les structures de cœur en pression et les contraintes de Peierls. Ensuite, nous ferons l'exposé de l'influence de la pression sur l'énergie d'activation du mécanisme de double-décrochements et sur le calcul des CRSS. La dernière section sera consacrée à une discussion générale des résultats à haute pression.

V.1 Élasticité et structures de cœur en pression

La section V.1 fait référence à des calculs réalisés par Ph. Carrez. Il est nécessaire d'en rappeler les principaux résultats, utiles à la compréhension de la suite du mémoire.

V.1.1 Constantes élastiques

Pour cette étude en pression, le tenseur des constantes élastiques C_{ij} a été recalculé *ab initio* avec le code VASP (Kresse & Haffner 1993 ; Kresse & Furthmüller 1996), à 30, 60 et 100 GPa de pression hydrostatique (Carrez et al. 2009 ; Amodeo et al. 2001b). Les résultats sont présentés Tab. V.1 et Fig. V.1.

P (GPa)	a (Å)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	A	μ (GPa)	$\nu_{\{110\}}$	$\nu_{\{100\}}$
0	4,237	279	93	146	1,57	116,5	0,18	0,27
30	4,038	538	138	170	0,85	184,4	0,23	0,20
60	3,915	778	179	187	0,62	236,7	0,25	0,18
100	3,799	1088	230	202	0,47	294,3	0,27	0,16

Tab. V.1 Evolution des propriétés élastiques en fonction de la pression. Les calculs ont été réalisés avec le code VASP. Les constantes élastiques augmentent avec la pression.

Les constantes élastiques calculées sont en accord avec les résultats présentés section I.1.3 (Karki et al. 1997 ; Zha et al. 2000 ; Oganov & Dorogokupets 2003) : C_{11} et C_{12} augmentent fortement avec la pression (Fig. V.1a) alors que les variations de C_{44} sont moins importantes (Fig. V.1b). Le module de cisaillement anisotrope μ (défini par l'équation (I.2)) varie de 116,5 à 294,3 GPa entre 0 et 100 GPa de pression (Fig. V.1c). Le coefficient d'anisotropie élastique A , défini par l'équation (I.1), décroît de 1,57 (0 GPa) à 0,47 (100 GPa) en passant par la valeur unitaire aux alentours de 20 GPa (Fig. V.1d).

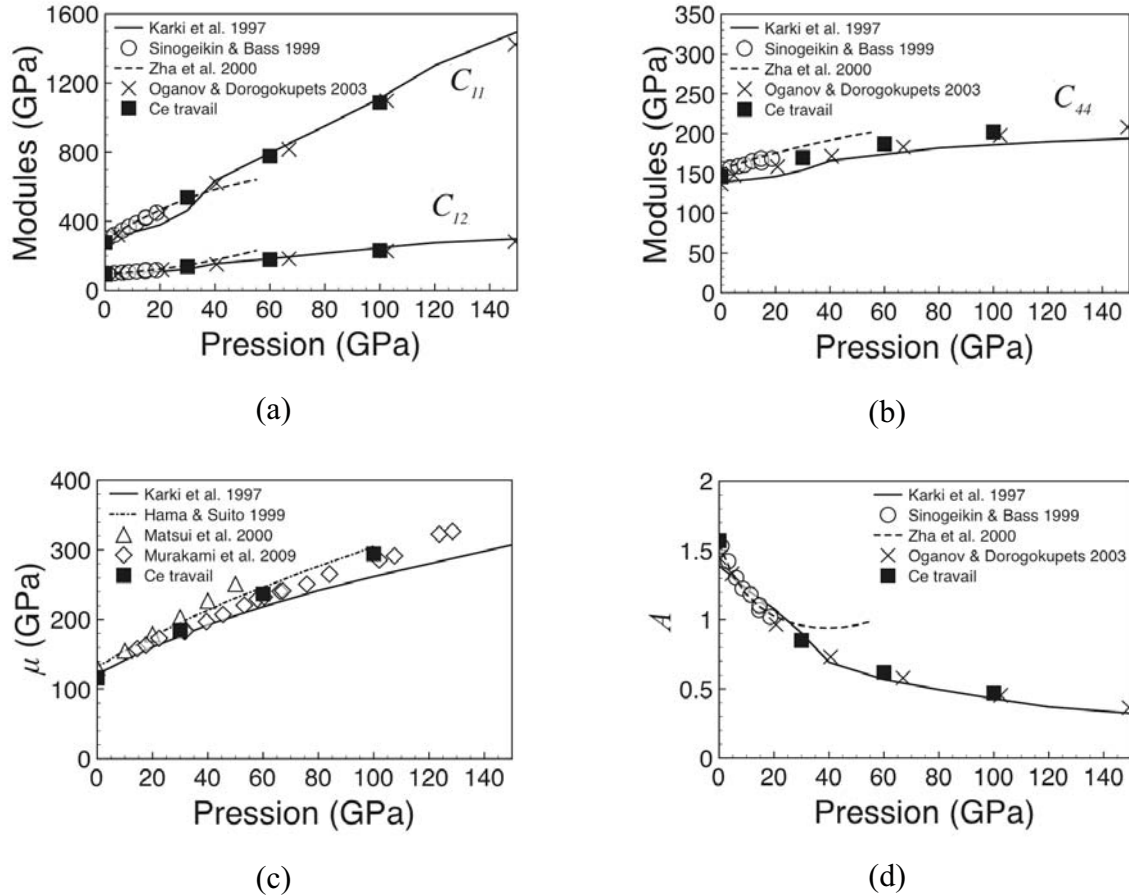


Fig. V.1 Evolution en pression des propriétés élastiques. (a)-(b) : Les constantes élastiques calculées *ab initio* entre 0 et 100 GPa sont en accord avec les calculs de Karki et al. 1997 et de Oganov & Dorokupets 2003. (c) : La sensibilité du module de cisaillement anisotrope μ à la pression est en accord avec les mesures de Murakami et al. 2009 réalisés lors d'expériences en CED. (d) Le coefficient d'anisotropie élastique A diminue lorsque la pression augmente. Nos résultats sont en accord avec les calculs de Karki et al. 1997 et de Oganov & Dorokupets 2003.

V.1.2 Structures de cœur et contraintes de Peierls

Comme pour les calculs présentés partie III.1, les structures de cœur de dislocation et les contraintes de Peierls sont calculées à partir du modèle de Peierls-Nabarro-Galerkin (Denoual 2004, 2007). Cette résolution spatiale du modèle de Peierls nécessite de connaître les constantes élastiques du matériau ; elles sont présentées section V.1.1. Elle requiert aussi l'implémentation de γ -surfaces, dans les plans d'étalement potentiels des cœurs de dislocation. Les γ -surfaces ont été calculées *ab initio*, à l'aide le code *VASP*, à 30, 60 et 100 GPa de pression. Comme à pression ambiante (Fig. III.1), Les directions $\langle 110 \rangle$ sont les directions de plus basses énergies quelle que soit la pression. Cette propriété souligne que $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ reste bien le vecteur de Burgers de la structure à haute pression. Les γ -lignes dans les

directions $\langle 110 \rangle$ sont présentées *Fig. V.2* pour les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ ¹. Elles montrent que l'énergie de faute varie avec la pression. Plus précisément, on observe une variation différentielle entre les deux plans ; alors que l'énergie suivant les directions $\langle 110 \rangle$ dans les plans $\{110\}$ est plus faible que dans $\{100\}$ à 0 GPa, elle augmente moins vite dans $\{100\}$ que dans $\{110\}$ en pression. Finalement, à haute pression, l'énergie de faute est plus importante dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$.

À basse pression, comme nous pouvons le voir sur la figure *V.2*, les plans $\{110\}$ présentent l'énergie de faute la plus faible. Son maximum est de $1,05 \text{ J/m}^2$ à 0 GPa contre $2,18 \text{ J/m}^2$ et $2,47 \text{ J/m}^2$ respectivement pour les plans $\{100\}$ et $\{111\}$. A haute pression, l'énergie de faute d'empilement est plus faible dans les plans $\{100\}$: $3,67 \text{ J/m}^2$ contre $3,72 \text{ J/m}^2$ dans $\{110\}$ à 60 GPa et $4,11 \text{ J/m}^2$ contre $5,28 \text{ J/m}^2$ dans $\{110\}$ à 100 GPa.

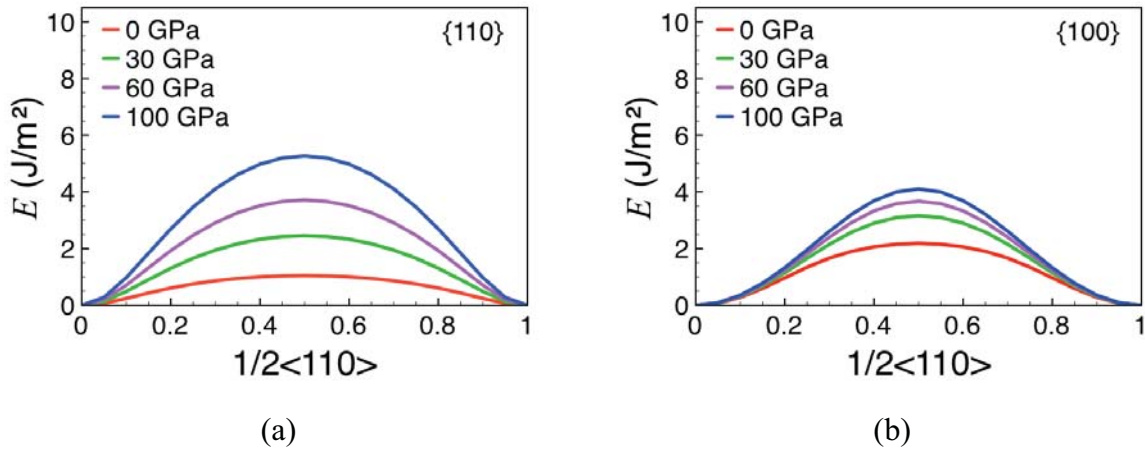


Fig. V.2 Evolution en pression des γ -lignes calculées ab initio dans la direction $1/2\langle 110 \rangle$, dans les plans $\{110\}$ (a) et $\{100\}$ (b). La pression a un effet plus significatif sur l'énergie de faute dans les plans $\{110\}$ que dans les plans $\{100\}$.

Les structures de cœur et les contraintes de Peierls ont été calculées à 30, 60 et 100 GPa à l'aide de la méthode PNG exposée section II.1.2. Les résultats, pour la dislocation vis, sont présentés *Tab. V.2*.

¹ Les γ -surfaces ont aussi été calculées dans les plans $\{111\}$. Les résultats montrent des énergies de fautes supérieures à celles qui sont calculées dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$.

{110}			{100}	
P (GPa)	ρ_i (% b)	τ_P (MPa)	ρ_i (% b)	τ_P (MPa)
0	80	150 (70)	20	1600 (220)
30	60	600 (140)	35	750 (120)
60	40	1300 (210)	45	750 (150)
100	35	1950 (300)	50	850 (150)

Tab. V.2 Paramètres des structures de cœur de la dislocation vis à 0, 30, 60 et 100 GPa. ρ_i , la densité de vecteur de Burgers dans le plan i , est donnée en fraction de b . Les incertitudes sur les contraintes de Peierls sont fournies entre parenthèses.

La dislocation vis est principalement étalée dans les plans {110} et {100}. La fraction de vecteur de Burgers ρ_i varie avec la pression. Alors que ρ_i dans les plans {110} est de 80% à 0 GPa, elle chute à 35% à 100 GPa. Conjointement, la fraction de b dans les plans {100} passe de 20% à 50%. Les 15% de densité de vecteur de Burgers restants, à 100 GPa, sont répartis dans les plans {111}.

Les structures de cœur pour les dislocations coins sont planaires. Les profils de cisaillement définis par la fonction de désaccord f_i (équation (II.1)) sont présentés Fig. V.3. Pour les deux systèmes de glissement, l'augmentation de la pression réduit l'étalement du cœur ce qui induit une augmentation des contraintes de Peierls (Joos & Duesbery 1997 ; Joos & Zhou 2001). La structure de cœur de la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ semble néanmoins la plus sensible à l'augmentation de pression : elle montre une transition d'un cœur étendu $\xi/b > 1$ à pression ambiante vers un cœur compact $\xi/b < 1$ à partir de 60 GPa.

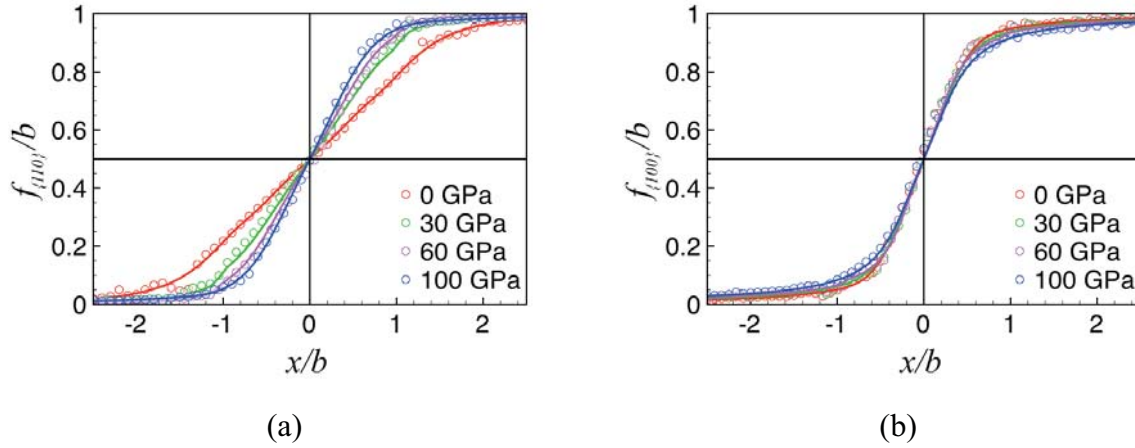


Fig. V.3 Evolution de la fonction de désaccord f_i en fonction de la pression pour les structures de cœur des dislocations coins dans les plans $\{110\}$ (a) et $\{100\}$ (b). La structure de cœur de la dislocation coin dans les plans $\{110\}$ est davantage sensible à la pression que celle dans les plans $\{100\}$.

Les contraintes de Peierls pour les dislocations coins sont toujours plus faibles que celles des dislocations vis, excepté à 100 GPa dans les plans $\{100\}$ où $\tau_P=920$ MPa contre $\tau_P=850$ MPa respectivement pour les dislocations coin et vis. Les principaux résultats pour les dislocations coins sont présentés Tab. V.3. Les largeurs à mi-hauteur déduites du modèle PNG et du modèle PN-1D sont en bon accord.

$\{110\}$				$\{100\}$		
P (GPa)	ξ_i (Å)	ξ_{PN} (Å)	τ_P (MPa)	ξ_i (Å)	ξ_{PN} (Å)	τ_P (MPa)
0	3,6 (1,2)	5,2	80 (30)	1,6 (0,54)	2,2	300 (100)
30	2,8 (1,0)	3,3	310 (190)	1,5 (0,55)	1,6	570 (200)
60	2,4 (0,8)	2,6	760 (300)	1,3 (0,46)	1,5	640 (360)
100	1,9 (0,7)	2,2	620 (170)	1,3 (0,50)	1,4	920 (220)

Tab. V.3 Paramètres des structures de cœur pour les dislocations coins à 0, 30, 60 et 100 GPa. Les largeurs à mi-hauteur ξ_i sont données en Å et en unité b (entre parenthèses). Les largeurs à mi-hauteur ξ_{PN} calculées à partir du modèle de Peierls-Nabarro 1D (Carrez et al. 2009) sont présentées à titre comparatif. Les incertitudes sur les contraintes de Peierls sont données entre parenthèses.

L'évolution en pression de la structure de cœur des dislocations vis suggère une inversion de système de glissement potentielle à 0 K. Mais qu'en est-il en température ? Afin

de prendre en compte l'effet de la température sur le glissement des dislocations, nous avons calculé, à l'aide du modèle IE, l'évolution en contrainte de l'enthalpie d'activation $\Delta H^*(\tau)$ et de la largeur $w^*(\tau)$ des double-décrochements à 30, 60 et 100 GPa.

V.2 Influence de la pression sur la mobilité des dislocations et les CRSS

V.2.1 Configuration critique des double-décrochements

La méthode des interactions élastiques (méthode IE), présentée au chapitre II et utilisée à pression ambiante section III.2.1, est appliquée à 30, 60 et 100 GPa afin de décrire la configuration critique des double-décrochements en pression (enthalpie d'activation et géométrie). Comme pour l'étude menée section III.2.1, nous avons utilisé une forme modifiée du potentiel de Peierls V_P , présentée dans *Koizumi et al. 1993* et décrite par l'équation (II.10). Dans notre approche, le paramètre α_i est ajusté sur la densité de vecteur de Burgers ρ_i (équation (III.1a)) à chacune des pressions. Le module de cisaillement et les coefficients de Poisson, qui entrent dans l'expression de ΔE , (équations (II.7) et (II.8)), sont rappelés *Tab. V.1*. Le rayon de coupure $r_{c,i}$ est ajusté sur la largeur à mi-hauteur de la distribution de vecteur de Burgers ξ_{PNi} (équation (III.1b)), caractéristique d'une structure de cœur calculée, en pression, à l'aide d'un modèle de type PN-1D (*Carrez et al. 2009*). Les enthalpies critiques d'activation $\Delta H^*(\tau)$ à 30, 60 et 100 GPa sont présentées *Fig. V.4*.

La méthode IE étant particulièrement adaptée pour décrire le régime de basses contraintes, les calculs ont été réalisés pour $0 < \tau < 0,2\tau_P$. Les points de calculs, présentés *Fig. V.4*, ont été utilisés pour ajuster les paramètres de l'équation de Kocks (équation (II.17)). L'ajustement des données est présenté en trait plein *Fig. V.4*. Les paramètres ajustables p et q , ainsi que les valeurs de ΔH_0 sont présentés *Tab. V.4*.

Les calculs d'enthalpie d'activation du mécanisme de double-décrochements en pression présentent deux résultats importants : (i) pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, $\Delta H^*(\tau)$ est toujours plus élevé pour les dislocations vis que pour les dislocations coins. Comme pour le calcul à pression ambiante, le caractère vis semble être le caractère qui contrôle la déformation (ii) pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, à 100 GPa, $\Delta H^*(\tau)$ est plus élevé pour le caractère coin que pour le caractère vis sur toute la gamme de contrainte. *Fig. III.4*, à 0 GPa,

l'énergie d'activation pour le caractère vis est plus grande que pour le caractère coin, quelle que soit la contrainte. Les calculs en pression dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ montrent donc une inversion de caractère favorable à la nucléation des double-décrochements : on passe du caractère vis à 0 GPa au caractère coin à 100 GPa, avec un régime transitoire (30 et 60 GPa) pour lequel l'énergie d'activation d'un double-décrochements nucléé à partir d'une dislocation vis ou coin est comparable. On remarque que, globalement, l'accroissement de la pression entraîne une augmentation des valeurs de ΔH_0 .

Les largeurs de double-décrochements en pression sont présentées *Fig. V.5*, les paramètres libres de l'ajustement de $w^*(\tau)$ par l'équation (III.2) sont présentés *Tab. V.5*.

Comme pour les calculs à pression ambiante, la largeur des double-décrochements augmente lorsque la contrainte décroît au-dessous de $0,2\tau_P$ (*Fig. V.5*). Les variations de w^* en contrainte sont moins significatives dans un régime de contraintes intermédiaires. Dans ce régime, w^* atteint une valeur palier w_c . Les valeurs de w_c calculées sont de l'ordre de quelques dizaines de b . Les valeurs de n sont toujours de l'ordre de 0,5 (*Tab. V.5*), ce qui est en accord avec *Seeger & Schiller 1962*. On retrouve la relation $w_c \sim 2A$ entrevue à 0 GPa.

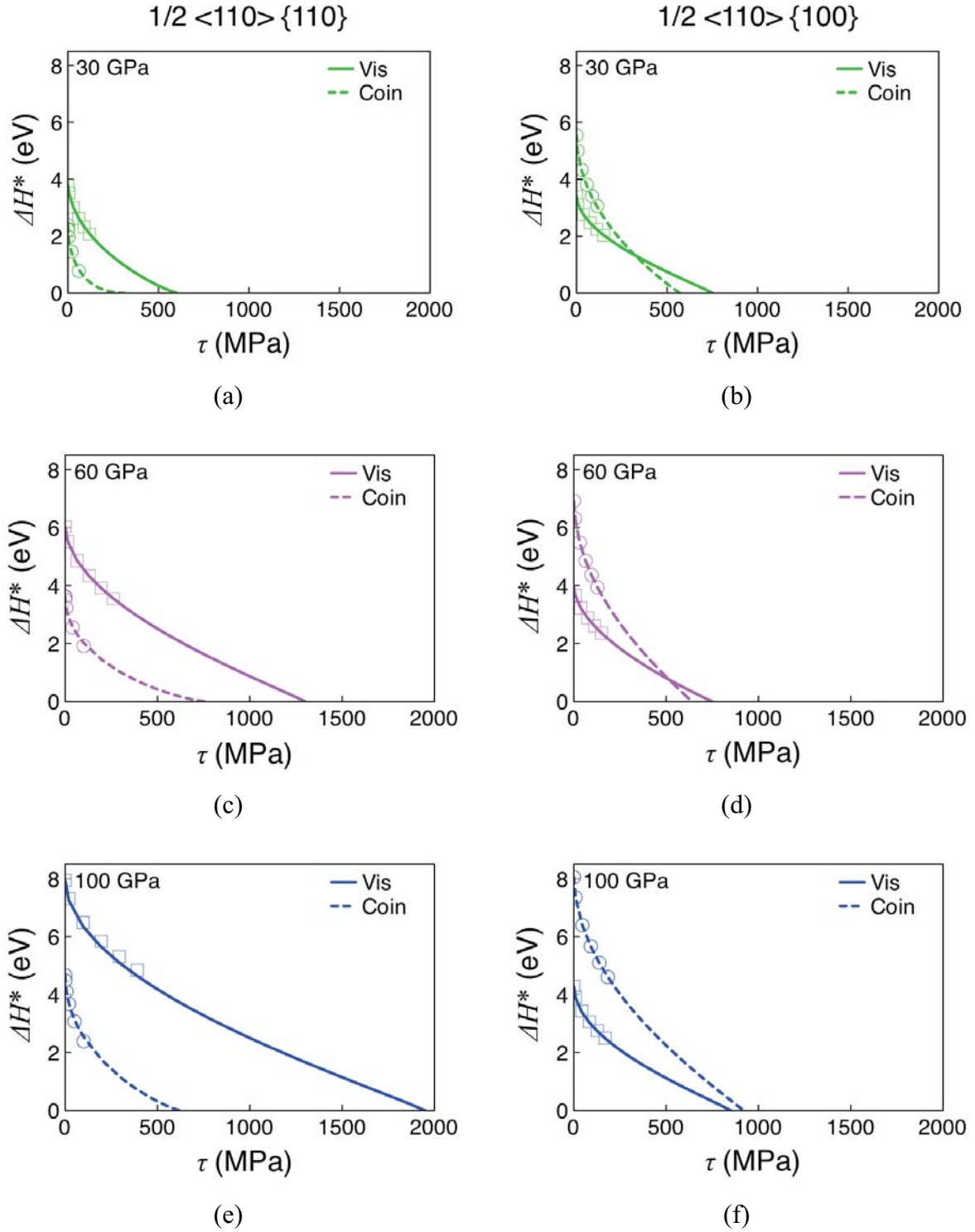


Fig. V.4 Enthalpie critique de nucléation des double-décrochements $\Delta H^*(\tau)$ en fonction de la pression pour $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{110\}$ à 30 GPa (a) ; 60 GPa (c) ; 100 GPa (e) et pour $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{100\}$ à 30 GPa (b) ; 60 GPa (d) et 100 GPa (f).

		{110}			{100}		
P (GPa)		ΔH_0 (eV)	p	q	ΔH_0 (eV)	p	q
30	Vis	3,89	0,54	1,14	3,40	0,53	1,00
	Coin	2,38	0,54	2,00	5,55	0,50	1,03
60	Vis	6,03	0,53	1,00	3,95	0,57	1,00
	Coin	3,65	0,50	1,29	6,94	0,51	1,00
100	Vis	7,95	0,51	1,00	4,29	0,50	1,00
	Coin	4,70	0,50	1,18	8,09	0,51	1,00

Tab. V.4 Enthalpie d'activation des doubles-décrochements en pression. Dans l'ajustement des calculs à l'aide de l'équation de Kocks, les paramètres p et q sont contraints par $0,5 < p < 1$ et $1 < q < 2$ comme dans Kocks et al. 1975.

		{110}				{100}			
P (GPa)		w_c (b)	A	n	m	w_c (b)	A	n	m
30	Vis	60	32,80	0,50	0,61	55	27,67	0,50	0,60
	Coin	90	45,00	0,48	0,70	70	32,30	0,50	0,76
60	Vis	40	22,60	0,50	0,60	80	42,45	0,46	0,50
	Coin	50	23,60	0,50	0,75	80	38,70	0,50	0,73
100	Vis	40	20,28	0,50	0,68	80	38,52	0,50	0,84
	Coin	80	41,00	0,49	0,67	60	34,30	0,50	0,56

Tab. V.5 Paramètres de la largeur des double-décrochements $w^*(\tau)$ en fonction de la pression. A , n et m sont les paramètres libres de l'équation (III.2) utilisée pour ajuster les calculs réalisés à $\tau < 0,2\tau_p$.

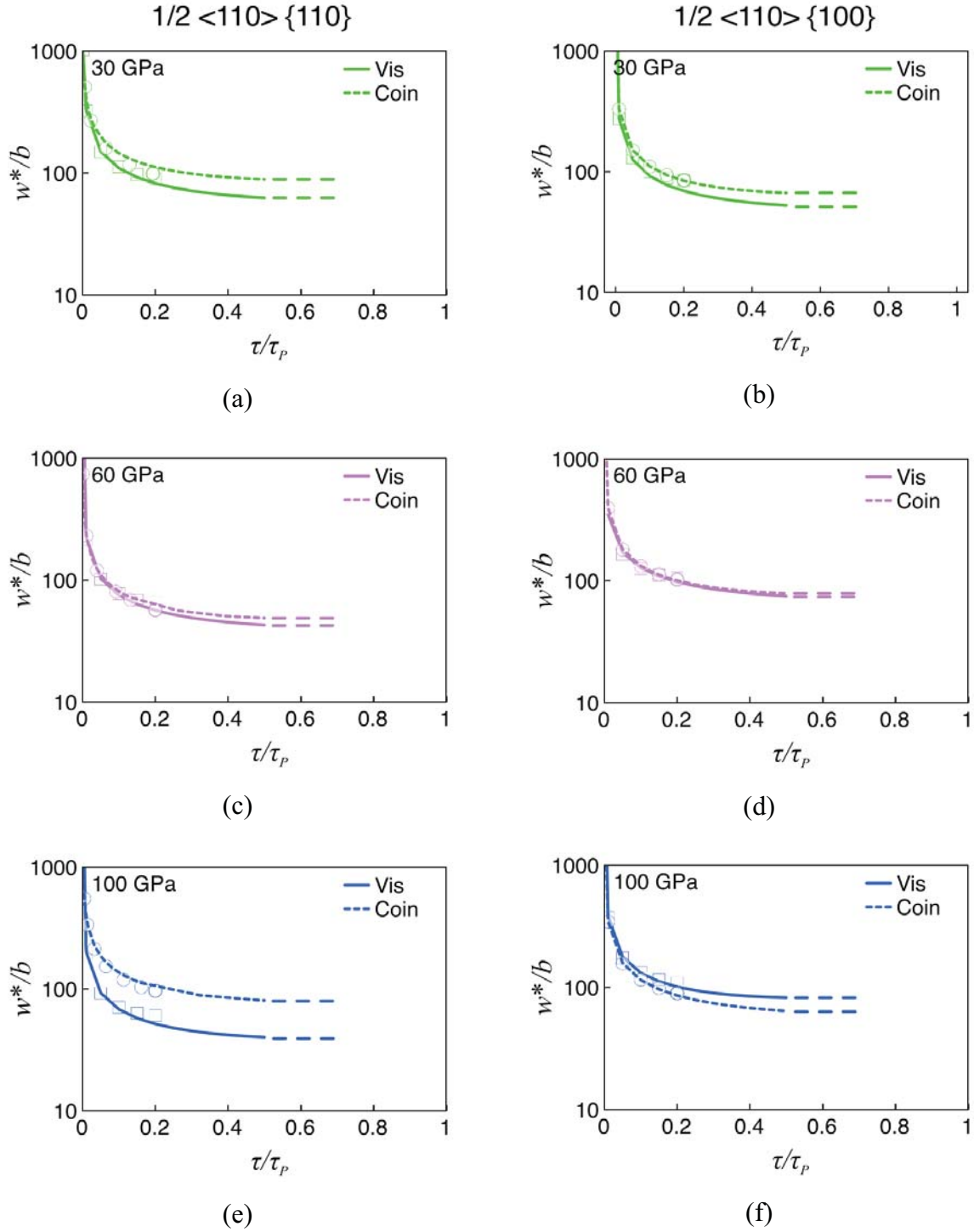


Fig. V.5 Largeur des double-décrochements $w^*(\tau)$ en fonction de la pression. Les calculs à basse contrainte ont été ajustés à l'aide de l'équation (III.2) et extrapolés jusqu'aux contraintes intermédiaires ($\tau \sim 0,5\tau_p$). La largeur critique w_c est indiquée par les tirets.

V.2.2 Influence de la loi de mobilité sur la température de transition en pression

Pour une loi de mobilité thermiquement activée où (i) l'énergie d'activation des double-décrochements entre dans un terme exponentiel (ii) le préfacteur est indépendant de la contrainte ; on peut calculer, à partir la loi d'Orowan, une expression analytique de T_a (équation (V.1)) définie à contrainte nulle (Kubin *et al.* 1998 ; Durinck *et al.* 2007b). Dans ce type d'approche, la largeur des doubles-décrochements est fixée à la largeur critique w_c (quelques dizaines de b). Les valeurs de T_a sont d'autant plus grandes que les valeurs de ΔH_0 sont importantes.

$$T_a = \frac{\Delta H_0}{k \ln \left(\rho b v_0 / \varepsilon \right)} \quad (\text{V.1})$$

$$\text{Où } v_0 = d'v_D \frac{bL}{2w_c^2}$$

À partir de l'équation (V.1), on peut définir une fonction $T(\tau)$ qui tient compte de $\Delta H^*(\tau)$ et de $w^*(\tau)$. Indépendamment du formalisme de la loi de mobilité, cette fonction est de la forme (V.2).

$$T(\tau) = f(\rho, b, \Delta H^*(\tau), w^*(\tau)) \quad (\text{V.2})$$

Nous avons vérifié, section III.4.1, que les formes en exponentielle et en sinus hyperbolique de la loi de vitesse donnaient des résultats comparables, à pression ambiante, dès lors que les variations de w^* à basse contrainte étaient prises en compte. Néanmoins, ces deux approches ne permettent pas un calcul direct de T_a ($w^*(\tau)$ n'est pas définie en $\tau=0$, équation (III.2)). Les valeurs de τ_p , $\Delta H^*(\tau)$ et $w^*(\tau)$ présentées dans les sections précédentes à 0, 30, 60 et 100 GPa permettent de paramétrer les deux formes de loi de vitesse. À défaut de pouvoir calculer T_a pour ces lois de mobilité, la résolution de l'équation (V.2), à l'aide de la loi d'Orowan, pour une contrainte faible nous permet d'en déduire une température $T(\tau)^2$. Les résultats pour les deux formalismes sont présentés *Tab. V.6* pour des contraintes de 1 et 10 MPa. Les paramètres d'activation en pression (τ_p , ΔH_0 , p , q , etc.), valables pour les deux formalismes de loi de vitesse, ont été présentés dans les tableaux *V.1-5*.

² Ce calcul est très comparable à celui de $\tau(T)$ (section III.3.2) sauf qu'ici, dans la résolution de l'équation d'Orowan, on ne fixe pas la température mais le niveau de contrainte.

En pression, le régime basse contrainte-basse température est décrit de manière comparable par la loi de vitesse en exponentielle et celle en sinus hyperbolique. L'écart relatif, sur les températures calculées à 10 MPa, est inférieur au pourcent quelle que soit la pression. Pour $\tau=1$ MPa, l'écart relatif entre les deux températures est au maximum de 4,25% (Tab. V.6). On remarque que si ces deux formalismes sont en bon accord, les températures caractéristiques à 1 et 10 MPa sont légèrement différentes des valeurs de T_a (Tab. V.7) définies par l'équation (V.1).

P (GPa)		$\tau=1$ MPa			$\tau=10$ MPa		
		T (K)	T (K)	%	T (K)	T (K)	%
		$\nu \propto f(\exp(\tau, T))$	$\nu = f(\sinh(\tau, T))$	$\Delta T/T$	$\nu \propto f(\exp(\tau, T))$	$\nu = f(\sinh(\tau, T))$	$\Delta T/T$
0	{110}	680	680	0,00	392	392	0,00
	{100}	1798	1808	0,55	1436	1436	0,00
30	{110}	2625	2683	2,16	2096	2097	0,05
	{100}	3638	3695	1,54	2896	2897	0,03
60	{110}	4145	4329	4,25	3451	3461	0,29
	{100}	4743	4845	2,11	3811	3813	0,05
100	{110}	5533	5804	4,67	4635	4656	0,45
	{100}	5595	5761	2,88	4568	4573	0,11

Tab. V.6 Influence de la loi de mobilité dans le régime basse contrainte-basse température en fonction de la pression. Les valeurs de $T(\tau)$ issues des formalismes en exponentiel et en sinus hyperbolique sont en accord pour les deux systèmes de glissement à 0, 30, 60 et 100 GPa. Pour chaque plan, les calculs sont paramétrés sur les propriétés du caractère ayant la plus grande valeur de ΔH_0 .

P (GPa)	0		30		60		100	
	{110}	{100}	{110}	{100}	{110}	{100}	{110}	{100}
T_a	655	1551	2075	2955	3105	3768	4068	4275
% $\Delta T/T$ (1 MPa)	2,21	13,7	21,0	18,8	25,1	20,6	26,5	23,6
% $\Delta T/T$ (10 MPa)	41,1	7,41	1,00	2,00	10,0	1,13	12,2	6,4

Tab. V.7 Température de transition athermique T_a en pression. T_a est calculée à partir de l'équation (V.I). Les incertitudes relatives sont calculées par rapport aux températures présentées Tab. V.6.

Les valeurs de T_a calculées à partir de l'équation (V.1) sont en bon accord avec les valeurs de températures calculées pour une contrainte de 1 MPa à pression ambiante. Cependant, on remarque que l'écart relatif augmente en pression. T_a est alors plus proche des valeurs de température calculées à 10 MPa de contrainte. À une contrainte τ fixée, plus la contrainte de Peierls est élevée, plus la largeur $w^*(\tau)$ augmente (équation (III.2)). On en déduit que, pour une contrainte τ , plus la largeur des double-décrochements (ou τ_p) croît, plus $T(\tau)$ augmente. Ce raisonnement explique l'accroissement de l'écart entre les valeurs de $T(1 \text{ MPa})$ et celles de T_a en pression qui ne prennent pas en compte l'évolution de $w^*(\tau)$ à basse contrainte.

V.2.3 Contraintes critiques de cisaillement dans le régime thermiquement activé

Les résultats présentés sections V.1.2 et V.2.1 sont utilisés afin de paramétrer une loi de mobilité dans le régime thermiquement activé à 30, 60 et 100 GPa de pression hydrostatique. Nous avons présenté, section III.3.2, une méthode qui permet de calculer la contrainte appliquée, dans le régime thermiquement activé, à partir de l'équation d'Orowan et de la loi de mobilité des dislocations. Cette méthode a fourni, à pression ambiante, les mêmes résultats que ceux obtenus en Dynamique des Dislocations³. Elle est utilisée ici afin de déterminer l'évolution des CRSS dans le régime thermiquement activé, en fonction de la pression. Aucune distinction entre la contrainte appliquée calculée et la contrainte critique de

³ Rappelons que la résolution de l'équation d'Orowan dans le régime thermique s'appuie sur le fait que les interactions locales entre dislocations ne contrôlent pas les valeurs de CRSS en dessous de T_a . Ce calcul ne tient pas compte de l'influence du champ de contrainte interne discuté section IV.4.2

cisaillement n'est faite dans la suite de cette étude. En combinant l'équation d'Orowan (I.4) et le formalisme en exponentiel de la loi de mobilité, on aboutit à l'expression suivante :

$$\dot{\varepsilon} = \sqrt{\rho} \frac{v_D a' b^2}{2w^*(\tau)^2} \exp\left(-\frac{\Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (V.3)$$

Contrairement aux calculs réalisés à pression ambiante pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, des lois de mobilité pour les caractères vis et coins ont été paramétrées afin de tenir compte de la transition de caractères observée *Fig. V.4*. À 30 et 60 GPa, l'évolution de la contrainte appliquée en fonction de la température a été calculée pour les deux caractères et nous avons choisi de définir la CRSS comme la valeur la plus élevée des deux contraintes appliquées. Un exemple caractéristique de cette méthode est présenté *Fig. V.6*.

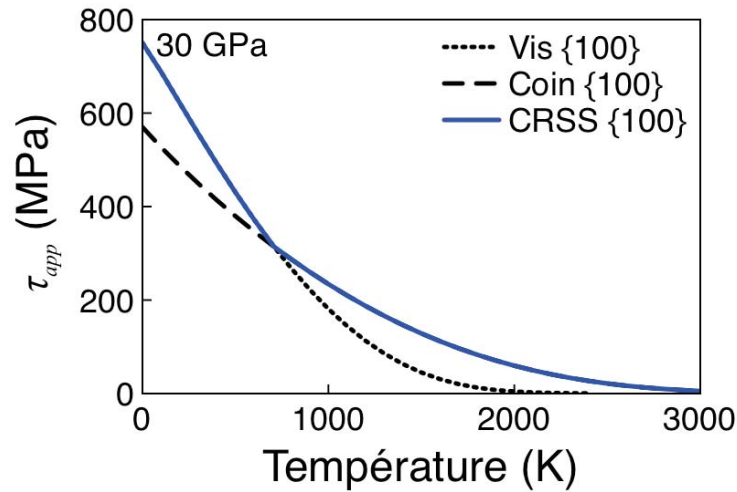


Fig. V.6 CRSS pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ à 30 GPa. $\dot{\varepsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Les contraintes appliquées calculées pour les deux caractères se croisent. La CRSS, à une température donnée, est définie comme la valeur maximale des contraintes appliquées.

Les calculs de CRSS en pression sont présentés *Fig. V.7*. Comme cela était déjà le cas à pression ambiante, pour chaque calcul, la vitesse de déformation a été fixée à 10^{-4} s^{-1} , la densité de dislocation à 10^{12} m^{-2} et la longueur caractéristique L à $1 \text{ } \mu\text{m}$ ($1/\sqrt{\rho}$). Nous avons vu au cours des chapitres I et III, que le système de glissement « facile » dans MgO, à pression ambiante, est le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ présente des CRSS beaucoup plus élevées (d'environ un ordre de grandeur) à cette pression. Néanmoins, les résultats présentés *Fig. V.7* montrent que l'écart entre les deux familles de systèmes se

réduit fortement à 30 GPa pour présenter une inversion de systèmes de glissement à partir de 60 GPa (Fig. V.7c).

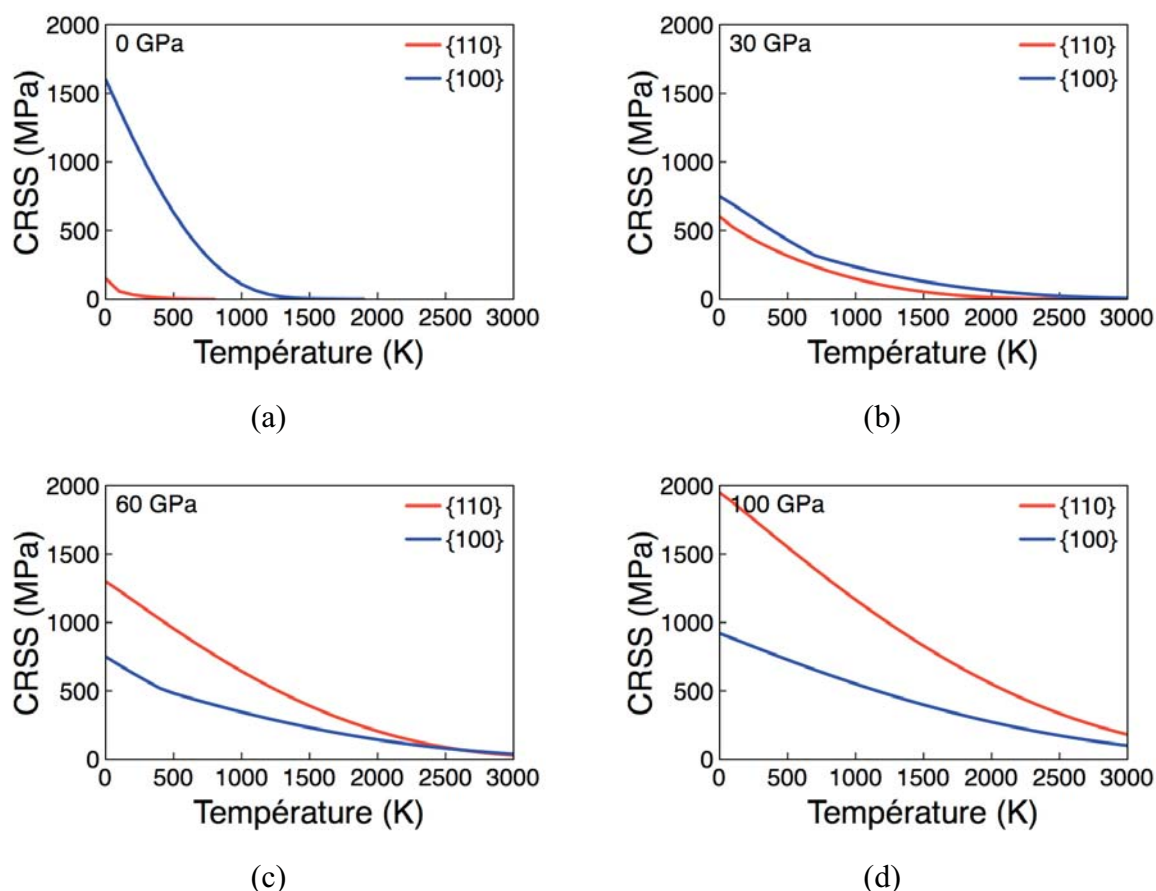


Fig. V.7 CRSS en fonction de la température à 0 (a), 30 (b), 60 (c) et 100 GPa (d). Résolution de l'équation (V.3) pour une densité de dislocation de 10^{12} m^{-2} et une vitesse de déformation de 10^{-4} s^{-1} .

Les différences d'activité entre les deux familles de systèmes de glissement laissent supposer que la transition apparaît peu après 30 GPa (Fig. V.7b et V.7c). À haute pression, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ est donc le plus « facile » à activer. Enfin, on remarque que plus la pression augmente et plus les contraintes sont élevées. À 1000 K, la contrainte est de quelques dizaines de MPa dans $\{100\}$ à 0 GPa alors qu'elle est supérieure à 500 MPa pour les deux systèmes de glissement à 100 GPa.

V.3 Discussion

V.3.1 Les propriétés élastiques

Afin de prévenir la rupture de certains matériaux fragiles, des études de déformation ont été menées sous pression de confinement. Dans le cas de MgO, l'ordre de grandeur des pressions impliquées, de l'ordre de quelques centaines de MPa, n'induit pas de changement significatif sur la plasticité intrinsèque, si ce n'est d'inhiber la formation et la propagation de fissures (*Paterson & Weaver 1970 ; Auten et al. 1976*). À plus haute pression, on peut s'attendre à ce que la structure électronique et les liaisons interatomiques des solides soient modifiées. On peut chercher à mettre en évidence cet effet à partir de l'évolution en pression des constantes élastiques. (*Karki et al. 1997 ; Zha et al. 2000 ; Murakami et al. 2009*). Nous avons montré dans la section V.1.1, que pour MgO, C_{11} augmente de 290% entre 0 et 100 GPa, C_{12} de 150% et C_{44} de 40% (*Tab. V.1*). Remarquons que les pressions impliquées sont du même ordre de grandeur que les constantes élastiques. Le module de cisaillement μ varie quant à lui d'un facteur 2,5 entre ces deux pressions. On peut donc anticiper que les propriétés plastiques fonction de μ (contrainte de nucléation, contrainte de la forêt, champ de contrainte, etc.) seront affectées par l'évolution en pression des constantes élastiques (*Poirier 1985*).

V.3.2 Les structures de cœur des dislocations

Dans ce travail, nous montrons que la pression n'influence pas seulement les propriétés élastiques. Elle modifie aussi la structure de cœur des dislocations et affecte de ce fait leurs mobilités. La question de l'influence de la pression sur la structure et la mobilité des dislocations a été initialement posée par *Fontaine & Haasen (1969)*. Ces auteurs ont corrélié l'effet de pression, observé dans NaCl, à la variation de largeur de dissociation des dislocations coins dans des plans $\{110\}$. La même approche a été reprise, au travers de calculs à l'échelle atomique, dans *Belzner & Granzer 1977*. Plus récemment, quelques études ont été menées afin de calculer l'effet de la pression sur les structures de cœur de dislocation et leur mobilité dans des métaux de structure CC ou CFC et dans les semi-conducteurs (*Bulatov et al. 1999 ; Yang et al 2001 ; Pizzagalli et al. 2009*).

Notre MME est basée sur le calcul de structures de cœur de dislocation via la méthode de Peierls-Nabarro-Galerkin. Cette approche utilise en données entrée des constantes

élastiques et des γ -surfaces calculées *ab initio*. L'énergie des γ -surfaces augmente avec l'accroissement de la pression. Néanmoins, l'énergie croît plus lentement dans les plans $\{100\}$ que dans les plans $\{110\}$ de telle sorte qu'à haute pression, l'énergie dans les plans $\{100\}$ est inférieure à celle dans $\{110\}$.

L'étalement des structures de cœur de dislocations coins diminue avec la pression. La normalisation de ξ_i par le vecteur de Burgers permet de décorrélérer l'influence de l'élasticité sur la réduction de la largeur des cœurs (*Tab. V.3*). Sur la figure *V.3b*, on remarque que le profil de f_i/b dans les plans $\{100\}$ ne varie pas avec la pression. On considère que dans ce cas, l'effet observé est essentiellement contrôlé par l'évolution en pression des propriétés élastiques. Par conséquent, la contrainte de Peierls normalisée pour la dislocation coin dans $\{100\}$ varie peu en pression (elle est de l'ordre de $2.10^{-3} \mu$). Contrairement à l'effet purement élastique observé pour la dislocation coin dans $\{100\}$, f_i/b varie avec la pression pour la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (*Fig. V.3a* et *Tab. V.3*). À pression ambiante, le cœur de la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est étendu, ce qui conduit à une contrainte de Peierls relativement faible de l'ordre de $5.10^{-4} \mu$. Au-delà de 60 GPa, la structure de cœur est étroite, elle est caractéristique d'une friction de réseau plus importante et la contrainte de Peierls est élevée ($2.10^{-3} \mu$).

Néanmoins, l'effet de la pression le plus important apparaît sur la structure de cœur de la dislocation vis. Contrairement à une dislocation coin, la structure de cœur d'une dislocation vis n'est pas assujettie à s'étaler dans un plan de glissement unique. La variation différentielle en fonction de la pression des γ -surfaces des plans $\{110\}$ et $\{100\}$ induit une modification significative de la topologie de la structure de cœur des dislocations vis. À pression ambiante, 80% du vecteur de Burgers est distribué dans des plans $\{110\}$ alors que le cœur de la dislocation vis est plus étendue dans $\{100\}$ à 100 GPa. Conséquemment, plus la pression augmente, plus la friction de réseau de la dislocation vis augmente dans $\{110\}$ et diminue dans $\{100\}$ (*Tab. V.2*). L'étalement dans $\{111\}$, même en pression, n'est pas assez significatif pour considérer $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ comme un système de glissement favorable. Les indices, issus d'expériences à haute pression, d'une hypothétique activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ (*Stretton et al. 2001 ; Li et al. 2004 ; Yamazaki et Karato 2002 ; Mariani et al. 2009*) sont peut être liés aux fortes contraintes mises en jeux. De plus, les échantillons présentés dans ces

études sont déformés à plusieurs dizaines de pourcents ce qui suppose un durcissement important des systèmes primaires.

V.3.3 Pression et paramètres d'activation

Quelle que soit la pression, $w^*(\tau)$ varie de manière non-linéaire à basse-contrainte et converge vers une valeur palier w_c aux contraintes intermédiaires. Le paramètre n de l'équation (III.2) est toujours de l'ordre de 0,5 en pression. Cette valeur reste en accord avec le modèle de tension de ligne décrit par *Seeger & Schiller 1962*. Le paramètre A est de l'ordre de $0,5w_c$ et m de l'ordre de 0,7. L'équation (III.2) peut donc s'écrire sous la forme (V.4), formulation empirique qui permet de décrire $w^*(\tau)$ des basses contraintes jusqu'au régime intermédiaire.

$$w^*(\tau) \propto \frac{w_c}{2\sqrt{\tau/\tau_p}} \exp(0,7 \tau/\tau_p) \quad (\text{V.4})$$

La sensibilité de w_c à la contrainte de Peierls a été abordée section III.2.2. À tous paramètres constants, w_c varie de manière inversement proportionnelle à τ_p (*Fig. III.9b*). La contrainte de Peierls est la variable qui rend compte de l'influence de P sur la largeur des double-décrochements. Sur la figure V.8, on remarque que, quels que soient le système de glissement, la pression ou le caractère de la dislocation, w_c est d'autant plus faible que τ_p est élevée (*Philibert 1979*).

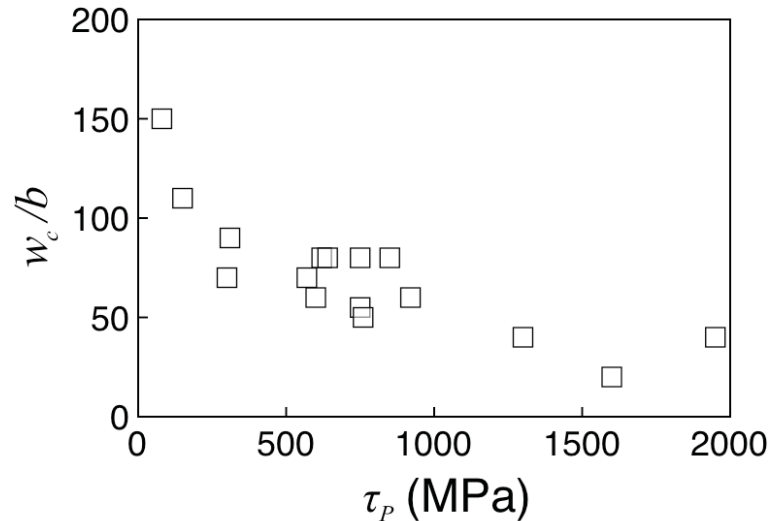


Fig. V.8 Largeur critique w_c des double-décrochements en pression. Les calculs ont été réalisés pour les dislocations vis et coins, pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, à 0, 30, 60 et 100 GPa. Plus la contrainte de Peierls est élevée, plus la largeur palier des double-décrochements, caractéristique des contraintes intermédiaires, est faible.

Les calculs présentés figure V.4 montrent que la pression a un effet significatif sur $\Delta H^*(\tau)$ et notamment sur les valeurs de ΔH_0 . Dans les plans $\{110\}$, le cœur de la dislocation vis est de moins en moins étalé dans les plans $\{110\}$. Par conséquent, la contrainte de Peierls et ΔH_0 augmentent fortement lorsque la pression croît. La réduction modérée de la taille du cœur de la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ en pression induit un effet sur τ_P et ΔH_0 qui est moins significatif que celui pour la dislocation vis. Quelle que soit la pression, l'enthalpie d'activation des double-décrochements est plus importante pour les dislocations vis que pour les dislocations coins dans $\{110\}$. Le caractère vis est donc le caractère qui gouverne le glissement dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, le durcissement élastique induit par la pression est compensé par la diminution de la friction de réseau qui est corrélée à l'accroissement de l'étalement du cœur dans le plan. La composante coin devient alors le caractère qui gouverne sur l'ensemble de la gamme de contrainte à haute pression. À titre comparatif, la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ ont des valeurs de ΔH_0 qui convergent à haute pression (Fig. V.9b) alors que la contrainte de Peierls augmente davantage pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ que pour la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (Fig. V.9a). Ces deux informations permettent à elles seules d'anticiper la transition de systèmes de glissement observée, sur les courbes de CRSS, entre 30 et 60 GPa.

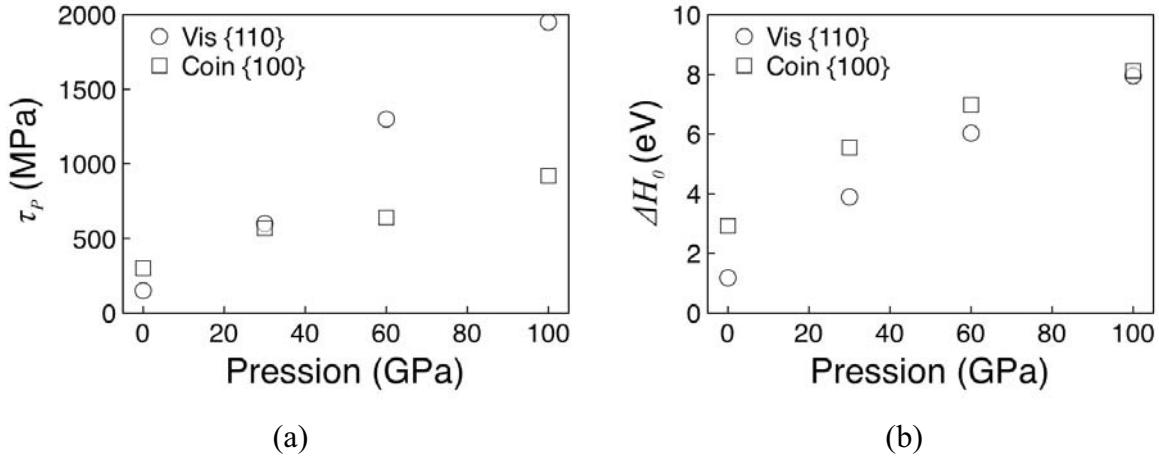


Fig. V.9 Contrainte de Peierls et enthalpie d'activation à contrainte nulle pour les dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Calculs réalisés à 0, 30, 60 et 100 GPa. (a) τ_P augmente davantage pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ que pour la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. (b) les calculs de ΔH_0 convergent vers des valeurs comparables à haute pression.

V.3.4 Les systèmes de glissements actifs en pression

Après avoir identifié le caractère dominant pour chacun des systèmes de glissement et à chaque pression, nous avons paramétré des lois de mobilité de type double-décrochements. Pour une densité de dislocation et une vitesse de déformation données (respectivement 10^{12} m^{-2} et 10^{-4} s^{-1}), la résolution de l'équation d'Orowan permet de calculer l'évolution des CRSS en fonction de la température, pour les différentes pressions (Fig. V.7). La pression induit différents effets dont l'inversion de système de glissement. Cette propriété peut se résumer au travers d'un diagramme P - T (Fig. V.10). En dessous de 30-40 GPa, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ est le plus « facile » à activer (zone en rouge). La zone en jaune décrit un régime où les deux systèmes sont potentiellement activés. Elle est définie à partir des deux critères suivant : (i) $|\tau_{\{110\}} - \tau_{\{100\}}| < 20 \text{ MPa}$ (ii) $80\% < \tau_{\{110\}} / \tau_{\{100\}} < 120\%$. Le premier critère permet de définir une limite lorsque l'un des deux systèmes a atteint une température supérieure à la température de transition athermique calculée. Par exemple, si la température est supérieure à T_a dans le système i , on suppose que les deux systèmes peuvent être actifs si la contrainte dans j est inférieure à 20 MPa. Si la contrainte est supérieure à 20 MPa dans j , i est le seul système actif. Ce critère explique par exemple la transition $\{110\} \rightarrow \{110\} + \{100\}$ autour de 1500 K à 0 GPa. Le second critère est appliqué lorsque les contraintes calculées dans les deux systèmes sont non-nulles. S'il existe un écart d'au moins 20% entre les contraintes de cisaillement dans les deux systèmes, alors celui qui a la contrainte la plus faible est considéré comme l'unique

système activé. Sinon, les deux sont considérés comme potentiellement actifs. Au-delà de 60 GPa, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ est le plus facile à activer sur une gamme de température plus importante, du fait de l'augmentation de T_a avec la pression (zone en bleu).

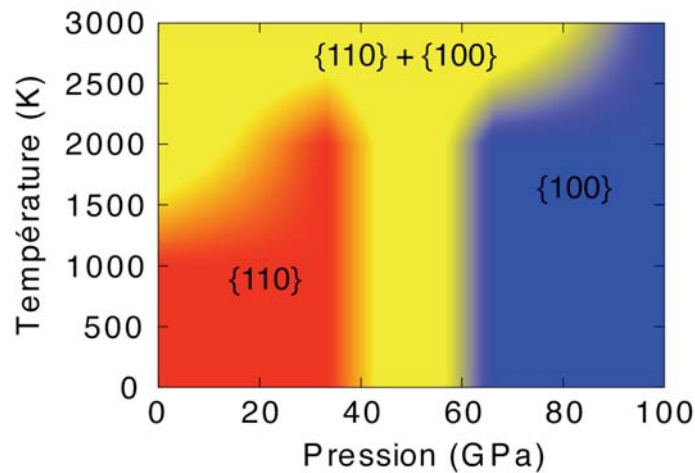


Fig. V.10 Diagramme P-T des systèmes de glissement actifs. Les domaines de couleurs rouge et bleu caractérisent les gammes de pression-température où respectivement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ sont les systèmes les plus « faciles » à activer. L'intervalle en jaune d'écrit une gamme mixte, où les deux systèmes sont potentiellement actifs.

Un autre effet lié à l'accroissement de la pression est d'augmenter considérablement les niveaux de contraintes des systèmes actifs à une température donnée. L'augmentation de la friction de réseau induite par l'évolution des structures de cœur en pression entraîne une hausse des CRSS. À vitesse de déformation constante, l'accroissement de la pression « repousse » aux plus hautes températures la fin du régime thermiquement activé.

V.3.5 Comparaison aux travaux expérimentaux

L'évolution de l'activité des systèmes de glissement en pression est en accord avec les prévisions de *Karato 1998*. Dans cette étude, l'auteur suppose que l'augmentation de la polarisation ionique est à l'origine d'une transition de systèmes de glissement autour de 20 GPa dans MgO. Dans *Girard et al. 2011*, les auteurs présentent des expériences de déformation, réalisées en presse D-DIA jusqu'à 10 GPa de pression. Les essais ont été réalisés sur des monocristaux, orientés de façon à activer indépendamment les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. La vitesse de déformation est l'ordre de 10^{-6} - 10^{-5} s⁻¹. Les

auteurs montrent que l'extrapolation du différentiel de contrainte entre les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ convergent vers une transition de système de glissement aux alentours de 23 ± 12 GPa.

Comme nous l'avons déjà mentionné au cours du Chapitre I, il existe dans la littérature peu d'études qui font références aux propriétés plastiques de MgO en pression. De plus, comme le soulignent les auteurs dans *Uchida et al. 2004*, les mesures de contraintes, dans les essais mécaniques en pression, sont souvent réalisées à température ambiante et après des dizaines de pourcent de déformation. Comme MgO présente un taux de durcissement θ important, même en pression (*Auten et al. 1976 ; Uchida et al. 2004*), la contrainte mesurée n'est pas une contrainte critique de cisaillement mais reflète une contrainte d'écoulement plastique relative à une déformation donnée et à un taux de durcissement souvent mal connu. Les contraintes expérimentales, dans les essais en D-DIA ou en CED, sont donc souvent bien plus grandes que nos CRSS, de l'ordre de plusieurs GPa, elles peuvent donc difficilement leur être comparées.

Les travaux de *Mei et al. 2008*, présentés section I.2.7, montrent des niveaux de contrainte plus proches de ceux qui sont attendus pour des valeurs de CRSS (de l'ordre de la centaine de MPa). Les contraintes en presse D-DIA sont mesurées localement, par diffraction X, à partir des déformations élastiques que montrent les distances interplanaires des plans réticulaires hkl . Les expériences sont réalisées pour des vitesses de déformation comprises entre 10^{-5} et 10^{-4} s^{-1} , à 1473 K, ce qui nous permet d'envisager une comparaison à nos calculs. Nos valeurs de contraintes, calculées à $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ et 1500 K (*Fig. V.7*), ont été ajustées sur une loi puissance (équation (I.16)) et nous avons mesuré l'effet de pression en calculant des volumes d'activation via l'équation (I.17). En utilisant le même exposant de contrainte $n=3$ que les auteurs, nous avons calculé des volumes d'activation de $V_{\{110\}} \sim 1,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ et $V_{\{100\}} \sim 2,3 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$. Ces valeurs sont en accord avec la valeur de $V_{\{200\}} \sim 2,4 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ présentée dans *Mei et al. 2008*, ce qui suppose que les mécanismes responsables de la déformation dans les essais de *Mei et al. 2008* ont la même sensibilité en pression que le mécanisme de double-décrochements.

Dans ce chapitre, la MME présentée au chapitre II a été utilisée afin de décrire les CRSS de MgO monocristallin à des pressions représentatives du manteau inférieur terrestre.

À l'échelle atomique, la pression influe sur les liaisons inter-atomiques, ce qui se traduit par une augmentation significative des constantes élastiques. Mais ce n'est pas le seul effet de la pression sur la plasticité. L'évolution en pression des structures de cœur de dislocation affecte la friction de réseau et étend le régime thermiquement activé sur une large gamme de températures. L'accroissement différentiel des CRSS dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ est responsable d'une transition de systèmes de glissement au-dessus de 30 GPa, pression à partir de laquelle le glissement dans les plans $\{100\}$ devient plus favorable. Néanmoins, une investigation expérimentale plus approfondie est nécessaire afin de confirmer (ou d'infirmer) ce résultat.

Après avoir entrevu, dans ce chapitre, l'effet de la pression sur les premiers stades de la plasticité aux vitesses de déformation du laboratoire, le dernier chapitre de cette thèse sera consacré à la déformation de MgO monocristallin dans les conditions de faibles vitesses de déformation du manteau terrestre.

CHAPITRE VI

PLASTICITE DE MgO DANS LES CONDITIONS DE VITESSE DE DEFORMATION, DE PRESSION ET DE TEMPERATURE DU MANTEAU TERRESTRE

Les lents mouvements de convection du manteau terrestre sont associés à la déformation de roches solides, dans des conditions extrêmes de pression et de température. Nous avons vu au chapitre V que la pression induit plusieurs effets significatifs sur les propriétés plastiques de MgO comme l'inversion de système de glissement et l'augmentation des contraintes critiques de cisaillement. Outre la pression, le second paramètre qui rend compte de ces conditions singulières est la vitesse à laquelle le manteau se déforme. Alors que les essais expérimentaux sont effectués à des vitesses de déformation supérieures à 10^{-6} s^{-1} , les roches (dans leur milieu naturel) se déforment à des vitesses de l'ordre de 10^{-14} - 10^{-16} s^{-1} (*Carter 1976 ; Pfiffner & Ramsay 1982*).

Dans ce chapitre, nous présenterons l'évolution des propriétés rhéologiques de MgO dans un régime faible vitesse de déformation-faible contrainte, caractéristique du manteau inférieur. La démarche technique introduite dans les chapitres II et III est appliquée. Elle permet de calculer des contraintes critiques de cisaillement aux vitesses caractéristiques du manteau. Cette étude tient compte des structures de cœur calculées en pression, présentées au chapitre V, de façon à reproduire les conditions de pression du manteau.

Dans une première partie, nous présenterons l'effet induit par les faibles vitesses de déformation sur les contraintes critiques et sur la température de transition athermique. La seconde partie de ce chapitre sera consacrée aux propriétés rhéologiques de MgO dans les conditions du manteau. Pour décrire le comportement de MgO dans l'ensemble du manteau inférieur, les calculs présentés seront extrapolés jusqu'à 140 GPa, pression caractéristique de la limite noyau-manteau. Cette partie traitera aussi de l'influence de la vitesse de déformation sur les régimes de déformation. Enfin, ce chapitre s'achèvera par une section réservée à la discussion des résultats.

VI.1 Faibles vitesses de déformation et mécanismes

VI.1.1 Mobilité des dislocations

Dans les chapitres précédents, nous avons vu que la plasticité dans MgO est caractérisée par deux régimes de déformation (le régime thermiquement activé et le régime athermique) délimités par une température de transition T_a . Au chapitre V, nous avons pu remarquer qu'à haute pression et dans les conditions de vitesse de déformation du laboratoire, la déformation de MgO est thermiquement activée sur une large gamme de température (*Fig. V.7* et *Fig. V.10*). Dans ce régime, nous avons défini la loi de mobilité thermiquement activée d'une dislocation isolée à partir de ses propriétés de cœur et du modèle IE (équation (II.28)). Les paramètres des lois de mobilité en pression sont rappelés dans les tableaux *V.1* à *V.5*. La figure *VI.1* illustre des calculs de vitesses, réalisés à partir de l'équation (II.28), à 30 et 60 GPa de pression pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Les différentes courbes représentées montrent que la vitesse des dislocations (et donc implicitement la vitesse de déformation) ne varie pas linéairement avec la contrainte dans le régime thermiquement activé.

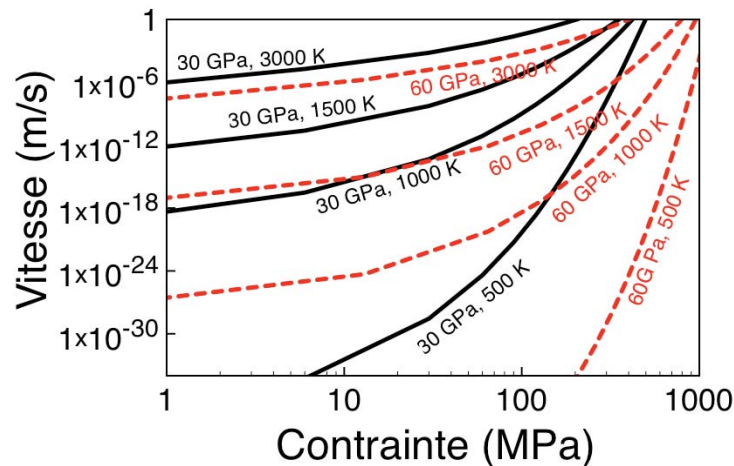


Fig. VI.1 Vitesse de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Plusieurs exemples de températures et de pressions sont illustrés. On remarque que la pente des courbes varie en fonction de la température, de la contrainte et de la pression.

VI.1.2 Influence de $\dot{\epsilon}$ sur les contraintes critiques de cisaillement

En suivant la méthode appliquée aux chapitres III et V, la contrainte dans le régime thermiquement activé peut être calculée pour une vitesse de déformation et une densité de dislocation données. Les contraintes critiques présentées Fig. VI.2 sont calculées à une vitesse de déformation imposée à 10^{-16} s^{-1} , pour une densité de dislocation $\rho = 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Elles sont présentées en comparaison directe avec les calculs réalisés à 10^{-4} s^{-1} , introduits dans la section V.2.3.

Quel que soit le système de glissement, les CRSS sont moins élevées à faible vitesse de déformation. La figure VI.2c montre que la température de transition entre systèmes de glissement dépend de la vitesse de déformation. À 60 GPa et 10^{-4} s^{-1} , $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ devient le système de glissement le plus « facile » au-delà de 2500 K alors que cette transition apparaît à 1150 K à 10^{-16} s^{-1} .

Alors qu'au chapitre V, nous avons montré que la pression induisait une augmentation de la friction de réseau, la baisse de la vitesse de déformation entraîne l'effet inverse. La diminution de la contrainte en vitesse de déformation se comprend très bien à partir de l'équation d'Orowan (équation (I.4) ou (V.3) pour une forme plus détaillée) : à densité de dislocation constante, si la vitesse de déformation décroît, la vitesse des dislocations diminue via à une réduction de la contrainte ou de la température (Fig. VI.3).

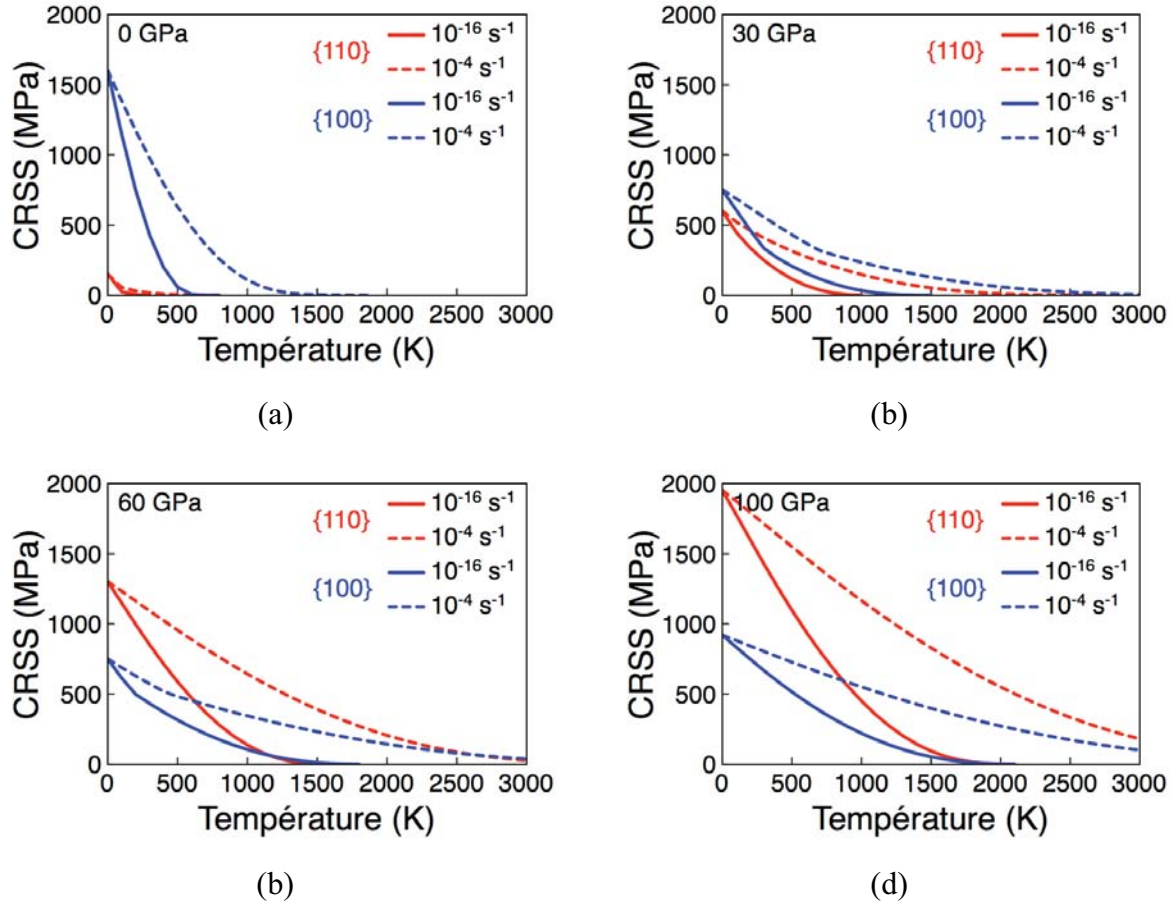


Fig. VI.2 Evolution des CRSS dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ à 10^{-16} s^{-1} et 10^{-4} s^{-1} . Les calculs ont été réalisés à 0 (a), 30 (b), 60 (c) et 100 GPa (d). Les calculs à 10^{-16} s^{-1} de vitesse de déformation (traits pleins) sont comparés aux résultats à haute vitesse de déformation (tirets), déjà présentés Fig. V.7.

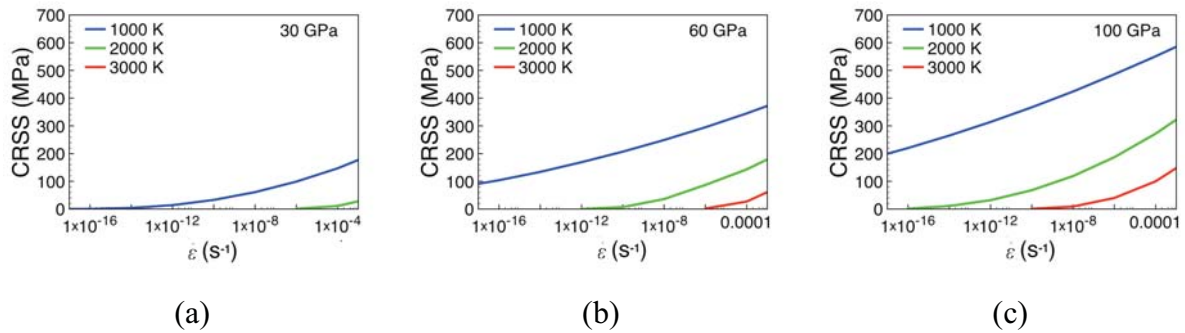


Fig. VI.3 Influence de la température et de la vitesse de déformation sur les CRSS en pression. Les calculs ne prennent en compte que le système de glissement le plus facile. Trois températures 1000, 2000 et 3000 K sont présentées sur chacune des représentations graphiques.

Tant que la plasticité, dans le régime thermiquement activé, est gouvernée par le glissement de dislocations, les CRSS dépendent directement de la vitesse de déformation et de la température. Les CRSS augmentent lorsque la vitesse de déformation croît ou lorsque la température diminue (*Fig. VI.3*).

VI.1.3 Température de transition athermique

Les CRSS sont sensibles aux grandes variations de vitesse de déformation. Lorsque la vitesse de déformation décroît, les CRSS diminuent. Le potentiel de Peierls n'est pas affecté par les variations de vitesse de déformation, c'est la probabilité de nucléation de double-décrochements stables qui diminue. Une fréquence de nucléation de double-décrochements plus faible réduit la vitesse des dislocations et a fortiori, la vitesse de déformation. À faible vitesse de déformation, le régime athermique est donc défini pour une température caractéristique plus faible (*Fig. VI.4*).

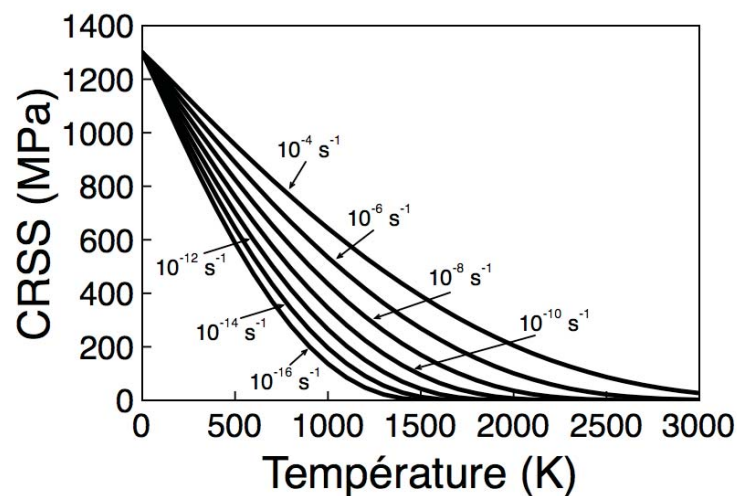


Fig. VI.4 Influence de la vitesse de déformation sur le régime thermiquement activé. Calculs réalisés à 60 GPa pour le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ à des vitesses de déformation imposées de 10^{-16} , 10^{-14} , 10^{-12} , 10^{-10} , 10^{-8} , 10^{-6} et 10^{-4} s^{-1} . Plus la vitesse de déformation est faible, plus la transition de régime a lieu à basse température.

Nous avons vu, au cours de la section V.2.2, que lorsque la divergence à basse contrainte de la largeur des double-décrochements est prise en compte dans la loi de mobilité, on ne peut plus déterminer une forme analytique de T_a . Néanmoins, un calcul de $T(\tau)$, lorsque la contrainte est de l'ordre du MPa, fournit une température caractéristique, proche de la définition conventionnelle de T_a (équation (V.1)). L'évolution de la température

caractéristique pour une contrainte inférieure ou égale à 0,5 MPa, en fonction de la pression et de la vitesse de déformation, est représentée *Tab. VI.1*. Elle est directement calculée à partir des courbes de CRSS, à chaque vitesse de déformation.

Les données présentées dans le tableau *VI.1* montrent deux résultats importants (i) la température de transition entre les régimes thermiquement activé et athermique est d'autant plus basse que la vitesse de déformation est faible (ii) les variations de la température de transition par rapport à la vitesse de déformation sont d'autant plus importantes que la vitesse de déformation est élevée.

P (GPa)	$\dot{\epsilon}$ (s^{-1})						
	10^{-16}	10^{-14}	10^{-12}	10^{-10}	10^{-8}	10^{-6}	10^{-4}
0	300	400	400	400	500	600	800
30	1000	1200	1300	1500	1800	2100	2700
60	1600	1800	2000	2300	2700	3300	4200
100	2100	2400	2700	3100	3600	4400	5600

Tab. VI.1 Evolution de $T(\tau)$, en Kelvin, pour une contrainte inférieure ou égale à 0,5 MPa, en fonction de la vitesse de déformation. Les calculs ont été réalisés à 0, 30, 60 et 100 GPa de pression pour le système « facile », proche de la température de transition athermique. Les valeurs présentées sont des limites hautes, l'incertitude absolue sur chaque valeur est de 100 K.

VI.1.4 Densité de dislocation

L'équation (III.9) montre que, dans le calcul de la contrainte effective pour le régime thermiquement activé, densité de dislocation et vitesse de déformation entrent dans un terme logarithmique. Les différences de vitesses de déformation entre les conditions du laboratoire et celles du manteau sont d'une dizaine d'ordres de grandeur, ce qui entraîne, malgré la variation logarithmique, des changements significatifs sur le calcul des CRSS (*Fig. VI.2 et VI.4*).

Si la vitesse de déformation est un milliard de fois plus faible dans le manteau que dans les conditions du laboratoire, une telle variation n'est pas réaliste en termes de densité de dislocation ; elle passerait de $\sim 10^{12} \text{ m}^{-2}$ (ordre de grandeur caractéristique dans les conditions

du laboratoire) à une valeur de $\sim 10^3 \text{ m}^{-2}$, ordre de grandeur qui n'a aucun sens physique. La sensibilité de la contrainte appliquée à la densité de dislocation, dans le régime thermiquement activé, est donc moins importante que la sensibilité à la vitesse de déformation.

Néanmoins, afin de quantifier cette sensibilité, nous avons réalisé une nouvelle série de calculs de CRSS à faible vitesse de déformation imposée, en intégrant une densité de dislocation quatre ordres de grandeur plus faible que dans les conditions du laboratoire (la densité de dislocation passe de 10^{12} à 10^8 m^{-2}). Les paramètres des lois de mobilité utilisées sont les mêmes que pour les calculs à 10^{12} m^{-2} de densité, ils sont présentés *Tab. VI-5*, seules la densité de dislocation mobile et la longueur caractéristique L changent. Les résultats sont présentés *Fig. VI.5*. Ils montrent qu'une variation de densité de dislocation, sur plusieurs ordres de grandeur, a peu d'effet sur le calcul de la contrainte à basse vitesse de déformation.

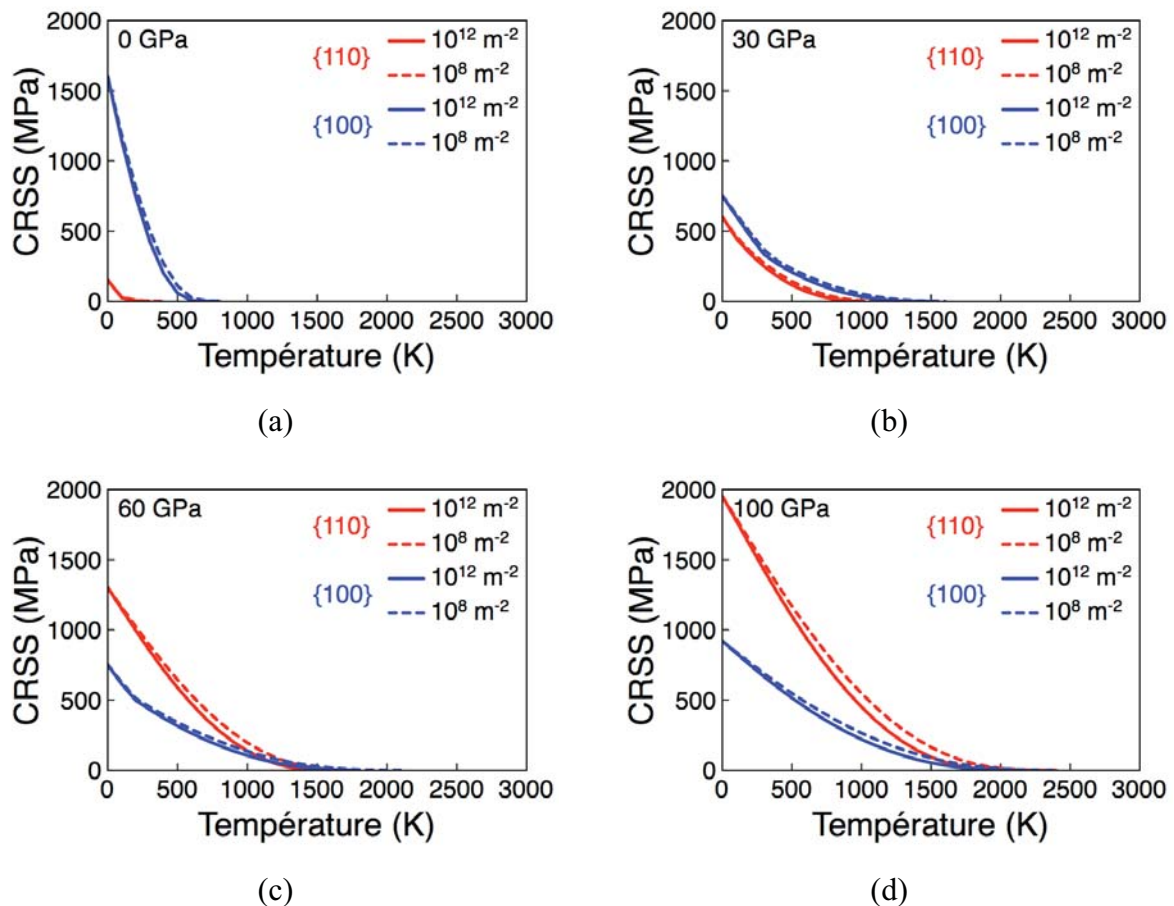


Fig. VI.5 Influence de la densité de dislocation dans le régime thermiquement activé. Les calculs ont été réalisés à 0 (a), 30 (b), 60 (c) et 100 GPa (d) à 10^8 et 10^{12} m^{-2} de densité de dislocation. La vitesse de déformation est fixée à 10^{-16} s^{-1} .

Outre le fait d'évaluer la dérivée de la contrainte effective par rapport à la densité de dislocation, on peut calculer la dérivée de T_a par rapport à ρ , à partir de l'équation (V.1).

$$\frac{dT_a}{d\rho} = - \frac{\Delta H_0}{k\rho \ln\left(\rho b v_0 / \dot{\epsilon}\right)^2} \quad (\text{VI.1})$$

L'équation (VI.1) fournit deux informations importantes : (i) on retrouve bien $dT_a/d\rho < 0$, ce qui souligne que l'étendue du régime thermiquement activé est réduite lorsque la densité de dislocation augmente. Ce premier point confirme les premières tendances observées *Fig. VI.5c* et *VI.5d* (ii) la dérivée de T_a par rapport à la densité de dislocation est d'autant plus importante (en valeur absolue) que la vitesse de déformation est élevée. Ce second point justifie pourquoi, *Fig. VI.5*, les variations de T_a sont faibles, à faible vitesse de déformation (10^{-16} s^{-1}).

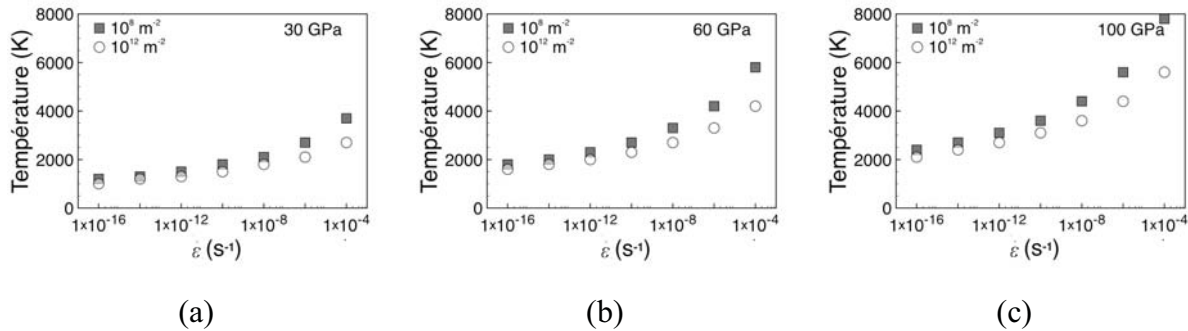


Fig. VI.6 Influence de la densité de dislocation sur la température de transition entre régime thermiquement activé et athermique. Les calculs ont été réalisés à 10^8 et 10^{12} m^{-2} de densité de dislocation, à 30 (a), 60 (b) et 100 GPa (c).

La figure VI.6 montre des valeurs de $T(\tau)$, calculées à basse contrainte pour les deux densités de dislocation, en fonction de la vitesse de déformation. Les observations concernant l'équation (VI.1) sont confirmées : la différence entre les températures calculées pour chacune des deux densités est d'autant plus importante que la vitesse de déformation est élevée. Aux vitesses de déformation du manteau, la température de transition entre les régimes thermiquement activé et athermique reste constante, sur une large gamme de densité de dislocation.

Les résultats observés *Fig. VI.5* sont donc renforcés : à faible vitesse de déformation, les contraintes calculées ne sont que très faiblement dépendantes de la densité de dislocation ρ .

VI.2 Déformation de MgO dans le manteau inférieur

VI.2.1 Extrapolation des données en base de manteau inférieur

Le manteau inférieur s'étend entre 700 et 2900 Km de profondeur ; ces profondeurs correspondent à des pressions comprises entre 25 GPa au niveau de la transition manteau supérieur-manteau inférieur et 135 GPa, à la limite noyau-manteau.

Pour rappel, les calculs de structures de cœur de dislocation, sur lesquels reposent notre MME, ont été réalisés entre 0 et 100 GPa. Afin de bénéficier d'une description des propriétés élastiques et plastiques de MgO dans l'ensemble du manteau inférieur, les données ont été extrapolées jusqu'à 140 GPa.

Les extrapolations à 140 GPa des variations du paramètre de maille a , de la norme du vecteur de Burgers b , du module de cisaillement μ et du module de Poisson ν sont présentées *Fig. VI.7*. Les données présentées *Fig. VI.7a* et *VI.7b* proviennent de régressions polynomiales. Au premier ordre, les évolutions des paramètres présentés *Fig. VI.7c* et *IV.7d* peuvent être décrites par des ajustements linéaires entre 0 et 100 GPa. Chaque ajustement linéaire a été confronté à un ajustement polynomial d'ordre trois, donnant des résultats comparables.

Les principaux paramètres des structures de cœur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ ont aussi été extrapolés à 140 GPa. Parce que ρ_i et ξ_i varient très peu entre 60 et 100 GPa pour ces deux dislocations, les valeurs à 100 GPa ont été conservées à 140 GPa. La valeur de ρ_i , pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$, a été extrapolée à l'aide d'un ajustement linéaire entre 0 et 100 GPa. ρ_i atteint la valeur de 23% de b , à 140 GPa, pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Particulièrement pour ces deux dislocations, les évolutions de τ_P peuvent être décrites, au premier ordre, par des fonction linéaires entre 0 et 100 GPa. Les valeurs de contraintes de Peierls à 140 GPa sont donc calculées à partir d'extrapolations de ces ajustements. Les évolutions des contraintes de Peierls en pression, pour les deux dislocations, sont présentées *Fig. VI.8*.

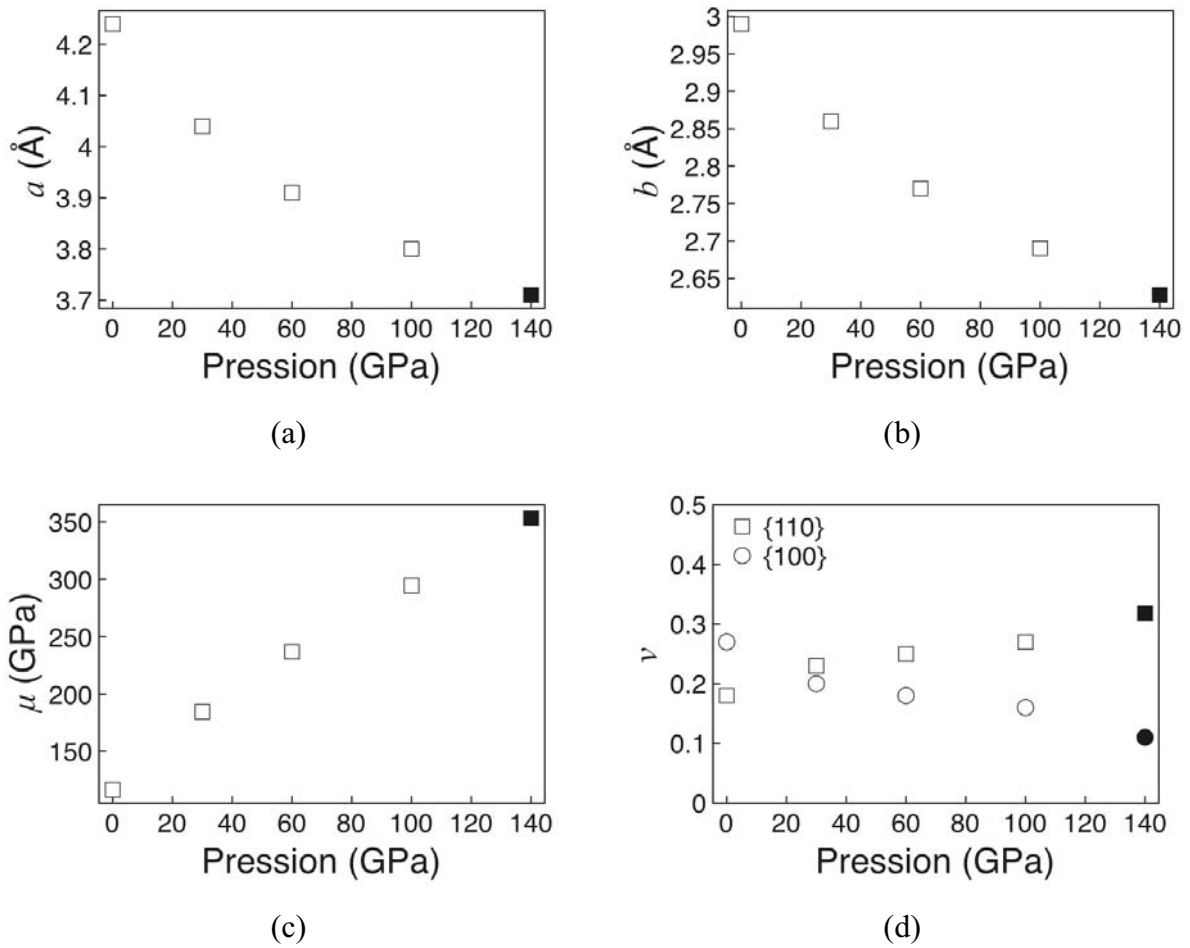


Fig. VI.7 Propriétés élastiques à 140 GPa de pression. Le paramètre de maille a (a), le vecteur de burgers b (b), le module de cisaillement μ (c) et le module de Poisson ν dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$ (d) ont été extrapolés jusqu'à 140 GPa. Les données extrapolées sont représentées par les symboles en noir.

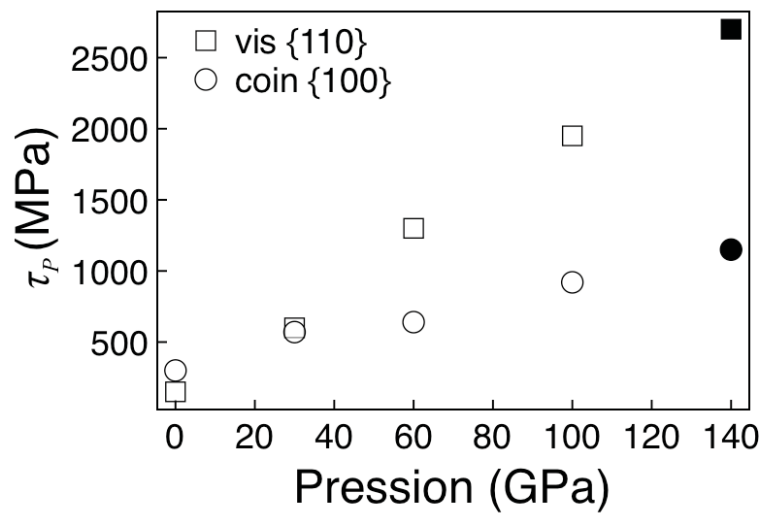


Fig. VI.8 Extrapolation de la contrainte de Peierls à 140 GPa pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et la dislocation coin $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Les données extrapolées sont représentées par les symboles en noir.

Les paramètres extrapolés à 140 GPa sont utilisés afin de calculer (i) des configurations critiques de double-décrochements (énergies d'activation et géométries) (ii) des CRSS, en utilisant les techniques présentées au chapitre II.

Globalement, on retrouve les tendances observées au-delà de la transition de système de glissement (au-delà de 30 GPa). L'extrapolation à 140 GPa induit une augmentation des valeurs de contraintes critiques. Les CRSS pour les plans $\{110\}$ et $\{100\}$, à 100 et 140 GPa, sont présentées Fig. VI.9. Elles sont calculées pour une densité de dislocation de 10^{12} m^{-2} et une vitesse de déformation de 10^{-16} s^{-1} . Dans ces conditions, les valeurs de $T(\tau < 0,5 \text{ MPa})$ sont de 2500 K et de 2700 K, respectivement dans $\{100\}$ et dans $\{110\}$.

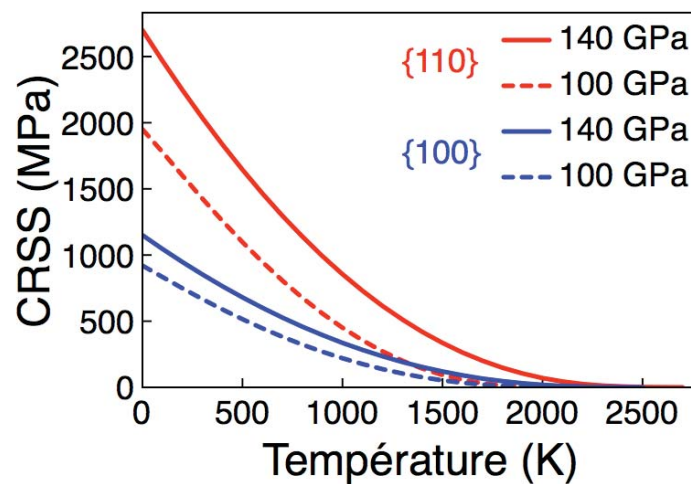


Fig. VI.9 CRSS pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ à 140 GPa de pression. Les calculs sont réalisés à partir de l'extrapolation des paramètres élastiques et de structure de cœur. La vitesse de déformation est fixée à 10^{-16} s^{-1} et la densité de dislocation à 10^{12} m^{-2} . Les résultats à 100 GPa sont représentés à titre comparatif.

VI.2.2 Régimes de déformation

Température et vitesse de déformation sont deux variables conjuguées qui définissent le régime de déformation d'un matériau sous contrainte. Nous avons vu aux chapitres III et IV que, dans le régime thermiquement activé, diminuer la vitesse de déformation ou augmenter la température mène à une réduction de la contrainte appliquée ; alors que dans le régime athermique (au-delà de T_a), la contrainte est définie par les interactions entre dislocations et ne dépend plus de la vitesse de déformation.

Si les régimes de déformation de MgO monocristallin sont bien connus à pression ambiante, aucune information n'est disponible dans la littérature sur leur définition en profondeur, dans les conditions de vitesse de déformation du manteau. Les températures de transition entre le régime thermiquement activé et le régime athermique sont présentées, *Fig. VI.10*, dans un diagramme P - T . Les calculs sont réalisés à deux vitesses de déformation : 10^{-16} s^{-1} , vitesse représentative du manteau terrestre et 10^{-4} s^{-1} , vitesse caractéristique des conditions de laboratoire.

Les calculs dans ces deux régimes de vitesse de déformation mènent à des résultats très différents.

À 10^{-4} s^{-1} , la déformation s'effectue presque exclusivement dans le régime thermiquement activé, régime caractéristique des fortes contraintes (*Fig. VI.10a*). À 10^{-16} s^{-1} (*Fig. VI.10b*), le régime de déformation varie en fonction des gammes de pression et température (i) à basse pression et haute température, la déformation a lieu dans le régime athermique (ii) à haute pression et basse température, la déformation a lieu dans le régime thermiquement activé.

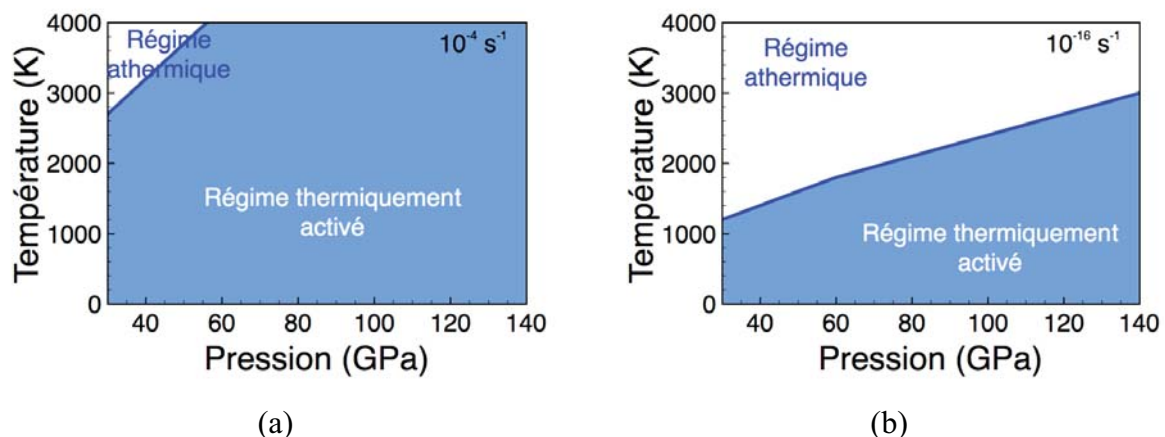


Fig. VI.10 Diagramme P - T des régimes de déformation à 10^{-16} s^{-1} (a) et 10^{-4} s^{-1} (b) de vitesse de déformation. La température de transition représentée est celle du système de glissement « facile ».

À l'intérieur de la Terre, la pression et la température ne sont pas des variables indépendantes. P et T sont corrélées dans des géothermes qui qualifient l'état thermique de notre planète en fonction de la profondeur (Brown & Shankland 1981 ; Anderson 1982 ; Ono 2008 ; Schubert *et al.* 2009). Afin de décrire les régimes de déformation de MgO dans les conditions du manteau inférieur, les calculs en pression (*Fig. VI.10*) sont représentés en fonction de la profondeur à l'aide du modèle PREM (Dziewonski *et Anderson* 1981). Les températures de

transition entre les deux régimes sont directement comparées à plusieurs géothermes (*Fig. VI.11*), représentatifs du manteau inférieur.

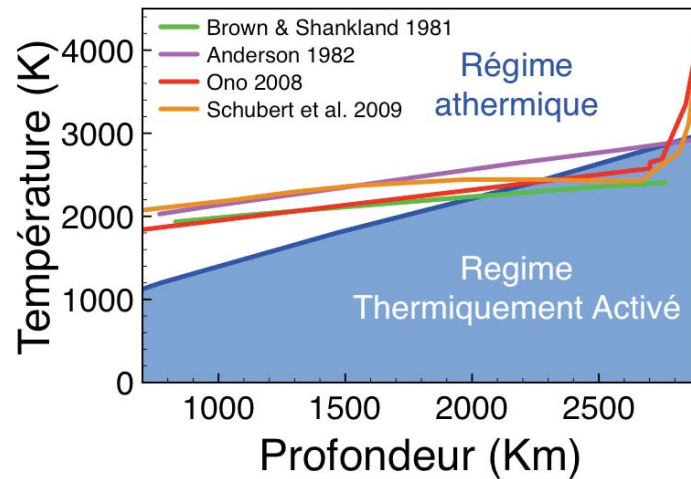


Fig. VI.11 Régimes de déformation de MgO à faible vitesse de déformation et aux températures caractéristiques du manteau inférieur (géothermes).

La figure *VI.11* montre que, dans les conditions du manteau inférieur, la déformation de MgO a lieu presque exclusivement dans le régime athermique (qui ne peut être atteint qu'à très haute température dans les conditions de vitesse de déformation du laboratoire (*Fig. VI.10a*)). En comparant nos températures de transition aux géothermes de *Ono 2008* et *Schuberth et al. 2009*, on remarque que MgO ne peut se déformer dans le régime thermiquement activé que sur une étroite fenêtre de profondeurs comprises entre 2200 et 2800 Km. Dans ce régime, vitesse de déformation et contrainte sont reliées par la loi d'Orowan, il est donc possible d'en déduire une viscosité.

VI.2.3 Viscosité

Le comportement mécanique du manteau terrestre est une question d'échelle d'observation. Il est considéré comme solide aux temps courts. Cependant, à l'échelle de plusieurs millions d'années, le manteau s'écoule. Il est donc caractérisé par les propriétés d'un fluide visqueux. Dans le cas d'un fluide visqueux, la viscosité est définie comme le rapport de la contrainte à la vitesse à laquelle le fluide s'écoule.

$$\sigma = \eta \dot{\epsilon} \quad (\text{VI.2})$$

Où η est la viscosité, en Pa.s.

Pour un fluide newtonien, η est constant alors que pour un fluide caractérisé par un comportement non-linéaire en déformation (non-newtonien donc), η dépend de la contrainte. Dans le régime thermiquement activé, la loi d'Orowan (équation (I.4)) permet de corréler la vitesse de déformation à la contrainte ; on peut donc calculer une viscosité apparente.

Au-delà de T_a , la contrainte est contrôlée par la densité de dislocation et les interactions locales avec la forêt ; elle ne dépend pas de la vitesse de déformation et l'équation (VI.3) ne s'applique pas. Dans les conditions du manteau, MgO se déforme dans le régime thermiquement activé entre 2200 et 2800 Km de profondeur. Nous pouvons calculer une viscosité apparente, caractéristique de la rhéologie de MgO, uniquement dans cet intervalle. Les valeurs calculées sont présentées Tab. VI.2 et illustrées Fig. VI.12.

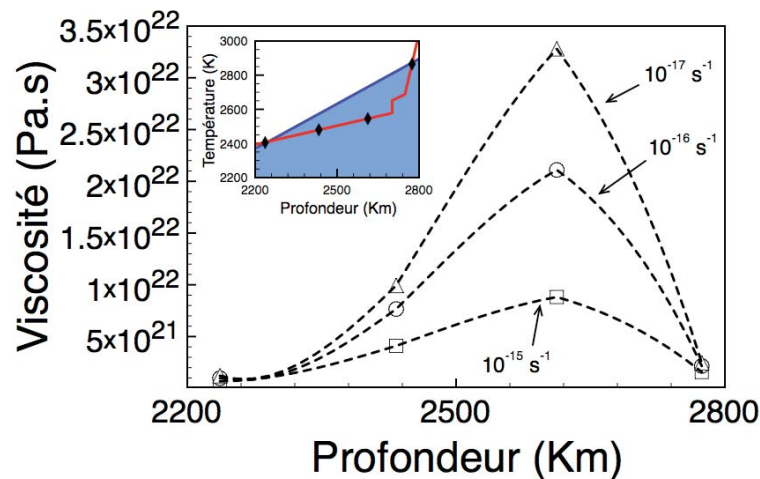


Fig. VI.12 Profil de viscosité de MgO entre 2200 et 2800 Km de profondeur, zone de déformation thermiquement activée. Le géotherme de Ono 2008 et les régimes de déformation sont reproduits dans l'insert. Les symboles indiquent les profondeurs et températures auxquelles ont été réalisés les calculs de viscosité.

Profondeur (Km)	Pression (GPa)	Température (K)	Vitesse de déformation (s ⁻¹)	Contrainte (MPa)	Viscosité (x10 ²¹ Pa.s)
2236	100	2405	10 ⁻¹⁷	0,01	1,21
			10 ⁻¹⁶	0,10	0,98
			10 ⁻¹⁵	0,67	0,67
2433	110	2480	10 ⁻¹⁷	0,10	9,94
			10 ⁻¹⁶	0,77	7,66
			10 ⁻¹⁵	4,10	4,10
2612	120	2545	10 ⁻¹⁷	0,33	32,8
			10 ⁻¹⁶	2,11	21,1
			10 ⁻¹⁵	8,82	8,82
2774	130	2865	10 ⁻¹⁷	0,02	2,46
			10 ⁻¹⁶	0,22	2,16
			10 ⁻¹⁵	1,57	1,57

Tab. VI.2 Viscosité calculée entre 2200 et 2800 Km de profondeur. Calculs réalisés à partir des données dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (les deux systèmes de glissement sont actifs à des contraintes très proches). La température est ajustée sur le géotherme de Ono 2008.

Dans le tableau VI.2, les variations de vitesse de déformation autour de 10^{-16} s^{-1} mènent à de faibles variations de contrainte. Néanmoins, plus la température est inférieure à T_a , plus la variation est conséquente et la viscosité importante (Fig. VI.12). À 10^{-16} s^{-1} et dans la gamme de profondeur où la déformation de MgO est thermiquement activée, la viscosité de MgO monocristal varie entre $0,98 \times 10^{21}$ et $2,11 \times 10^{22} \text{ Pa.s}$.

VI.3 Discussion

Les travaux expérimentaux sont actuellement les principales sources de données concernant l'étude de la déformation plastique des minéraux du manteau. Ces travaux sont

généralement concentrés sur l'examen de propriétés rhéologiques, à contrainte ou vitesse de déformation imposée. L'un des défis actuel est d'effectuer ces essais de déformation dans des conditions de pression et température proches de celles du manteau (jusqu'à 140 GPa et 3000 K). Si de nombreux progrès techniques ont été réalisés dans ce domaine (*Karato & Weidner 2008 ; Raterron & Merkel 2009*), la difficulté majeure réside dans l'incapacité à reproduire les vitesses de déformation naturelles en laboratoire. Si cette contrainte a été évoquée très tôt (*Heard 1963 ; Paterson 1987*), elle n'a reçu que trop peu d'attention dans les dernières décades.

Des lois de puissance (équation (I.16)), semi-empiriques, sont généralement utilisées afin d'ajuster les données expérimentales et de les extrapoler aux conditions du manteau (*Weidner et al. 1994 ; Li et al. 2004 ; Mei et al. 2008*). Dans ces lois, la contrainte apparaît à la puissance n , dans un terme pré-exponentiel. On trouve dans le terme en exponentiel une énergie d'activation, composée d'un terme d'énergie thermique et d'un terme PV . Dès lors, le volume d'activation ne dépend plus de la contrainte mais uniquement de la pression hydrostatique. Cette approche permet la mesure de volumes d'activation apparents, qui quantifient la sensibilité de la déformation à la pression hydrostatique et non pas à la contrainte déviatorique, qui est supposée avoir atteint un régime stationnaire (*steady state*). Contrairement aux essais réalisés à pression ambiante, pour lesquels c'est le volume d'activation qui décrit les mécanismes à l'origine de la plasticité, c'est l'exposant de contrainte qui est supposé renseigner sur les mécanismes de déformation plastique dans les essais en pression. Une valeur discrète de l'exposant de contrainte est souvent associée au mécanisme qui régit la déformation. Généralement, on associe une valeur de $n=1$ à la déformation par fluage diffusion, alors que la déformation par fluage dislocation est caractérisée par des valeurs plus importantes ($n=2$ dans *Mei et al. 2010* ; $n=3,5$ dans *Steinberger & Calderwood 2006* ; $n=4,5$ dans *Mariani et al. 2009*).

VI.3.1 La vitesse de déformation : des conditions du laboratoire au manteau inférieur

Le mécanisme de double-décrochements induit des vitesses de dislocation non linéaires en contrainte dans MgO (*Fig. VI.1*). Cette propriété suppose qu'une extrapolation des mesures réalisées à forte contrainte induit irrémédiablement une sous-évaluation de la vitesse à faible contrainte. En d'autres termes, l'extrapolation de mesures réalisées à forte

contrainte, des conditions de vitesse de déformation du laboratoire vers celles du manteau, n'est pas justifiée (*Fig. VI.13*).

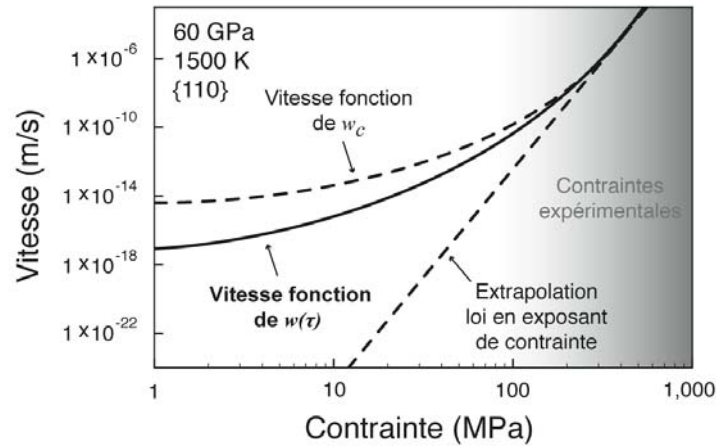


Fig. VI.13 Vitesse des dislocations à 60 GPa, 1500 K dans les plans {110}. L'extrapolation de mesures réalisées dans les conditions expérimentales (forte contrainte) vers les basses contraintes, caractéristiques du manteau, n'est pas justifiée.

Dans le régime thermiquement activé, les interactions locales entre dislocations sont faibles et la loi d'échelle de la forêt ne s'applique plus. Au premier ordre, l'écoulement plastique obéit à la loi d'Orowan. Aux vitesses de déformation du laboratoire (i) la déformation est effective à forte contrainte (*Fig. VI.2*) (ii) la contrainte d'écoulement est sensible aux grandes variations de densité de dislocation (*Fig. VI.6*). Ces deux constats ne semblent pas s'appliquer aux faibles vitesses de déformation pour lesquelles (i) les niveaux de contraintes sont plus faibles (*Fig. VI.1*) (ii) les variations de densité de dislocation n'ont que peu d'effet sur les niveaux de contraintes.

Dans la section VI.2.2, nous avons vu qu'une réduction de la vitesse de déformation entraîne un changement de mécanisme dans les gammes de pressions et de températures du manteau terrestre. La déformation par glissement de dislocations, qui est thermiquement activée à 10^{-4} s^{-1} , devient presque exclusivement athermique à 10^{-16} s^{-1} (*Fig. VI.10*). La figure VI.14 illustre l'évolution des températures de transition de régime de déformation et de systèmes glissement actifs en fonction de la vitesse de déformation.

Les contraintes calculées entre 10^{-16} et 10^{-4} s^{-1} ont été ajustées sur une loi de puissance (équation (I.16)). Les valeurs de l'exposant de contrainte n , dans le régime thermiquement activé, sont indiquées par les plages de couleurs.

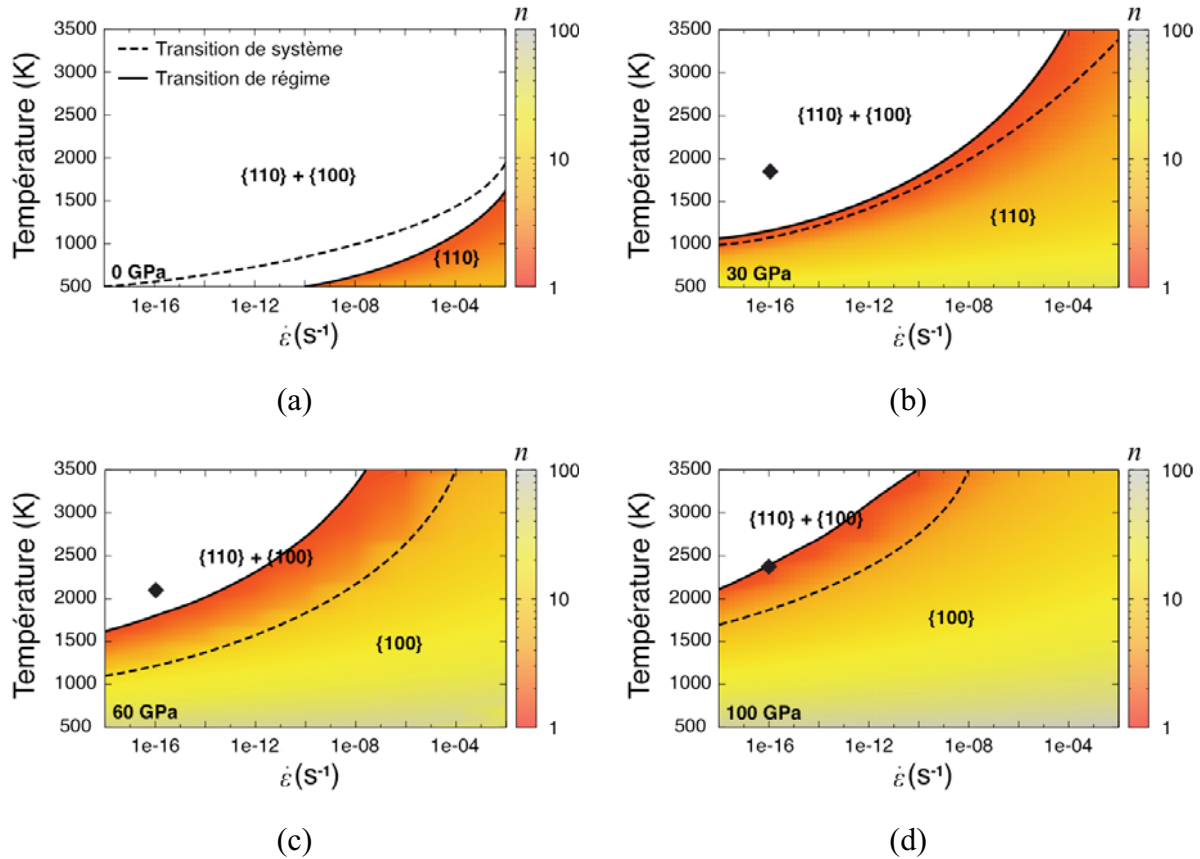


Fig. VI.14 Influence de la vitesse de déformation sur les mécanismes de déformation. Les calculs ont été réalisés à 0 (a), 30 (b), 60 (c) et 100 GPa (d). Les lignes en trait plein correspondent à la transition entre le régime thermiquement activé et le régime athermique. Les lignes en tirets représentent les transitions de système de glissement. Les losanges indiquent les conditions du manteau.

Pour un couple Pression-Température donné, les vitesses de déformation du laboratoire et celles du manteau présentent des mécanismes actifs très différents. Par exemple, à 60 GPa-2000 K, aux vitesses du laboratoire, le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ est actif sous une contrainte de 215 MPa (Fig. VI.14c) avec un exposant de contrainte caractéristique d'une rhéologie fortement non-linéaire ($n \sim 13$). À même pression et température, une diminution de la vitesse de déformation entraîne une réduction de la contrainte appliquée et de l'exposant de contrainte apparent. Le second système de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ devient actif à partir de 10^{-8} s^{-1} de vitesse de déformation à une contrainte de 100 MPa. À partir de 10^{-14} s^{-1} , l'exposant de contrainte se rapproche de la valeur unitaire caractéristique d'une rhéologie linéaire. Au-dessous de cette vitesse de déformation, MgO se déforme dans le régime athermique, beaucoup moins sensible à la vitesse de déformation et à la température.

Basé sur une hypothèse de déformation contrôlée par le mécanisme de glissement de dislocations, ce travail montre que les vitesses de déformation des expériences réalisées en

laboratoire entraînent l'activation de mécanismes à forte contrainte qui ne sont pas représentatifs des conditions du manteau.

VI.3.2 Les incertitudes sur la température de transition

Si l'on compare les températures de transition, présentées *Tab. VI.1*, au géotherme de *Ono 2008* ou à celui de *Schuberth et al. 2009*, la déformation de MgO est thermiquement activée dans une gamme de profondeur approximativement comprises entre 2200 et 2800 Km. Aux vitesses de déformation du manteau, les valeurs de viscosité déduites de notre MME, dans cette fenêtre de profondeurs, sont du même ordre de grandeur que les mesures issues des observations expérimentales ($\sim 10^{22}$ Pa.s⁻¹ à 2500 Km de profondeur, d'après *Mitrovica & Forte 2004*). Néanmoins, il est nécessaire de préciser que le calcul de viscosité est particulièrement sensible à deux paramètres (i) la température du manteau. Les températures utilisées dans nos calculs de viscosité (*Fig. VI.12* et *Tab. VI.2*) reposent sur le géotherme de *Ono 2008* ; l'utilisation d'un géotherme présentant des températures plus basses aurait élargi la fenêtre de déformation thermiquement activée (le géotherme de *Brown & Shankland 1981*, par exemple) et fourni des valeurs de viscosité plus importantes (ii) la température de transition $T(\tau < 0,5 \text{ MPa})$. Dans notre approche, la température de transition entre le régime thermiquement activé et le régime athermique dépend de la contrainte à laquelle est supposée la transition. Nous avons fixé le contrainte seuil à 0,5 MPa, mais des valeurs plus importantes sont envisageables. Dans la section V.2.2, nous avons calculé des températures de transitions à 1 et 10 MPa de contrainte. L'écart entre les valeurs de $T(\tau = 1 \text{ MPa})$, $T(\tau = 10 \text{ MPa})$ et la définition classique de T_a (équation (V.2)) peut être de l'ordre de 20% en pression. La contrainte, fixée à 0,5 MPa, maximise la température de transition. Nos conclusions sur une déformation athermique de MgO monocristallin ne sont donc pas affectées par ce degré de liberté.

VI.3.3 Le régime athermique

Nous avons vu au chapitre III que la contrainte d'écoulement était peu sensible à la vitesse de déformation dans le régime athermique. La vitesse de vol des dislocations est proportionnelle à la contrainte de cisaillement (voir section II.3.5) mais l'approche de déformation continue suggérée par l'équation d'Orowan ne s'applique plus. Au-delà de T_a , ce sont les interactions entre dislocations (et la densité de dislocation) qui influencent la

contrainte d'écoulement (voir section IV.2.2). Dans *Mei et al. 2010*, les auteurs proposent une valeur d'exposant $n=2$, déduite de la loi de Taylor afin d'ajuster une loi rhéologique. En effet, ils supposent que, d'après la loi d'échelle, la densité évolue en τ^2 et qu'ils peuvent ajuster la loi d'Orowan en remplaçant le terme de densité de dislocation mobile. Cette approche n'est pas suffisante puisque c'est la densité de dislocation de la forêt qui varie comme le carré de la contrainte d'après le modèle de la forêt, non pas la densité de dislocation mobile (voir chapitre IV). De plus, les auteurs proposent cette approche afin de décrire l'écoulement à basse température ce qui est en contradiction totale avec l'application de la loi de Taylor. L'une des grandes interrogations concerne les microstructures de déformation. Ou encore, que vaut la densité de dislocation dans un grain plongé dans les conditions de pression, de température et de vitesse de déformation du manteau ?

Aujourd'hui, aucune approche théorique ou expérimentale ne peut répondre à cette question et plusieurs hypothèses sont envisageables. On peut imaginer (i) des grains microstructurés (stockage de dislocations important) où le mécanisme d'avalanche opère à une fréquence faible (étant donnée la vitesse de déformation) ; la fréquence pourrait éventuellement varier en fonction des instabilités locales de contrainte (ii) des grains où la densité de dislocation est extrêmement faible (mécanismes de restauration ?) pour lesquels la déformation serait gouvernée par la nucléation et le glissement rapide de quelques dislocations à des intervalles de temps très grands.

Si les conditions P - T - $\dot{\epsilon}$ du manteau semblent favorables au glissement de dislocations dans MgO, la question des microstructures de déformation reste ouverte.

VI.3.4 Le glissement de dislocations et les autres mécanismes

En pression et aux vitesses de déformation du laboratoire, la friction de réseau est importante et MgO monocristallin ne peut se déformer par glissement de dislocations qu'à forte contrainte. Dans les conditions du manteau, les dislocations ne sont plus soumises à la friction de réseau et la déformation opère à basse contrainte (quelques MPa) (*Bokelmann & Silver 2002 ; Forte et al. 2007*).

Les études expérimentales des propriétés rhéologiques des minéraux font référence aux mécanismes de déformation de « haute-température », comme le fluage diffusion ou la montée des dislocations (*Karato & Wu 1993 ; Karato 2008 ; Ammann et al. 2010*). Or, la température du manteau reste relativement faible au regard de la température de fusion de

MgO : entre 700 et 2900 Km de profondeur, elle est inférieure 50% de la T_f si l'on se réfère aux calculs présentés dans *Aguado & Madden 2005*. De plus, ce résultat est une limite supérieure au regard des autres calculs relatifs à la température de fusion de MgO (voir section I.1.2 pour une revue des résultats publiés). On peut donc supposer que les valeurs élevées de T_f en pression dans MgO sont favorables aux mécanismes de déformation de « basse température ». Néanmoins, d'autres paramètres comme la taille de grain ou la vitesse de déformation peuvent être en faveur d'une déformation basée sur des processus diffusifs. Dans ce travail, nous avons montré que les conditions P - T - $\dot{\epsilon}$ du manteau ne sont pas des paramètres qui excluent le glissement de dislocations. Néanmoins, le manque d'information sur la taille de grains dans le manteau terrestre ne permet aucune conclusion directe.

Dans *Li et al. 1996*, *Riedel & Karato 1997* et *Karato 1997*, les auteurs montrent que la transition de mécanisme qui gouverne la déformation dans le manteau (fluage par diffusion ou glissement de dislocations) peut apparaître pour une taille de grain de l'ordre de $\sim 0,1$ - 1 mm (pour une contrainte effective de 1 MPa). Néanmoins, l'absence d'anisotropie sismique dans une majeure partie du manteau inférieur peut supposer une déformation non-assistée par le glissement de dislocations (*Karato 1998*).

Dans ses travaux de thèse, *Ammann (2011)* a calculé les coefficients de diffusion de Si, O et Mg dans la plupart des phases du manteau inférieur. À l'aide d'un modèle de type Nabarro-Herring, l'auteur a reproduit le profil de viscosité du manteau (initialement mesuré par *Mitrovica & Forte (2004)*), en partant d'un manteau entièrement composé de MgSiO_3 (phase perovskite en dessous de 120 GPa de pression, phase post-perovskite dans la couche D''). L'hypothèse majeure de ce travail est que la taille de grain dans les conditions du manteau terrestre est inférieure au millimètre (ce qui correspond à la taille caractéristique de transition fluage diffusion-fluage dislocation calculée par *Li et al. 1996* et *Karato 1997*).

Les travaux de *Solomatov et al. (Solomatov et al. 2002 ; Solomatov & Moresi 2002 ; Solomatov & Reese 2008)* supposent que la dimension des grains peut difficilement être contrainte dans le manteau terrestre. Les auteurs évoquent des tailles qui vont du micron à plusieurs dizaines de centimètres, le désaccord étant fonction de la multiplicité des mécanismes actifs (mûrissement d'Oswald, transitions de phase, recristallisation dynamique, etc.). Les auteurs abordent aussi l'influence des hétérogénéités de température sur la taille de grain.

Enfin, dans *Schuberth et al. 2009*, les auteurs évoquent des hétérogénéités de température de l'ordre de 1000-1500 K au niveau des panaches, en base de manteau inférieur. Dans *Oganov*

et al. 2001, les auteurs supposent que le contraste de température entre les zones chaudes et froides du manteau augmente avec la profondeur : 800 K à 1000 Km, 1500 K à 2000 Km et potentiellement 2000 K à la frontière noyau-manteau. Au regard de la *Fig. VI.14*, on peut imaginer voir apparaître des transitions de régimes de déformation en fonction des températures dans les zones froides ou chaudes du manteau terrestre. Dans une hypothèse de déformation par glissement de dislocations, des transitions régime athermique-régime thermiquement activé ou des transitions de système de glissement pourraient apparaître.

Dans ce chapitre, nous avons montré que MgO monocristallin pouvait se déformer par glissement de dislocations dans les conditions de pression, de température et de vitesse de déformation du manteau inférieur (*Cordier et al. 2011*). La baisse de la vitesse de déformation induit une réduction du régime thermiquement activé et une diminution des contraintes critiques. Dans les conditions P - T - $\dot{\epsilon}$ du manteau inférieur, MgO se déforme à basse contrainte, presque exclusivement dans le régime athermique. Aux vitesses de déformation du laboratoire, la déformation de MgO a lieu dans le régime thermiquement activé, caractéristique des fortes contraintes.

Plusieurs paramètres (taille de grain, densité de dislocation, hétérogénéités, etc.) ne permettent pas de statuer sur un mécanisme responsable à lui seul de la déformation des roches du manteau. Si la phase Perovskite MgSiO_3 est une plus « dure » que MgO, on peut supposer qu'aux contraintes du manteau, sa déformation pourrait être gouvernée par le fluage diffusion (*Ammann 2011*). Mais qu'en est-il dans une zone anormalement chaude ou froide ? Quelle est l'influence de $(\text{Mg,Fe})\text{O}$ sur la rhéologie d'un manteau principalement composé de Perovskite et comment se comporte un agrégat Magnésio-wüstite-Perovskite dans les conditions du manteau ?

Si l'opposition fluage diffusion/fluage dislocation a longtemps été d'actualité, les études récentes (*Oganov et al. 2001* ; *Schubert et al. 2009*) laissent penser que ce n'est pas un unique mécanisme mais bien l'ensemble des processus de déformation qu'il est nécessaire de décrypter afin d'avoir une vision réaliste des propriétés rhéologiques en profondeur.

CONCLUSION

Ce travail présente une modélisation multi-échelle de la déformation de MgO, à pression ambiante et dans les conditions du manteau inférieur terrestre. À partir des propriétés de cœur des dislocations (calculées par *Ph. Carrez*), le modèle des interactions élastiques permet de calculer des configurations critiques de double-décrochements (ΔH^* et w^*). L'énergie de nucléation et la largeur des double-décrochements sont ensuite intégrées dans une loi de vitesse thermiquement activée qui permet de décrire la mobilité d'une dislocation isolée en fonction de la contrainte et de la température. Les paramètres de mobilité sont implémentés dans le code de Dynamique des Dislocations, *microMegas*, afin de décrire le comportement collectif des dislocations lors d'essais de déformation numériques.

Rappels des principaux résultats

À pression ambiante, la structure de cœur de la dislocation vis est principalement étalée dans le plan $\{110\}$, au dépend du plan $\{100\}$. Cette propriété induit une différence significative entre les contraintes de Peierls puisqu'elles sont respectivement de 150 et 1600 MPa. Pour les dislocations coins, les contraintes de Peierls sont systématiquement inférieures à celles des vis. L'énergie d'activation pour les dislocations vis, calculée à partir de la méthode IE, est inférieure dans le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et les calculs de $w^*(\tau)$ présentent une divergence lorsque la contrainte tend vers zéro. Une fois les paramètres d'activation intégrés à une loi de mobilité de type double-décrochements, les premières applications en température ont montré une très bonne corrélation avec les mesures de vitesse présentées dans

Singh & Coble 1974a. Des simulations de Dynamique des Dislocations ont ensuite permis de calculer des contraintes critiques de cisaillement (i) en utilisant la loi de mobilité thermiquement activée et une microstructure de dislocations vis infinies dans le régime thermiquement activé (ii) à l'aide d'une loi de vitesse proportionnelle à la contrainte et d'une microstructure faites de sources de Frank-Read dans le régime athermique. Les calculs de CRSS sont en très bon accord avec les mesures expérimentales (*Copley & Pask 1965 ; Barthel 1984 ; Appel & Wielke 1985*). Au-delà de la contrainte d'écoulement, des propriétés liées à la microstructure et au durcissement ont été calculées. Dans le régime athermique, la contrainte palier est contrôlée par les interactions entre dislocations et MgO semble se déformer via le mécanisme d'avalanche. Le coefficient α de la loi de Taylor est respectivement de 0,20 et de 0,23 dans les plans $\{110\}$ et $\{100\}$. Ces résultats sont en bon accord avec les valeurs issues des mesures de *Davidge & Pratt 1964*. Au-dessous de la température athermique, les calculs réalisés dans le fer et dans MgO montrent que le durcissement diminue d'autant plus que la température est faible.

L'application de notre MME, entre 0 et 100 GPa de pression hydrostatique, montre que la reconfiguration des structures de cœur en pression induit une augmentation de la friction de réseau et donc des valeurs de CRSS, dans les deux familles de systèmes de glissement. Une inversion de système de glissement est estimée autour de 30 GPa ; le système $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ devient le système « facile » à haute pression. En pression et dans les conditions de vitesse de déformation du laboratoire, MgO se déforme dans le régime thermiquement activé (régime de friction de réseau), à forte contrainte.

Les calculs réalisés dans les conditions de vitesse de déformation du manteau terrestre prédisent un comportement très différent. La vitesse de déformation est un paramètre majeur quant au comportement mécanique des minéraux du manteau. La diminution de la vitesse de déformation à 10^{-16} s^{-1} induit une baisse des contraintes critiques de cisaillement et une contraction du régime thermiquement activé ; à 10^{-16} s^{-1} , MgO se déforme presque exclusivement dans le régime athermique, à basse contrainte.

Ces travaux montrent qu'il est dorénavant possible de modéliser la plasticité des minéraux dans les conditions de déformation du manteau terrestre. Ils soulignent notamment le rôle de la vitesse de déformation sur les mécanismes qui régissent la plasticité des roches, paramètre trop souvent ignoré jusqu'à aujourd'hui. Si l'influence de la pression est prise en compte dans les expériences réalisées en presse D-DIA ou en CED, nos résultats révèlent qu'il

est crucial de tenir compte de cette variable dans les expériences, dans l'optique d'une description des propriétés rhéologiques du manteau.

Perspectives

En ce qui concerne la méthode multi-échelle, la modélisation des double-décrochements reste à parfaire. En effet, le modèle IE est un modèle relativement simpliste et une méthode numérique plus aboutie (*Rodney 2007 ; Pizzagalli et al. 2008 ; Pedersen et al. 2009*) devrait être intégrée au modèle pour une description plus rigoureuse. En amont, il est nécessaire de continuer à confronter les différentes approches de calcul de structure de cœur de dislocation. Si la Dynamique des Dislocations semble être l'outil adéquat pour étudier les propriétés du monocristal, les calculs présentés dans ce travail peuvent être améliorés (i) les calculs de CRSS dans le régime thermiquement activé doivent être réalisés avec un nombre conséquent de dislocations afin de tenir compte du champ de contrainte à longue distance. (ii) dans le régime athermique, il serait intéressant d'intégrer le glissement dévié et la montée des dislocations aux calculs afin d'étudier leur influence sur les microstructures modélisées et sur le durcissement. Enfin, le recours à des lois de plasticité cristalline (*Teodosiu & Sidoroff 1976 ; Peirce et al. 1982 ; Devincere et al. 2008*) ou un couplage aux éléments finis permettrait de décrire plus loin en déformation les propriétés plastiques de MgO, voir de décrire le comportement d'échantillons polycristallins ou polyphasés.

Maintenant que notre modélisation multi-échelle a été validée sur l'oxyde de magnésium, d'autres phases doivent être explorées. Il est essentiel que ce travail soit mené sur la phase perovskite, phase majoritaire du manteau inférieur, afin d'aboutir à une description complète de la rhéologie du manteau inférieur et des mécanismes physiques qui gouvernent son écoulement. Deuxième phase qui revêt un intérêt particulier : l'olivine, phase majoritaire du manteau supérieur. Si les travaux de *J. Durinck (2005)* ont ouvert la voie à une étude numérique de sa plasticité, les techniques utilisées à l'époque étaient moins abouties que celles utilisées dans ce travail et notre MME permettra aujourd'hui de porter ce travail plus loin qu'il ne l'a été jusqu'à présent.

BIBLIOGRAPHIE

- C. Agee (1998). "Phase transformations and seismic structure in the upper mantle and transition zone." *Reviews in Mineralogy and Geochemistry* **37**(1): 165-203.
- A. Aguado and P. A. Madden (2005). "New insights into the melting behavior of MgO from molecular dynamics simulations : the importance of premelting effects." *Physical Review Letters* **94**(6): 68501.
- D. Alfè (2005). "Melting curve of MgO from first-principles simulations." *Physical Review Letters* **94**(23): 235701.
- D. Alfè, M. Alfredsson, J. Brodholt, M. Gillan, M. Towler and R. Needs (2005). "Quantum Monte Carlo calculations of the structural properties and the B1-B2 phase transition of MgO." *Physical Review B* **72**(1): 014114.
- M. Ammann (2011). "Diffusion in minerals of the Earth's lower mantle : constraining rheology from first principles." *Thèse de Doctorat*.
- M. Ammann, J. Brodholt, J. Wookey and D. Dobson (2010). "First-principles constraints on diffusion in lower-mantle minerals and a weak D" layer." *Nature* **465**(7297): 462-465.
- J. Amodeo, Ph. Carrez, B. Devincere and P. Cordier (2011a). "Multiscale modelling of MgO plasticity." *Acta Materialia* **59**: 2291-2301.
- J. Amodeo, Ph. Carrez and P. Cordier (2011b). "Modeling the effect of pressure on the critical shear stress of MgO single crystals" *Philosophical Magazine*, en révision.
- O. Anderson (1982). "The Earth's core and the phase diagram of iron." *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **306**(1492): 21-35.
- Y. Aono and K. Kitajima (1979). "Thermally Activated Slip Deformation of High Purity Iron Single Crystals Between 4,2 and 300 K." *Scripta Metallurgica*. **13**(11): 1039-1042.

- F. Appel, M. Bartsch, U. Messerschmidt, E. Nadgorny and S. Valkovskii (1984). "Dislocation motion and plasticity in MgO single crystals." *physica status solidi (a)* **83**(1): 179-194.
- F. Appel, H. Bethge and U. Messerschmidt (1977). "Dislocation motion and multiplication at the deformation of MgO single crystals in the high voltage electron microscope." *physica status solidi (a)* **42**(1): 61-71.
- F. Appel, H. Bethge and U. Messerschmidt (1976). "Distribution of point-obstacle distance during the motion of screw dislocations in MgO single crystals." *physica status solidi (a)* **38**(1): 103-108.
- F. Appel and B. Wielke (1985). "Low temperature deformation of impure MgO single crystals." *Materials Science and Engineering* **73**: 97-103.
- T. A. Auten, S. V. Radcliffe and R. B. Gordon (1976). "Flow stress of MgO single crystals compressed along [100] at high hydrostatic pressures." *Journal of the American Ceramic Society* **59**(1-2): 40-42.
- H. Barthel (1984). "Plastische anisotropie von Bleisulfid und magnesiumoxid." *Thèse de Doctorat*.
- S. Basinski and Z. Basinski (1979). "Plastic deformation and work hardening." *Dislocations in solids* **4**: 261-362.
- A. B. Belonoshko and L. Dubrovinsky (1996). "Molecular dynamics of NaCl (B1 and B2) and MgO (B1) melting: Two-phase simulation." *The American mineralogist* **81**(3-4): 303-316.
- A. B. Belonoshko, S. Arapan, R. Martonak and A. Rosengren (2010). "MgO phase diagram from first principles in a wide pressure-temperature range." *Physical Review B* **81**(5): 054110.
- V. Belzner and F. Granzer (1977). "Atomistic calculations on the dissociation of an edge dislocation in NaCl." *physica status solidi (a)* **39**(1): 183-187.
- G. Bokelmann and P. Silver (2002). "Shear stress at the base of shield lithosphere." *Geophysical Research Letters* **29**(23): 2091.
- A. Boudet and L. Kubin (1975). "Exhaustion mechanisms in the Preyfield domain of niobium single crystals at low temperatures." *Journal de Physique* **36**(9): 823-833.
- J. Brown and T. Shankland (1981). "Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles." *Geophysical Journal Interiors* **66**: 579-596.
- V. Bulatov, W. Cai, J. Fier, M. Hiratani, T. Pierce and M. Tang (2004). "ParaDiS on BlueGene/L : scalable line dynamics." *SC2004 High Performance Computing, Networking and Storage Conference, Pittsburgh, PA, United States*.

- V. Bulatov, M. Rhee and W. Cai (2000). "Periodic boundary conditions for dislocation dynamics simulations in three dimensions." *Materials Research Society Fall 2000 Meeting, Boston, MA, United States*.
- V. Bulatov, O. Richmond and M. Glazov (1999). "An atomistic dislocation mechanism of pressure-dependent plastic flow in aluminum." *Acta Materialia* **47**(12): 3507-3514.
- V. Bulatov and E. Kaxiras (1997). "Semidiscrete variational Peierls framework for dislocation core properties." *Physical Review Letters* **78**(22): 4221-4224.
- W. Cai, V. Bulatov, J. Chang, J. Li and S. Yip (2004). "Dislocation core effects on mobility". In : *Dislocations in Solids. Nabarro FRN, Hirth JP (eds) North Holland Pub.* **12**: 1-80.
- D. Caillard (2010). "Kinetics of dislocations in pure Fe. Part II. In situ straining experiments at low temperature." *Acta Materialia* **58**(9): 3504-3515.
- D. Caillard and J. Martin (2003). "Thermally activated mechanisms in crystal plasticity". Pergamon.
- Ph. Carrez, P. Cordier, B. Devincere and L. Kubin (2005). "Dislocation reactions and junctions in MgO." *Materials Science & Engineering A* **400**: 325-328.
- Ph. Carrez, D. Ferré and P. Cordier (2009). "Peierls--Nabarro modelling of dislocations in MgO from ambient pressure to 100 GPa." *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. **17**(3): 5010.
- N. Carter (1976). "Steady state flow of rocks." *Reviews of Geophysics* **14**(3): 301-360.
- K. Chang and M. Cohen (1984). "High-pressure behavior of MgO: Structural and electronic properties." *Physical Review B* **30**(8): 4774.
- J. Chaussidon, C. Robertson, M. Fivel and B. Marini (2010). "Internal stress evolution in Fe laths deformed at low temperature analysed by dislocation dynamics simulations." *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **18**: 025003.
- J. Chaussidon, C. Robertson, D. Rodney and M. Fivel (2008). "Dislocation dynamics simulations of plasticity in Fe laths at low temperature." *Acta Materialia* **56**(19): 5466-5476.
- J. Chaussidon, M. Fivel and D. Rodney (2006). "The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations." *Acta Materialia* **54**(13): 3407-3416.
- G. Chen, R. Liebermann and D. Weidner (1998). "Elasticity of single-crystal MgO to 8 Gigapascals and 1600 Kelvin." *Science* **280**(5371): 1913.
- A. Chopelas (1992). "Sound velocities of MgO to very high compression." *Earth and Planetary Science Letters* **114**(1): 185-192.

- A. Clauer and B. Wilcox (1976). "High temperature tensile creep of magnesium oxide single crystals." *Journal of the American Ceramic Society* **59**(3-4): 89-96.
- R. Cohen and Z. Gong (1994). "Melting and melt structure of MgO at high pressures." *Physical Review B* **50**(17): 12301.
- S. Copley and J. Pask (1965). "Plastic deformation of MgO single crystals up to 1600 °C." *Journal of the American Ceramic Society* **48**(3): 139-146.
- P. Cordier, J. Amodeo and Ph. Carrez (2011). "Modelling the rheology of MgO under earth's mantle pressure, temperature and strain-rates", *Nature*, sous-presse.
- R. Davidge (1967). "The distribution of iron impurity in single-crystal magnesium oxide and some effects on mechanical properties." *Journal of Materials Science* **2**(4): 339-346.
- R. Davidge and P. Pratt (1964). "Plastic Deformation and Work-Hardening in NaCl." *physica status solidi (b)* **6**(3): 759-776.
- R. Day and R. Stokes (1964). "Mechanical behavior of Magnesium Oxide at high temperatures." *Journal of the American Ceramic Society* **47**(10): 493-503.
- C. Denoual (2007). "Modeling dislocation by coupling Peierls-Nabarro and element-free Galerkin methods." *Computer methods in applied mechanics and engineering* **196**(13-16): 1915-1923.
- C. Denoual (2004). "Dynamic dislocation modeling by combining Peierls Nabarro and Galerkin methods." *Physical Review B* **70**(2): 024106.
- B. Devincre (1993). "Simulations de la Dynamique des Dislocations à une échelle mésoscopique : une étude de la déformation plastique." *Thèse de Doctorat*.
- B. Devincre and M. Condat (1992). "Model validation of a 3D simulation of dislocation dynamics: discretization and line tension effects." *Acta Metallurgica Et Materialia* **40**(10): 2629-2637.
- B. Devincre, T. Hoc and L. Kubin (2008). "Dislocation mean free paths and strain hardening of crystals." *Science* **320**(5884): 1745.
- B. Devincre, T. Hoc and L. P. Kubin (2005). "Collinear interactions of dislocations and slip systems." *Materials Science and Engineering A* **400**: 182-185.
- B. Devincre and L. Kubin (2010). "Scale transitions in crystal plasticity by dislocation dynamics simulations." *Comptes Rendus Physique* **11**: 274-284.
- B. Devincre and L. Kubin (1997). "The modelling of dislocation dynamics: elastic behaviour versus core properties." *Philosophical Transactions: Mathematical* **355**(1731): 2003-2012.
- B. Devincre and L. Kubin (1994). "Three dimensional simulations of plasticity." *Strength of Materials. ICSMA 10, Sendai, Japan*: 179-182.

- B. Devincere, L. Kubin and T. Hoc (2007). "Collinear superjogs and the low-stress response of fcc crystals." *Scripta Materialia* **57**(10): 905-908.
- B. Devincere, L. Kubin and T. Hoc (2006). "Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations." *Scripta Materialia* **54**(5): 741-746.
- B. Devincere, L. Kubin, C. Lemarchand and R. Madec (2001). "Mesoscopic simulations of plastic deformation." *Materials Science & Engineering A* **309**: 211-219.
- G. de Wit and J. Koehler (1959). "Interaction of dislocations with an applied stress in anisotropic crystals." *Physical Review* **116**: 1113-1120.
- C. Domain and G. Monnet (2005). "Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations." *Physical Review Letters* **95**(21): 215506.
- J. Dorn (1956). "The spectrum of activation energies for creep." *DTIC Document*.
- J. Dorn and S. Rajnak (1964). "Nucleation of kink pairs and the Peierls mechanism of plastic deformation." *Transactions of The Metallurgical Society of AIME* **230**(8): 1052-1064.
- P. I. Dorogokupets and A. E. Oganov (2007). "Ruby, metals, and MgO as alternative pressure scales : A semiempirical description of shock-wave, ultrasonic, X-ray, and thermochemical data at high temperatures and pressures" *Physical Review B* **75**(2) 024115.
- J. Douin, P. Veyssiere and P. Beauchamp (1986). "Dislocation line stability in Ni_3Al ." *Philosophical magazine A* **54**(3): 375-393.
- N. Drummond and G. Ackland (2002). "Ab initio quasiharmonic equations of state for dynamically stabilized soft-mode materials." *Physical Review B* **65**(18): 184104.
- M. Duesbery and V. Vitek (1998). "Plastic anisotropy in bcc transition metals." *Acta Materialia* **46**(5): 1481-1492.
- T. S. Duffy, R. J. Hemley and H. Mao (1995). "Equation of state and shear strength at multimegabar pressures: Magnesium oxide to 227 GPa." *Physical Review Letters* **74**(8): 1371-1374.
- J. Durinck (2005). "Modélisation de la plasticité de la forstérite par calculs à l'échelle atomique et par Dynamique des Dislocations." *Thèse de Doctorat*.
- J. Durinck, P. Carrez and P. Cordier (2007a). "Application of the Peierls-Nabarro model to dislocations in forsterite." *European Journal of Mineralogy* **19**(5): 631.
- J. Durinck, B. Devincere, L. Kubin and P. Cordier (2007b). "Modeling the plastic deformation of olivine by dislocation dynamics simulations." *American Mineralogist* **92**(8-9): 1346.
- A. M. Dziewonski and D. L. Anderson (1981). "Preliminary reference Earth model* 1." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **25**(4): 297-356.

- A. Dziewonski, A. Hales and E. Lapwood (1975). "Parametrically simple earth models consistent with geophysical data." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **10**(1): 12-48.
- J. El-Awady, M. Wen and N. Ghoniem (2009). "The role of the weakest-link mechanism in controlling the plasticity of micropillars." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **57**(1): 32-50.
- J. Eshelby (1962). "The interaction of kinks and elastic waves." *Proceedings of the Royal Society of London A* **226**(1325): 222-246
- A. Evans and R. Rawlings (1969). "The thermally activated deformation of crystalline materials." *physica status solidi (b)* **34**(1): 9-31.
- Y. Fei (1999). "Effects of temperature and composition on the bulk modulus of (Mg,Fe)O." *American Mineralogist* **84**(3): 272.
- D. Ferre, P. Cordier and Ph. Carrez (2009). "Dislocation modeling in calcium silicate perovskite based on the Peierls-Nabarro model." *American Mineralogist* **94**(1): 135.
- M. Fivel, C. Robertson, G. Canova and L. Boulanger (1998). "Three-dimensional modeling of indent-induced plastic zone at a mesoscale1." *Acta Materialia* **46**(17): 6183-6194.
- A. Foitzik, W. Skrotzki and P. Haasen (1989). "Correlation between microstructure, dislocation dissociation and plastic anisotropy in ionic crystals." *Materials Science and Engineering: A* **113**: 399-407.
- G. Fontaine and P. Haasen (1969). "Hydrostatic Pressure and Plastic Deformation of the Alkali Halides." *physica status solidi (b)* **31**(1): K67-K70.
- A. Foreman (1967). "The bowing of a dislocation segment." *Philosophical Magazine* **15**(137): 1011-1021.
- A. Foreman and M. Makin (1966). "Dislocation movement through random arrays of obstacles." *Philosophical Magazine* **14**(131): 911-924.
- A. Forte, J. Mitrovica, R. Moucha, N. Simmons and S. Grand (2007). "Descent of the ancient Farallon slab drives localized mantle flow below the New Madrid seismic zone." *Geophysical Research Letters* **34**(4): L04308.
- P. Franciosi, M. Berveiller and A. Zaoui (1980). "Latent hardening in copper and aluminium single crystals." *Acta Metallurgica* **28**(3): 273-283.
- A. George and J. Rabier (1987). "Dislocations and plasticity in semiconductors. I-Dislocation structures and dynamics." *Revue de Physique Appliquée* **22**(9): 941-966.
- J. Gilman (1959). "Plastic anisotropy of LiF and other rocksalt-type crystals." *Acta Metallurgica* **7**(9): 608-613.

- J. Girard, J. Chen, P. Raterron (2011). "Déformation of periclase single crystals at high pressure and temperature : Quantification of the effect of pressure on slip-system activity." *Journal of Applied Physics*, en révision.
- A. Gorum, W. Luhman and J. Pask (1960). "Effect of Impurities and Heat-Treatment on Ductility of MgO." *Journal of the American Ceramic Society* **43**(2): 241–245.
- A. Granato and K. Lücke (1956). "Theory of mechanical damping due to dislocations." *Journal of Applied Physics* **27**(6): 583-593.
- D. Green and A. Ringwood (1963). "Mineral assemblages in a model mantle composition." *Journal of Geophysical Research* **68**(3): 937-945.
- L. Greengard and V. Rokhlin (1987). "A fast algorithm for particle simulations" *Journal of Computational Physics* **73**(2): 325-348.
- R. Gröger, A. Bailey and V. Vitek (2008). "Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten : I. Atomistic studies of the core structure and glide of $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ screw dislocations at 0 K." *Acta Materialia* **56**(19): 5401-5411.
- R. Gröger and V. Vitek (2007). "Explanation of the discrepancy between the measured and atomistically calculated yield stresses in body-centred cubic metals." *Philosophical Magazine Letters* **87**(2): 113-120.
- G. Groves and M. Fine (1964). "Solid Solution and Precipitation Hardening in Mg-Fe-O Alloys." *Journal of Applied Physics* **35**(12): 3587-3593.
- G. W. Groves and A. Kelly (1963). "The Dislocation Distribution in Plastically Deformed Magnesium Oxide." *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **275**(1361): 233-244.
- P. Gumbsch and R. Schroll (1999). "Atomistic aspects of the deformation of NiAl." *Intermetallics* **7**(3-4): 447-454.
- P. Guyot and J. E. Dorn (1967). "A critical review of the Peierls mechanism." *Canadian Journal of Physics* **45**(2): 983-1016.
- P. Haasen, C. Barthel and T. Suzuki (1985). "Choice of slip system and Peierls stresses in the NaCl structure." *Dislocations in solids*.
- P. Haasen, U. Messerschmidt and W. Skrotzki (1986). "Low energy dislocation structures in ionic crystals and semiconductors." *Materials Science and Engineering* **81**: 493-507.
- M. P. Habas, R. Dovesi and A. Lichanot (1998). "The phase transition in alkaline-earth oxides: a comparison of ab initio Hartree-Fock and density functional calculations." *Journal of Physics: Condensed Matter* **10**: 6897-6909.
- J. Hama and K. Suito (1999). "Thermoelastic properties of periclase and magnesiowustite under high pressure and high temperature." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **114**(3-4): 165-179.

- H. Heard (1963). "Effect of large changes in strain rate in the experimental deformation of Yule marble." *The Journal of Geology*: 162-195.
- K. Hirose, N. Sata, T. Komabayashi and Y. Ohishi (2008). "Simultaneous volume measurements of Au and MgO to 140 GPa and thermal equation of state of Au based on the MgO pressure scale." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **167**(3-4): 149-154.
- J. Hirth (1961). "On dislocation interactions in the fcc lattice." *Journal of Applied Physics* **32**(4): 700-706.
- J. Hirth and J. Lothe (1982). "Theory of dislocations." Wiley New York.
- C. Hulse, S. Copley and J. Pask (1963). "Effect of crystal orientation on plastic deformation of magnesium oxide." *Journal of the American Ceramic Society* **46**(7): 317-323.
- C. Hulse and J. Pask (1960). "Mechanical Properties of Magnesia Single Crystals Compression." *Journal of the American Ceramic Society* **43**(7): 373-378.
- I. Inbar and R. Cohen (1995). "High pressure effects on thermal properties of MgO." *Geophysical Research Letters* **22**(12) 1533-1536.
- D. Isaak, O. Anderson and T. Goto (1989). "Measured elastic moduli of single-crystal MgO up to 1800 K." *Physics and Chemistry of Minerals* **16**(7): 704-713.
- D. Isaak, R. Cohen and M. Mehl (1990). "Calculated elastic and thermal properties of MgO at high pressures and temperatures." *Journal of Geophysical Research* **95**(B5): 7055-7067.
- I. Jackson and H. Niesler (1982). "The elasticity of periclase to 3 GPa and some geophysical implications." In : S. Atimoto and M. H. Manghnani, Eds., *High-Pressure Research in Geophysics*. Center for academic Publications, Tokyo: 93-113.
- J. Jaffe, J. Snyder, Z. Lin and A. Hess (2000). "LDA and GGA calculations for high-pressure phase transitions in ZnO and MgO." *Physical Review B* **62**(3): 1660.
- T. Johnston and C. Li (1959). "The relationship between plastic flow and the fracture mechanism in magnesium oxide single crystals." *Philosophical Magazine* **4**(44): 920-932.
- W. Johnston and J. J. Gilman (1959). "Dislocation Velocities, Dislocation Densities, and Plastic Flow in Lithium Fluoride Crystals." *Journal of Applied Physics* **30**(2): 1-16.
- B. Joós and M. Duesbery (1997). "The Peierls stress of dislocations: An analytic formula." *Physical Review Letters* **78**(2): 266-269.
- B. Joós and J. Zhou (2001). "The Peierls-Nabarro model and the mobility of the dislocation line." *Philosophical Magazine A* **81**(5): 1329-1340.

- S. Karato (2008). "Deformation of Earth Materials : An Introduction to the Rheology of Solid Earth." Cambridge University Press. Cambridge.
- S. Karato (1998). "Some remarks on the origin of seismic anisotropy in the D" layer." *Earth Planets and Space* **50**: 1019-1028.
- S. Karato (1997). "Phase transformations and rheological properties of mantle minerals." *In : Earth's Deep Interior*. Edited by D. J. Crossley. Gordon and Breach, Amsterdam: 223-272.
- S. Karato and D. Weidner (2008). "Laboratory studies of the rheological properties of minerals under deep-mantle conditions." *Elements* **4**(3): 191.
- S. Karato and P. Wu (1993). "Rheology of the upper mantle: a synthesis." *Science* **260**(5109): 771-778.
- S. Karato, S. Zhang and H. Wenk (1995). "Superplasticity in Earth's lower mantle: evidence from seismic anisotropy and rock physics." *Science* **270**(5235): 458-461.
- B. Kardashev, S. Kustov, A. Lebedev, G. Berezhkova, P. Perstnev, F. Appel and U. Messerschmidt (1985). "Acoustic and electron microscopy study of the dislocation structure in MgO crystals." *physica status solidi (a)* **91**(1): 79-87.
- B. Karki, L. Stixrude, S. Clark, M. Warren, G. Ackland and J. Crain (1997). "Structure and elasticity of MgO at high pressure." *American Mineralogist* **82**(1): 51-60.
- B. Karki, R. Wentzcovitch, S. De Gironcoli and S. Baroni (2000). "High-pressure lattice dynamics and thermoelasticity of MgO." *Physical Review B* **61**(13): 8793.
- B. Kear, A. Taylor and P. Pratt (1959). "Some dislocation interactions in simple ionic crystals." *Philosophical Magazine* **4**(41): 665-680.
- A. Keh and S. Weissman (1963). "Deformation substructure in body-centered cubic metals." *In : Electron Microscopy and Strength of Crystals*. Edited by G. Thomas and J. Washburn (Interscience New York): 231-299.
- G. Kinsland and W. Bassett (1977). "Strength of MgO and NaCl polycrystals to confining pressures of 250 kbar at 25 C." *Journal of Applied Physics* **48**(3): 978-985.
- U. Kocks and H. Mecking (2003). "Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case." *Progress in Materials Science* **48**: 171-273.
- U. Kocks, A. Argon and M. Ashby (1975). "Thermodynamics and kinetics of slip." Pergamon.
- U. Kocks, R. Labusch and R. Schwarz (1976). "Concentration dependence of the flow stress." *International conference on strength of metals and alloys*, Nancy, France: 8
- H. Koizumi, Y. Kamimura and T. Suzuki (2000). "Core structure of a screw dislocation in a diamond-like structure." *Philosophical Magazine A* **80**(3): 609-620.

- H. Koizumi, H. Kirchner and T. Suzuki (1993). "Kink pair nucleation and critical shear stress." *Acta Metallurgica Et Materialia* **41**(12): 3483-3493.
- G. Kresse and J. Furthmüller (1996). "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set." *Computational Materials Science* **6**(1): 15-50.
- G. Kresse and J. Hafner (1993). "Ab initio molecular dynamics for liquid metals." *Physical Review B* **47**(1): 558-561.
- F. Kroupa (1961). "The force between non-parallel dislocations." *Czechoslovak Journal of Physics* **11**(11): 847-848.
- L. Kubin and G. Canova (1992). "The modelling of dislocation patterns." *Scripta metallurgica et materialia* **27**(8): 957-962.
- L. Kubin and G. Canova (1990). "The formation of ordered dislocation microstructures." *In: U. Messerschmidt, et al. (Eds.), Electron Microscopy in Plasticity and Fracture Research of Materials*, Akademie Verlag, Berlin. 23-32.
- L. Kubin, B. Devincere and T. Hoc (2008a). "Toward a physical model for strain hardening in fcc crystals." *Materials Science & Engineering A* **483**: 19-24.
- L. Kubin, B. Devincere and T. Hoc (2008b). "Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals." *Acta Materialia* **56**(20): 6040-6049.
- L. Kubin, B. Devincere and M. Tang (1998). "Mesoscopic modelling and simulation of plasticity in fcc and bcc crystals: Dislocation intersections and mobility." *Journal of Computer-Aided Materials Design* **5**(1): 31-54.
- L. Kubin, R. Madec and B. Devincere (2003). "Dislocation Intersections and Reactions in FCC and BCC Crystals." *Materials Research Society Symposium Proceedings* **779**: 25-36.
- E. Kuramoto, Y. Aono, K. Kitajima and K. Maeda (1979). "Thermally Activated Slip Deformation between 0,7 and 77 K in High-purity Iron Single Crystals." *Philosophical Magazine A* **39**(6): 717-724.
- S. Kushwah, M. Sharma and Y. Tomar (2011). "A new method for thermal pressure using equations of state for MgO." *Solid State Sciences* **13**(5): 1162-1165.
- S. Lefebvre, B. Devincere and T. Hoc (2007). "Yield stress strengthening in ultrafine-grained metals: A two-dimensional simulation of dislocation dynamics." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **55**(4): 788-802.
- L. Lejček (1972). "Peierls-Nabarro model of planar dislocation cores in bcc crystals." *Czechoslovak Journal of Physics* **22**(9): 802-812.
- C. Lemarchand, B. Devincere and L. Kubin (2001). "Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **49**(9): 1969-1982.

- J. Lepinoux and L. Kubin (1987). "The dynamic organization of dislocation structures: a simulation." *Scripta Metallurgica* **21**(6): 833-838.
- H. Li, L. Xu and C. Liu (2005). "Temperature dependence of the first pressure derivative of the isothermal bulk modulus for solid materials at zero pressure: Application to MgO." *Journal of Geophysical Research* **110**:B05203
- L. Li, D. Weidner, J. Chen, M. Vaughan, M. Davis and W. Durham (2004). "X-ray strain analysis at high pressure: Effect of plastic deformation in MgO." *Journal of Applied Physics* **95**: 8357
- P. Li, S. Karato and Z. Wang (1996). "High-temperature creep in fine-grained polycrystalline CaTiO₃, an analogue material of (Mg, Fe) SiO₃ perovskite." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **95**(1-2): 19-36.
- Z. Liu, X. Sun, Q. Chen, L. Cai, X. Tan and X. Yang (2006). "High pressure melting of MgO." *Physics Letters A* **353**(2-3): 221-225.
- F. Louchet, L. Kubin and D. Vesely (1976). "Plastic behaviour of bcc metals Nb, Mo, Fe between 77 and 300 K investigated by means of in situ HVEM experiments (High Voltage Electron Microscopy)." *International Conference on the Strength of Metals and Alloys, 4th*, Nancy, France: 171-175
- F. Louchet, L. Kubin and D. Vesely (1979). "In situ deformation of b.c.c. crystals at low temperatures in a high voltage electron microscope Dislocation mechanisms and strain-rate equation." *Philosophical Magazine* **39**(4): 433-454.
- F. Louchet and J. Thibault-Desseaux (1987). "Dislocation cores in semiconductors. From the «shuffle or glide» dispute to the «glide and shuffle» partnership." *Revue de Physique Appliquée* **22**(4): 207-219.
- G. Lu (2005). "The Peierls–Nabarro model of dislocations: a venerable theory and its current development." *Handbook of Materials Modeling*: 773-792.
- G. Lu, N. Kioussis, V. Bulatov and E. Kaxiras (2000). "The peierls-nabarro model revisited." *Philosophical Magazine Letters* **80**(10): 675-682.
- L. Lu, Y. Cheng, X. Chen and J. Zhu (2005). "Thermodynamic properties of MgO under high pressure from first-principles calculations." *Physica B: Condensed Matter* **370**(1-4): 236-242.
- K. Lücke and A. Granato (1981). "Simplified theory of dislocation damping including point-defect drag. I. Theory of drag by equidistant point defects." *Physical Review B* **24**(12): 6991.
- R. Madec (2001). "Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC ; étude par Dynamique des Dislocations." *Thèse de Doctorat*.

- R. Madec, B. Devincre, and L. Kubin (2004). "On the use of periodic boundary conditions in dislocation dynamics simulations." *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength: proceedings of the IUTAM symposium held in Osaka, Japan, 6-11 July, 2003: volume in celebration of Professor Kitagawa's retirement*: 35.
- R. Madec, B. Devincre and L. Kubin (2002a). "On the nature of attractive dislocation crossed states." *Computational Materials Science* **23**(1-4): 219-224.
- R. Madec, B. Devincre and L. Kubin (2002b). "From dislocation junctions to forest hardening." *Physical Review Letters* **89**(25): 255508.
- R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc and D. Rodney (2003). "The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening." *Science* **301**(5641): 1879-1882.
- R. Madec and L. Kubin (2004a). *CIMTEC proceedings*.
- R. Madec and L. Kubin (2004b). "Dislocations interactions and symmetries in BCC crystals." *IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength: proceedings of the IUTAM symposium. Volume in celebration of Professor Kitagawa's retirement*. Osaka, Japan: 69.
- H. Mao and P. Bell (1979). "Equations of state of MgO and ϵ -Fe under static pressure conditions." *Journal of Geophysical Research* **84**(B9): 4533-4536.
- E. Mariani, J. Mecklenburgh, J. Wheeler, D. Prior and F. Heidelbach (2009). "Microstructure evolution and recrystallization during creep of MgO single crystals." *Acta Materialia* **57**(6): 1886-1898.
- K. Marklund and S. Mahmoud (1971). "Elastic constants of magnesium oxide." *Physica Scripta* **3**: 75.
- M. Matsui, S. Parker and M. Leslie (2000). "The MD simulation of the equation of state of MgO: Application as a pressure calibration standard at high temperature and high pressure." *American Mineralogist* **85**(2): 312.
- J. May and M. Kronberg (1960). "Temperature Dependence of Plastic Yield Stress of Single Crystals of Magnesium Oxide." *Journal of the American Ceramic Society* **43**(10): 525-530.
- C. Meade and R. Jeanloz (1988). "Yield strength of MgO to 40 GPa." *Journal of Geophysical Research* **93** (B4): 3261-3269
- H. Mecking and U. Kocks (1981). "Kinetics of flow and strain-hardening." *Acta Metallurgica* **29**(11): 1865-1875.
- M. Mehl, R. Cohen and H. Krakauer (1988). "Linearized augmented plane wave electronic structure calculations for MgO and CaO." *Journal of Geophysical Research* **93**(B7): 8009-8022.

- S. Mei, D. Kohlstedt, W. Durham and L. Wang (2008). "Experimental investigation of the creep behavior of MgO at high pressures." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **170**(3-4): 170-175.
- S. Mei, A. Suzuki, D. Kohlstedt, N. Dixon and W. Durham (2010). "Experimental constraints on the strength of the lithospheric mantle." *Journal of Geophysical Research* **115**.
- S. Merkel, A. Kubo, L. Miyagi, S. Speziale, T. S. Duffy, H. K. Mao and H. R. Wenk (2006). "Plastic deformation of MgGeO₃ post-perovskite at lower mantle pressures." *Science* **331**(5761): 644-646
- S. Merkel, H. R. Wenk, J. Shu, G. Shen, P. Gillet, H. Mao and R. J. Hemley (2002). "Deformation of polycrystalline MgO at pressures of the lower mantle." *Journal of Geophysical Research* **107**: 2271.
- U. Messerschmidt (2010). "Dislocation dynamics during plastic deformation."
- U. Messerschmidt (1988). "Line tension model of the interaction between dislocations and extended obstacles to glide." *Materials Science and Engineering* **100**: 101-108.
- U. Messerschmidt and F. Appel (1989). "Dislocation motion and formation of dislocation structures during in situ deformation in a high voltage electron microscope." *Materials Science and Engineering: A* **113**: 409-414.
- U. Messerschmidt and F. Appel (1985). "Characterization of precipitation hardening mechanisms by investigating dislocation dynamics in the HVEM." *Czechoslovak Journal of Physics* **35**(3): 217-220.
- G. Milne, J. Mitrovica and A. Forte (1998). "The sensitivity of glacial isostatic adjustment predictions to a low-viscosity layer at the base of the upper mantle." *Earth and Planetary Science Letters* **154**(1-4): 265-278.
- C. Miranda and S. Scandolo (2005). "Computational materials science meets geophysics: dislocations and slip planes of MgO." *Computer Physics Communications* **169**(1-3): 24-27.
- J. Mitrovica and A. Forte (2004). "A new inference of mantle viscosity based upon joint inversion of convection and glacial isostatic adjustment data." *Earth and Planetary Science Letters* **225**(1-2): 177-189.
- M. Miyata and T. Fujiwara (2001). "Ab initio calculation of Peierls stress in silicon." *Physical Review B* **63**(4): 045206.
- V. Mohles (2001). "Simulations of dislocation glide in overaged precipitation-hardened crystals." *Philosophical Magazine A* **81**(4): 971-990.
- G. Monnet, C. Domain, S. Queyreau, S. Naamane and B. Devincre (2009). "Atomic and dislocation dynamics simulations of plastic deformation in reactor pressure vessel steel." *Journal of Nuclear Materials* **394**(2-3): 174-181.

- G. Monnet (2006). "Investigation of precipitation hardening by dislocation dynamics simulations." *Philosophical Magazine* **86**(36): 5927-5941.
- G. Monnet, B. Devincre and L. Kubin (2004). "Dislocation study of prismatic slip systems and their interactions in hexagonal close packed metals: application to zirconium." *Acta Materialia* **52**(14): 4317-4328.
- C. Motz, D. Weygand, J. Senger and P. Gumbsch (2009). "Initial dislocation structures in 3-D discrete dislocation dynamics and their influence on microscale plasticity." *Acta Materialia* **57**(6): 1744-1754.
- O. Mryasov, Y. N. Gornostyrev, M. Van Schilfgaarde and A. Freeman (2002). "Superdislocation core structure in L12 Ni₃Al, Ni₃Ge and Fe₃Ge: Peierls-Nabarro analysis starting from ab-initio GSF energetics calculations." *Acta Materialia* **50**(18): 4545-4554.
- M. Murakami, Y. Ohishi, N. Hirao and K. Hirose (2009). "Elasticity of MgO to 130 GPa: Implications for lower mantle mineralogy." *Earth and Planetary Science Letters* **277**(1-2): 123-129.
- M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata and Y. Ohishi (2004). "Post-perovskite phase transition in MgSiO₃." *Science* **304**(5672): 885-858.
- S. Naamane (2008). "Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température : simulations de Dynamique des Dislocations." *Thèse de Doctorat*.
- S. Naamane, G. Monnet and B. Devincre (2010). "Low temperature deformation in iron studied with dislocation dynamics simulations." *International Journal of Plasticity* **26**(1): 84-92.
- F. Nabarro (2003). "One-dimensional models of thermal activation under shear stress." *Philosophical Magazine* **83**(26): 3047-3054.
- F. Nabarro (1947). "Dislocations in a simple cubic lattice." *Proceedings of the Physical Society* **59**: 256.
- Y. Nakada and A. Keh (1969). "Latent Hardening in Rock-Salt Type Crystals." *physica status solidi (b)* **32**(2): 715-730.
- A. Ngan and H. Zhang (1999). "A universal relation for the stress dependence of activation energy for slip in body-centered cubic crystals." *Journal of Applied Physics* **86**: 1236.
- L. Nicola, E. Van der Giessen and A. Needleman (2003). "Plasticity in polycrystalline thin films: a 2 D dislocation dynamics approach." *Material Research Society Symposim Proceedings* **779**.
- K. Obertlik, C. Robertson and B. Marini (2005). "Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension." *Journal of Nuclear Materials* **342**(1-3): 35-41.

- A. Oganov and P. Dorogokupets (2003). "All-electron and pseudopotential study of MgO : Equation of state, anharmonicity, and stability." *Physical Review B* **67**(22) 224110
- A. Oganov and S. Ono (2004). "Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth's D" layer." *Nature* **430**(445-448).
- A. Oganov, J. Brodholt and G. Price (2001). "The elastic constants of MgSiO₃ perovskite at pressures and temperatures of the Earth's mantle." *Nature* **411**(934-937).
- A. Oganov, M. Gillan and G. Price (2003). "Ab initio lattice dynamics and structural stability of MgO." *The Journal of chemical physics* **118**: 10174.
- S. Ono (2008). "Experimental constraints on the temperature profile in the lower mantle." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **170**(3-4): 267-273.
- S. Ono and A. Oganov (2005). "In situ observations of phase transition between perovskite and CaIrO₃-type phase in MgSiO₃ and pyrolytic mantle composition." *Earth and Planetary Science Letters* **236**(3-4): 914-932.
- M. Paterson (1987). "Problems in the extrapolation of laboratory rheological data." *Tectonophysics* **133**(1-2): 33-43.
- M. Paterson and C. Weaver (1970). "Deformation of polycrystalline MgO under pressure." *Journal of the American Ceramic Society* **53**(8): 463-471.
- A. Pedersen, L. Pizzagalli and H. Jónsson (2009). "Finding mechanism of transitions in complex systems: formation and migration of dislocation kinks in a silicon crystal." *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**: 084210.
- R. Peierls (1940). "The size of a dislocation." *Proceedings of the Physical Society*.
- D. Peirce, R. Asaro and A. Needleman (1982). "An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals." *Acta Metallurgica* **30**(6): 1087-1119.
- E. Perez-Albuerne and H. Drickamer (1965). "Effect of high pressures on the compressibilities of seven crystals having the NaCl or CsCl structure." *The Journal of chemical physics* **43**: 1381.
- C. Perrera da Costa (2004). "Rapport de stage de l'Institut National Polytechnique de Grenoble."
- O. Pfiffner and J. Ramsay (1982). "Constraints on geological strain rates: arguments from finite strain states of naturally deformed rocks." *Journal of Geophysical Research* **87**(B1): 311-321.
- P. Phakey, G. Dollinger and J. Christie (1972). "Transmission Electron Microscopy of Experimentally Deformed Olivine Crystals." In : *Flow and fracture of rocks* **16**: 117-139.

- J. Philibert (1979). "Glissement des dislocations et frottement de réseau". In : *Dislocation et Déformation Plastique*. Edited by P. Groh, L. Kubin, J-L. Martin. Ecole d'été d'Yrvals: 101-139.
- L. Pizzagalli, J. L. Demenet and J. Rabier (2009). "Theoretical study of pressure effect on the dislocation core properties in semiconductors." *Physical Review B* **79**(4): 045203.
- L. Pizzagalli, A. Pedersen, A. Arnaldsson, H. Jónsson and P. Beauchamp (2008). "Theoretical study of kinks on screw dislocation in silicon." *Physical Review B* **77**(6): 064106.
- J. Poirier (1985). "Creep of crystals." Cambridge University Press. Cambridge.
- M. Puls and M. Norgett (1976). "Atomistic calculation of the core structure and Peierls energy of an $1/2[110]$ edge dislocation in MgO." *Journal of Applied Physics* **47**: 466.
- D. Quesnel, A. Sato and M. Meshii (1975). "Solution softening and hardening in the Iron-Carbon system." *Materials Science and Engineering* **18**(2): 199-208.
- S. Queyreau (2008). "Etude des mécanismes d'écrouissage sous irradiation de la ferrite par simulations de Dynamique des Dislocations." *Thèse de Doctorat*.
- S. Queyreau, G. Monnet and B. Devincere (2010). "Orowan strengthening and forest hardening superposition examined by dislocation dynamics simulations." *Acta Materialia* **58**(17): 5586-5595.
- S. Queyreau, G. Monnet and B. Devincere (2009). "Slip systems interactions in α -iron determined by dislocation dynamics simulations." *International Journal of Plasticity* **25**(2): 361-377.
- P. Raterron and S. Merkel (2009). "In situ rheological measurements at extreme pressure and temperature using synchrotron X-ray diffraction and radiography." *Journal of Synchrotron Radiation* **16**(6): 748-756.
- M. Rhee, J. Stolken, V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, H. Zbib and J. Hirth (2001). "Dislocation stress fields for dynamic codes using anisotropic elasticity: methodology and analysis." *Materials Science and Engineering A* **A309-310**: 288-293.
- M. R. Riedel and S. Karato (1997). "Grain-size evolution in subducted oceanic lithosphere associated with the olivine-spinel transformation and its effects on rheology." *Earth and Planetary Science Letters* **148**(1-2): 27-43.
- W. H. Robinson (1972). "Amplitude-independent mechanical damping in alkali halides." *Journal of Materials Science* **7**(1): 115-123.
- W. H. Robinson and H. K. Birnbaum (1966). "High-Temperature Internal Friction in Potassium Chloride." *Journal of Applied Physics* **37**(10): 3754-3766.
- D. Rodney (2007). "Activation enthalpy for kink-pair nucleation on dislocations: Comparison between static and dynamic atomic-scale simulations." *Physical Review B* **76**(14): 144108.

- D. Rodney and R. Phillips (1999). "Structure and strength of dislocation junctions: An atomic level analysis." *Physical Review Letters* **82**(8): 1704-1707.
- J. Routbort (1979). "Work hardening and creep of MgO." *Acta Metallurgica* **27**(4): 649-661.
- G. Saada (1960). "Sur le durcissement dû à la recombinaison des dislocations." *Acta Metallurgica* **8**(12): 841-847.
- F. Sato and K. Sumino (1980). "The yield strength and dynamic behaviour of dislocations in MgO crystals at high temperatures." *Journal of Materials Science* **15**(7): 1625-1634.
- G. Schoeck (2006). "The core structure of dislocations: Peierls model vs. atomic simulation." *Acta Materialia* **54**(18): 4865-4870.
- G. Schoeck (2005). "The Peierls model: Progress and limitations." *Materials Science and Engineering A* **400**: 7-17.
- G. Schoeck (1965). "The activation energy of dislocation movement." *physica status solidi (b)* **8**(2): 499-507
- G. Schoeck and R. Frydman (1972). "The contribution of the dislocation forest to the flow stress." *physica status solidi (b)* **53**(2): 661-673.
- R. Schroll, V. Vitek and P. Gumbsch (1998). "Core properties and motion of dislocations in NiAl." *Acta Materialia* **46**(3): 903-918.
- B. Schuberth, H-P. Bunge, G. Steinle-Neumann, C. Moder and J. Oeser (2009). "Thermal versus elastic heterogeneity in high-resolution mantle circulation models with pyrolite composition: High plume excess temperatures in the lowermost mantle." *Geochemistry Geophysics Geosystems* **10**(1): Q01W01.
- K. Schwarz (1999). "Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and examples." *Journal of Applied Physics* **85**: 108.
- A. Seeger (1984). "Structure and Diffusion of Kinks in Monatomic Crystals." *Dislocations 1984, Aussois, France*.
- A. Seeger (1981). "The kink picture of dislocation mobility and dislocation-point-defect interactions." *Journal de Physique* **10**(42): C5201-C5208.
- A. Seeger and P. Schiller (1962). "Bildung und diffusion von kinken als grundprozess der versetzungsbewegung bei der messung der inneren reibung." *Acta Metallurgica* **10**(4): 348-357.
- C. Shin, M. Fivel, M. Verdier and C. Robertson (2005). "Dislocation dynamics simulations of fatigue of precipitation-hardened materials." *Materials Science and Engineering A* **400**: 166-169.

- A. Singh (1993). "The lattice strains in a specimen (cubic system) compressed nonhydrostatically in an opposed anvil device." *Journal of Applied Physics* **73**(9): 4278-4286.
- R. Singh and R. Coble (1974a). "Dynamic dislocation behavior in ``pure"magnesium oxide single crystals." *Journal of Applied Physics* **45**: 981.
- R. Singh and R. Coble (1974b). "Dynamic dislocation behavior in iron-doped magnesium oxide crystals." *Journal of Applied Physics* **45**: 990.
- R. P. Singh, M. Singh and R. K. Singh (2008). "Acoustical dissipation due to phonon-phonon interaction, thermoelastic loss and dislocation damping in MnO and CoO." *Journal of the Acoustical Society of America* **123**(5): 3454.
- M. Sinha, D. Lloyd and K. Tangri (1973). "Dislocation dynamics and thermally-activated deformation of MgO single crystals." *Philosophical Magazine* **28**(6): 1341-1352.
- S. Sinogeikin and J. Bass (2000). "Single-crystal elasticity of pyrope and MgO to 20 GPa by Brillouin scattering in the diamond cell." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **120**(1-2): 43-62
- S. Sinogeikin and J. Bass (1999). "Single-crystal elasticity of MgO at high pressure." *Physical Review B* **59**(22): 14141-14144.
- V. Solomatov and C. Reese (2008). "Grain size variations in the Earth's mantle and the evolution of primordial chemical heterogeneities." *Journal of Geophysical Research* **113**(B07408): B07408.
- V. Solomatov, R. El-Khozondar and V. Tikare (2002). "Grain size in the lower mantle: constraints from numerical modeling of grain growth in two-phase systems." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **129**(3-4): 265-282.
- V. Solomatov and L. Moresi (2002). "Small-scale convection in the D00 layer." *Journal of Geophysical Research* **107**: 2016.
- H. Spetzler (1970). "Equation of state of polycrystalline and single-crystal MgO to 8 kilobars and 800 K." *Journal of Geophysical Research* **75**(11): 2073-2087.
- S. Speziale, C. Zha, T. Duffy, R. Hemley and H. Mao (2001). "Quasi-hydrostatic compression of magnesium oxide to 52 GPa- Implications for the pressure-volume-temperature equation of state." *Journal of Geophysical Research* **106**: 515-528.
- W. Spitzig and A. Keh (1970a). "The role of internal and effective stresses in the plastic flow of iron single crystals." *Metallurgical and Materials Transactions B* **1**(12): 3325-3331.
- W. Spitzig and A. Keh (1970b). "The effect of orientation and temperature on the plastic flow properties of iron single crystals." *Acta Metallurgica* **18**(6): 611-622

- M. Srinivasan and T. Stoebe (1974). "Temperature dependence of yielding and work-hardening rates in magnesium oxide single crystals." *Journal of Materials Science* **9**(1): 121-128.
- M. Srinivasan et T. Stoebe (1973). "Thermally activated flow parameters in the deformation of MgO single crystals." *Journal of Materials Science* **8**(11): 1567-1572
- M. Srinivasan and T. Stoebe (1970). "Effect of Impurities on the Mechanical Behavior of MgO Single Crystals." *Journal of Applied Physics* **41**(9): 3726-3730.
- M. Srinivasan, H. Fotedar and T. Stoebe (1973). "Dislocation dynamics in LiF and MgO single crystals." *physica status solidi (a)* **17**(1): 257-265.
- F. Stacey (1992). "Physics of the Earth." *Brookfield Press, Brisbane, Qld.*
- B. Steinberger and A. Calderwood (2006). "Models of large-scale viscous flow in the Earth's mantle with constraints from mineral physics and surface observations." *Geophysical Journal International* **167**(3): 1461-1481.
- R. Stokes (1963). "Microstructure and Mechanical Properties of Ceramics." *Nineteenth Technical Reports. Office of Naval Research Project.* Honeywell Research Center, Hopkins, Minnesota. USA.
- A. Strachan, T. Çağın and W. Goddard III (2001). "Reply to "Comment on 'Phase diagram of MgO from density-functional theory and molecular-dynamics simulations.'" *Physical Review B* **63**(096102).
- A. Strachan, T. Çağın and W. Goddard III (1999). "Phase diagram of MgO from density-functional theory and molecular-dynamics simulations." *Physical Review B* **60**(22): 15084.
- I. Stretton, F. Heidelbach, S. Mackwell and F. Langenhorst (2001). "Dislocation creep of magnesiowüstite (Mg_{0.8}Fe_{0.2}O)." *Earth and Planetary Science Letters* **194**(1-2): 229-240.
- Y. Sumino, O. Anderson and I. Suzuki (1983). "Temperature coefficients of elastic constants of single crystal MgO between 80 and 1,300 K." *Physics and Chemistry of Minerals* **9**(1): 38-47.
- T. Suzuki, S. Takeuchi and H. Yoshinaga (1991). "Dislocation dynamics and plasticity." **12**.
- B. von Sydow, J. Hartford and G. Wahnström (1999). "Atomistic simulations and Peierls-Nabarro analysis of the Shockley partial dislocations in palladium." *Computational Materials Science* **15**: 367-379.
- S. Takeuchi, H. Koizumi and T. Suzuki (2009). "Peierls stress and kink pair energy in NaCl type crystals." *Materials Science and Engineering: A* **521**: 90-93.

- M. Tang, B. Devincere and L. Kubin (1999). "Simulation and modelling of forest hardening in body centre cubic crystals at low temperature." *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **7**(5): 893-908.
- M. Tang, M. Fivel and L. Kubin (2001). "From forest hardening to strain hardening in body centered cubic single crystals: simulation and modeling." *Materials Science & Engineering A* **309**: 256-260.
- M. Tang and L. Kubin (2001). "Boundary conditions for dislocation dynamics simulations and stage 0 of BCC metals at low temperature." *Materials Research Society Symposium Proceedings* **677**.
- M. Tang, L. Kubin and G. Canova (1998). "Dislocation mobility and the mechanical response of bcc single crystals: A mesoscopic approach." *Acta Materialia* **46**(9): 3221-3235.
- Y. Tange, Y. Nishihara and T. Tsuchiya (2009). "Unified analyses for PVT equation of state of MgO: A solution for pressure-scale problems in high PT experiments." *Journal of Geophysical Research* **114**: B03208.
- P. Tangney and S. Scandolo (2009). "Melting slope of MgO from molecular dynamics and density functional theory." *The Journal of chemical physics* **131**: 124510.
- C. Teodosiu and F. Sidoroff (1976). "A theory of finite elastoviscoplasticity of single crystals." *International Journal of Engineering Science* **14**(2): 165-176.
- C. Tommaseo, J. Devine, S. Merkel, S. Speziale and H. Wenk (2006). "Texture development and elastic stresses in magnesiowüstite at high pressure." *Physics and Chemistry of Minerals* **33**(2): 84-97.
- Y. Touloukian, R. Kirby, E. Taylor and T. Lee (1977). "Thermophysical properties of matter-the TPRC data series." *Thermal expansion-nonmetallic solids* **13**.
- C. Tromas, J. Girard and J. Woïrgard (2000). "Study by atomic force microscopy of elementary deformation mechanisms involved in low load indentations in MgO crystals." *Philosophical Magazine A* **80**(10): 2325-2335.
- O. Tyupkina (1992). "Dislocation ensemble movement through random arrays of obstacles." *Philosophical Magazine A* **65**(1): 111-122.
- T. Uchida, Y. Wang, M. Rivers and S. Sutton (2004). "Yield strength and strain hardening of MgO up to 8 GPa measured in the deformation-DIA with monochromatic X-ray diffraction." *Earth and Planetary Science Letters* **226**(1-2): 117-126.
- N. Urabe and J. Weertman (1975). "Dislocation mobility in potassium and iron single crystals." *Materials Science and Engineering* **18**(1): 41-49.
- A. Vattré, B. Devincere and A. Roos (2009). "Dislocation dynamics simulations of precipitation hardening in Ni-based superalloys with high γ' volume fraction." *Intermetallics* **17**(12): 988-994.

- M. Verdier, M. Fivel and I. Groma (1998). "Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications." *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* **6**: 755.
- V. Vitek (1968). "Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals." *Philosophical Magazine* **18**: 773
- V. Vitek and F. Kroupa (1968). "Sessile splitting of screw dislocations in bcc metals." *Czechoslovak Journal of Physics* **18**(4): 464-470.
- V. Vitek and M. Yamaguchi (1973). "Core structure of nonscrew $1/2$ (111) dislocations on (110) planes in bcc crystals. II. Peierls stress and the effect of an external shear stress on the cores." *Journal of Physics F: Metal Physics* **3**: 537.
- L. Vočadlo and G. Price (1996). "The melting of MgO : computer calculations via molecular dynamics." *Physics and Chemistry of Minerals* **23**(1): 42-49.
- J. Wang (1996). "Prediction of Peierls stresses for different crystals." *Materials Science and Engineering A* **206**(2): 259-269.
- Y. Wang, W. Durham, I. Getting and D. Weidner (2003). "The deformation-DIA: A new apparatus for high temperature triaxial deformation to pressures up to 15 GPa." *Review of scientific instruments* **74**: 3002.
- J. Washburn, G. Groves, A. Kelly and G. Williamson (1960). "Electron microscope observations of deformed magnesium oxide." *Philosophical Magazine* **5**(58): 991-999.
- J. Weaver, T. Takahashi and W. Basset (1971). "Calculation of the P-V relation for sodium chloride up to 300 kilobars at 25 °C". In : *Accurate characterization of the high-pressure environment*. Edited by E. Lloyd. NBS Special Publication 326. 189-199.
- C. Weaver and M. Paterson (1969). "Deformation of Cube-Oriented MgO Crystals Under Pressure." *Journal of the American Ceramic Society* **52**(6): 293-302.
- D. Weidner and L. Li (2006). "Measurement of stress using synchrotron x-rays." *Journal of Physics: Condensed Matter* **18**: S1061.
- D. Weidner, Y. Wang and M. Vaughan (1994). "Yield strength at high pressure and temperature." Citation: Zhang, L., and Y. Fei (2008), *Melting behavior of (Mg,Fe)O solid solutions at high pressure*, *Geophys. Res. Lett.*, **35**, L13302, doi:10.1029/2008GL034585. **21**(9): 753-756.
- J. Weiss and D. Marsan (2003). "Three-dimensional mapping of dislocation avalanches: clustering and space/time coupling." *Science* **299**(5603): 89-92.
- D. Weygand, J. Senger, C. Motz, W. Augustin, V. Heuveline and P. Gumbsch (2009). "High Performance Computing and Discrete Dislocation Dynamics: Plasticity of Micrometer Sized Specimens." *High Performance Computing in Science and Engineering'08*: 507-523.

- L. Wickham, K. Schwarz and J. Stölken (1999). "Rules for forest interactions between dislocations." *Physical Review Letters* **83**(22): 4574-4577.
- C. Woo and M. Püls (1977). "The Peierls mechanism in MgO." *Philosophical Magazine* **35**(6): 1641-1652.
- D. Yamazaki and S. Karato (2002). "Fabric development in (Mg, Fe) O during large strain, shear deformation: implications for seismic anisotropy in Earth's lower mantle." *Physics of the Earth and Planetary Interiors* **131**(3-4): 251-267.
- L. Yang, P. Söderlind and J. Moriarty (2001). "Atomistic simulation of pressure-dependent screw dislocation properties in bcc tantalum." *Materials Science and Engineering A* **309**: 102-107.
- A. Yoneda (1990). "Pressure derivatives of elastic constants of single crystal MgO and MgAl_2O_4 ." *Journal of Physics of the Earth* **38**: 19-55
- A. Zerr and R. Boehler (1994). "Constraints on the melting temperature of the lower mantle from high-pressure experiments on MgO and magnesioüstite." *Nature* **371**: 506-508.
- C. Zha, H. Mao and R. Hemley (2000). "Elasticity of MgO and a primary pressure scale to 55 GPa." *Proceedings of the National Academy of Sciences* **97**(25): 13494.

ANNEXE

BASE DE VECTEURS MgO

Indice	Plan	Ligne	Déplacement
--------	------	-------	-------------

Système numéro : 1 $\vec{b} = \frac{1}{2}[110]$

1:	(-1 1 0)	[6 6 0]	[0 0 -6]
2:	(-1 1 0)	[6 6 6]	[2 2 -4]
3:	(-1 1 0)	[0 0 6]	[6 6 0]
4:	(-1 1 0)	[-6 -6 6]	[2 2 4]
5:	(-1 1 0)	[-6 -6 0]	[0 0 6]
6:	(-1 1 0)	[-6 -6 -6]	[-2 -2 4]
7:	(-1 1 0)	[0 0 -6]	[-6 -6 0]
8:	(-1 1 0)	[6 6 -6]	[-2 -2 -4]

Système numéro : 2 $\vec{b} = \frac{1}{2}[1\bar{1}0]$

9:	(1 1 0)	[6 -6 0]	[0 0 -6]
10:	(1 1 0)	[6 -6 6]	[2 -2 -4]
11:	(1 1 0)	[0 0 6]	[6 -6 0]
12:	(1 1 0)	[-6 6 6]	[2 -2 4]
13:	(1 1 0)	[-6 6 0]	[0 0 6]
14:	(1 1 0)	[-6 6 -6]	[-2 2 4]

15:	(1 1 0)	[0 0 -6]	[-6 6 0]
16:	(1 1 0)	[6 -6 -6]	[-2 2 -4]

Système numéro : 3 $\vec{b} = \frac{1}{2}[011]$

17:	(0 -1 1)	[0 6 6]	[-6 0 0]
18:	(0 -1 1)	[6 6 6]	[-4 2 2]
19:	(0 -1 1)	[6 0 0]	[0 6 6]
20:	(0 -1 1)	[6 -6 -6]	[4 2 2]
21:	(0 -1 1)	[0 -6 -6]	[6 0 0]
22:	(0 -1 1)	[-6 -6 -6]	[4 -2 -2]
23:	(0 -1 1)	[-6 0 0]	[0 -6 -6]
24:	(0 -1 1)	[-6 6 6]	[-4 -2 -2]

Système numéro : 4 $\vec{b} = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$

25:	(0 1 1)	[0 6 -6]	[-6 0 0]
26:	(0 1 1)	[6 6 -6]	[-4 2 -2]
27:	(0 1 1)	[6 0 0]	[0 6 -6]
28:	(0 1 1)	[6 -6 6]	[4 2 -2]
29:	(0 1 1)	[0 -6 6]	[6 0 0]
30:	(0 1 1)	[-6 -6 6]	[4 -2 2]
31:	(0 1 1)	[-6 0 0]	[0 -6 6]
32:	(0 1 1)	[-6 6 -6]	[-4 -2 2]

Système numéro : 5 $\vec{b} = \frac{1}{2}[101]$

33:	(-1 0 1)	[6 0 6]	[0 6 0]
34:	(-1 0 1)	[6 -6 6]	[2 4 2]
35:	(-1 0 1)	[0 -6 0]	[6 0 6]
36:	(-1 0 1)	[-6 -6 -6]	[2 -4 2]
37:	(-1 0 1)	[-6 0 -6]	[0 -6 0]
38:	(-1 0 1)	[-6 6 -6]	[-2 -4 -2]
39:	(-1 0 1)	[0 6 0]	[-6 0 -6]
40:	(-1 0 1)	[6 6 6]	[-2 4 -2]

Système numéro : 6 $\vec{b} = \frac{1}{2}[10\bar{1}]$

41:	(1 0 1)	[6 0 -6]	[0 6 0]
-----	-----------	------------	-----------

42:	(1 0 1)	[6 -6 -6]	[2 4 -2]
43:	(1 0 1)	[0 -6 0]	[6 0 -6]
44:	(1 0 1)	[-6 -6 6]	[2 -4 -2]
45:	(1 0 1)	[-6 0 6]	[0 -6 0]
46:	(1 0 1)	[-6 6 6]	[-2 -4 2]
47:	(1 0 1)	[0 6 0]	[-6 0 6]
48:	(1 0 1)	[6 6 -6]	[-2 4 2]

Système numéro : 7 $\vec{b} = \frac{1}{2}[110]$

49:	(0 0 1)	[6 6 0]	[-3 3 0]
50:	(0 0 1)	[6 0 0]	[0 6 0]
51:	(0 0 1)	[6 -6 0]	[3 3 0]
52:	(0 0 1)	[0 -6 0]	[6 0 0]
53:	(0 0 1)	[-6 -6 0]	[3 -3 0]
54:	(0 0 1)	[-6 0 0]	[0 -6 0]
55:	(0 0 1)	[-6 6 0]	[-3 -3 0]
56:	(0 0 1)	[0 6 0]	[-6 0 0]

Système numéro : 8 $\vec{b} = \frac{1}{2}[1\bar{1}0]$

57:	(0 0 1)	[6 -6 0]	[3 3 0]
58:	(0 0 1)	[0 -6 0]	[6 0 0]
59:	(0 0 1)	[-6 -6 0]	[3 -3 0]
60:	(0 0 1)	[-6 0 0]	[0 -6 0]
61:	(0 0 1)	[-6 6 0]	[-3 -3 0]
62:	(0 0 1)	[0 6 0]	[-6 0 0]
63:	(0 0 1)	[6 6 0]	[-3 3 0]
64:	(0 0 1)	[6 0 0]	[0 6 0]

Système numéro : 9 $\vec{b} = \frac{1}{2}[011]$

65:	(1 0 0)	[0 6 6]	[0 -3 3]
66:	(1 0 0)	[0 6 0]	[0 0 6]
67:	(1 0 0)	[0 6 -6]	[0 3 3]
68:	(1 0 0)	[0 0 -6]	[0 6 0]
69:	(1 0 0)	[0 -6 -6]	[0 3 -3]
70:	(1 0 0)	[0 -6 0]	[0 0 -6]
71:	(1 0 0)	[0 -6 6]	[0 -3 -3]

72: (1 0 0) [0 0 6] [0 -6 0]

Système numéro : 10 $\vec{b} = \frac{1}{2}[01\bar{1}]$

73: (1 0 0) [0 6 -6] [0 3 3]

74: (1 0 0) [0 0 -6] [0 6 0]

75: (1 0 0) [0 -6 -6] [0 3 -3]

76: (1 0 0) [0 -6 0] [0 0 -6]

77: (1 0 0) [0 -6 6] [0 -3 -3]

78: (1 0 0) [0 0 6] [0 -6 0]

79: (1 0 0) [0 6 6] [0 -3 3]

80: (1 0 0) [0 6 0] [0 0 6]

Système numéro : 11 $\vec{b} = \frac{1}{2}[101]$

81: (0 1 0) [6 0 6] [3 0 -3]

82: (0 1 0) [0 0 6] [6 0 0]

83: (0 1 0) [-6 0 6] [3 0 3]

84: (0 1 0) [-6 0 0] [0 0 6]

85: (0 1 0) [-6 0 -6] [-3 0 3]

86: (0 1 0) [0 0 -6] [-6 0 0]

87: (0 1 0) [6 0 -6] [-3 0 -3]

88: (0 1 0) [6 0 0] [0 0 -6]

Système numéro : 12 $\vec{b} = \frac{1}{2}[10\bar{1}]$

89: (0 1 0) [6 0 -6] [-3 0 -3]

90: (0 1 0) [6 0 0] [0 0 -6]

91: (0 1 0) [6 0 6] [3 0 -3]

92: (0 1 0) [0 0 6] [6 0 0]

93: (0 1 0) [-6 0 6] [3 0 3]

94: (0 1 0) [-6 0 0] [0 0 6]

95: (0 1 0) [-6 0 -6] [-3 0 3]

96: (0 1 0) [0 0 -6] [-6 0 0]

