

Thèse

Université Lille 1 Sciences et Technologies

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

Présentée par

Antoine KRAYCH

Pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université

Spécialité : Sciences des Matériaux

Modélisation à l'échelle atomique du rôle des dislocations dans la déformation de la bridgmanite

Thèse dirigée par Philippe Carrez et Patrick Cordier

Soutenue le 20 juin 2016, devant le jury composé de :

A. DIMANOV

D. RODNEY

C. LITHGOW-BERTELLONI

B. REYNARD

L. STIXRUDE

Ph. CARREZ

P. CORDIER

Rapporteur

Rapporteur

Examinatrice

Examineur

Examineur

Directeur de thèse

Directeur de thèse

*Une noix ? Qu'y a-t-il a l'intérieur d'une noix ?
Qu'est-ce qu'on y voit ? Quand elle est fermée ...
On y voit mille soleils
Tous à tes yeux bleus pareils
On y voit briller la mer
Et dans l'espace d'un éclair
Un voilier noir, qui chavire
On y voit les écoliers
Qui dévorent leur tabliers
Des abbés à bicyclette
Le quatorze juillet en fête
Et ta robe au vent du soir*

Charles Trenet, Une noix

Je dédie cette thèse à mes proches, et en particulier à ma mère, Danièle Verbeke

Remerciements

En tout premier lieu, je remercie les membres de mon jury de thèse. Alexandre Dimanov, Carolina Lithgow-Bertelloni, David Rodney et Lars Stixrude, pour avoir accepté de rapporter et d'examiner mon travail, ainsi que Bruno Reynard pour avoir accepté de présider ce jury.

Je remercie ensuite mes deux directeurs de thèse, Philippe Carrez et Patrick Cordier. Je vous suis très reconnaissant de la patience que vous avez eu à mon égard et de votre investissement quotidien dans ce travail. Chacun à votre manière, mais de façon complémentaire, vous avez su m'aider efficacement et me former à devenir chercheur.

Philippe, je garde un excellent souvenir de nos discussions scientifiques passionnantes, durant lesquelles les problèmes soulevés ressemblaient à des enquêtes policières qu'il fallait résoudre. Merci pour ton enthousiasme et ton soutien sans faille, lorsqu'aucun de mes calculs ne semblaient vouloir fonctionner (je parle bien sûr de la NEB), mais aussi pour ta sympathie et ton humour. J'ai grandement appris à tes côtés.

Patrick, merci de m'avoir accordé ta confiance sur ce projet, et d'avoir mobilisé autant de temps et de moyens afin que ma thèse se passe dans les meilleures conditions. Tu as toujours été disponible et ouvert à la discussion, tu as su me guider en science ainsi que sur mes questionnements parfois extrêmement confus. J'ai beaucoup apprécié nos discussions scientifiques, parfois philosophiques, et ton regard aiguisé sur la recherche. Nombre de tes conseils restent ancrés dans ma mémoire.

En ce qui concerne l'aide technique que j'ai pu recevoir durant cette thèse, je souhaite aussi remercier trois personnes. Merci à Pierre Hirel, pour son soutien constant. J'ai eu la chance de recevoir tes conseils, et de pouvoir utiliser le code atomsk que tu as conçu, ainsi que son petit frère certes maudit mais bien utile, crados. Merci aussi pour les innombrables discussions, les rires, et d'avoir su rester tolérant avec mes questions les plus maladroitement. Merci à Karine Gouriet qui m'a toujours accordé son aide, et aussi à Emmanuel Clouet du CEA, pour son aide technique dans la construction de doubles-décrochements, et le calcul d'interactions élastiques entre dislocations et d'enthalpie de migration de dislocations.

Ensuite, comment ne pas penser à ma famille. À ma grand mère, en qui je suis reconnaissant d'avoir été là pour s'occuper de nous. Je n'arrive toujours pas à être ponctuel, mais j'y travaille. À ma mère, merci de m'avoir insufflé ta soif de connaissance, et ton respect pour le savoir. Ce que tu m'as transmis me suffira à mener une existence heureuse et digne. À mon père qui, dans un parfum de cèdres, a partagé avec moi sa joie et son irrationalité, protection efficace contre

l'ennui de la normalité. À mon frère, qui a toujours été tolérant avec moi, et à l'écoute de mes conseils maladroits, que j'admire et qui m'inspire.

L'école madame Roland, petite école publique de quartier. C'est là, je pense, entre les lectures de Jules Vernes, les délivrances, la contemplation des mouches, mais surtout grâce à la patience de mes instituteurs, que ma curiosité s'est éveillée. Merci à mes chers instituteurs, Madame Humbert, Monsieur Madelain, Monsieur Sablon, Madame Vanthournout et Madame Schwetzer. Je me souviendrai toujours de vous avec le plus grand respect. Je garde en tête cette paraphe de Monsieur Sablon, sur mon dictionnaire. *"Bon voyage vers les étoiles, sans trop rester dans la lune"*.

Mes amis. *"Ils sont extrêmement rares et précieux. On peut faire du vélo avec eux sans parler pendant que le soir tombe négligemment sur le champ de blé, et on a même pas mal dans les jambes dans les cotes."* J'ai gravi quelques cotes auprès de vous, au sens propre. Victor, Romain et Pierre. *Nous étions quatre bacheliers, sans vergogne.* Et Martin que j'ai connu un peu plus tard, mais sur qui j'ai toujours pu compter.

Et aussi, une pensée pour Marine, avec qui j'ai partagé quatre ans. Merci d'avoir partagé avec moi ta joie de vivre, ton optimisme et ton intelligence qui ont tant compté.

Je reviens à l'UMET. En franchissant la porte du C6, en tant que stagiaire, je pensais ne rencontrer que des gens trop sérieux. Mais je m'y suis finalement vite senti à l'aise. Merci à ceux avec qui j'ai partagé un bureau. Le bureau 10bis, avec Priscille, Julie et Juliette. J'en garde d'excellents souvenirs, mais aussi quelques traumatismes (ne jamais déranger Priscille au téléphone, ou pendant sa sieste de midi). Malgré ces deux épisodes de colère biblique, je serai toujours à l'écoute de tes conseils, et si un jour tu montes une armée de féministe c'est probablement la seule armée de laquelle je veux bien ne pas désertir. De l'autre côté du mûr, j'aimerais aussi remercier Saadia, meilleur parti de l'UMET, qui rayonne tel un soleil dans mon cœur (mais qui m'a aussi mis des coups de soleil parfois), et merci de m'avoir donné à manger. *Ce n'était rien qu'un peu de pain, mais il m'avait chauffé le corps, et dans mon âme il brûle encore, à la manière d'un grand festin.* Aussi une pensée pour Eric, qui est parti à Bangkok ou je ne sais où, soi-disant pour faire de la science. Merci Eric, surtout pour m'avoir appris ce qu'était une coprolithe. Et enfin Yvan, merci de m'avoir prêté un euro et de ne pas m'avoir lancé de sorts.

En démarrant ma thèse, je me suis rapproché du ciel, de deux étages exactement. Dans cette pure ascension, j'ai partagé un bureau avec Sir Arthur William Ritterbex, chevalier allemand perdu dans le plat pays, Pierre Hirel, don Quichotte breton en croisade contre des moulins numériques, Xiaoyu Sun qui a eu le courage de venir de Chine pour étudier les disclinaisons, Francesca Boioli de Milan, perfectionniste et rock & roll, et enfin Sacha Goryaeva, hérisson russe. Un clin d'œil aux "nouveaux" dans le projet Rheoman, Srinivasan Mahendran et Riccardo Reali. Bon courage à vous deux. Grâce à ce projet, j'ai eu la chance de rencontrer des personnalités très différentes, aussi bien par leur caractère que par leur culture, ce qui a été une vraie richesse.

Autre endroit où j'ai passé du temps, cœur de tout laboratoire (autant faire dans le cliché jusqu'au bout), la salle café. D'apparence innocente, peut être un peu désuète, cette salle est en réalité extrêmement dangereuse. Il faut avoir le verbe aiguisé et les réflexes de Bruce Lee pour

sortir vivant des joutes verbales qui y ont lieu. N'ayant rien de tout cela, je suis redevenu cendres à de multiples reprises. J'ai pu tout de même y rencontrer des personnalités très attachantes. Mathieu Roskosz, Sebastien Merkel, Nadège Hilairat, Ahmed Addad, Damien Jacob, Paul Raterron, Christophe Depecker, et Christopher Langrand, j'ai beaucoup apprécié les discussions et les rires avec vous. Un dernier clin d'œil aux métallurgistes, que j'ai pu rencontrer de l'autre côté du couloir et avec qui j'ai aussi bien ri : Damien Creton, Claire Schayes, Marc-Antoine Louchez, Gulzar Seidametova, Jérôme Dequeker, Kaoutar Naji, Maxime Delbove et Romain Candela.

Enfin, entre la salle café et mon bureau, j'ai été témoin d'un phénomène étrange. Une force mystique m'aspirait irrémédiablement vers le portail 210. Un portail qui menait vers l'Olympe, désormais peuplé d'hybrides, mi titans mi démons. Le premier d'entre eux, Nils, a été l'équivalent d'un guide spirituel pour moi dans ces contrées dévastées. J'ai parfois cru qu'il avait le cœur noir, pour me rendre compte que c'était juste une couche de brûlé. Ensuite, l'homme aux mille prénoms, Boris Laurent. Comme sa non-identité le laisse présager, cet être est voué à voler l'âme de pauvres mortels. Il est capable de vous terrasser en vous faisant convulser de rire. Dans ce registre, personne ne l'égale, si ce n'est celui qui se trouvait en face de lui, François le Housaer. Les sports n'ont pas de secret pour lui. Il est capable de dunker d'une main et de smacher de l'autre, tout en exécutant un moonwalk. Dans le registre du sport, un certain Belino n'était pas trop mauvais non plus. Bien qu'il admirât un cancrelat de tennisman, cet homme était ma foi fort bon et je suis bien aise de l'avoir rencontré. Un jour peut être nous atteindrons la vague 16.

Les remerciements touchent à leur fin, ainsi que pour moi, l'écriture de cette thèse. Je voudrais finir en disant simplement merci à tous mes proches. J'aurais pu naître n'importe où, voir ne pas naître du tout, mais je suis né parmi vous. En comparaison à vous, cette thèse en physique ne représente que bien peu de chose. La déformation du manteau terrestre ? Je ne savais pas ce que c'était il y a 5 ans, et ce peu de savoir m'échappe déjà. Mais vous, mes proches, je ne vous oublierai jamais, car je ne suis pas beaucoup plus que l'accumulation des moments passés auprès de vous.

Résumé

La déformation des roches du manteau terrestre contrôle les mécanismes de convection du manteau, qui se manifestent à notre échelle par les séismes, les volcans ou encore la tectonique des plaques. Cette étude propose une détermination de la mobilité des dislocations, et leur rôle dans la déformation plastique de la bridgmanite, principal constituant du manteau terrestre. La structure des dislocations à l'échelle atomique détermine leur capacité à se propager dans un cristal, et donc à déformer le matériau. Nous accédons à la structure de ces défauts aux pressions du manteau, en les modélisant à l'échelle atomique dans des calculs de statique moléculaire. Le mécanisme de propagation thermiquement activé des dislocations dans la bridgmanite, la nucléation de doubles décrochements, est évalué en couplant un modèle continu aux propriétés fondamentales des dislocations déterminées numériquement. Ces résultats permettent d'accéder à la vitesse de glissement des dislocations aux pressions et températures du manteau terrestre. Le modèle est capable de reproduire les niveaux de contraintes soutenus par la bridgmanite lors d'expériences de déformation en laboratoire. Le modèle est également capable d'estimer l'efficacité du glissement des dislocations aux conditions du manteau, et de discuter de sa pertinence dans le cadre de la déformation du manteau terrestre.

Abstract

Heat transfer through the mantle is carried by convection, which involves plastic flow of the mantle constituents. In this study, we model the mobility of dislocations, and their role in the plastic deformation of bridgmanite, the most abundant constituent of the lower mantle. The dislocation structures at the atomic scale control their mobility, and hence their influence in the material deformation. We determine the structure of dislocations at pressure relevant to the lower mantle, by modeling these defects at the atomic scale with molecular static calculations. The thermally activated mechanism of dislocation glide in bridgmanite, the kink-pair nucleation, is assessed by coupling a continuous model to the fundamental properties of dislocations. These results allow to estimate the glide velocity of dislocations, with respect to pressure and temperature. The model is able to reproduce the yield stress measured in laboratory deformation experiments. The model is also able to estimate the level of stress needed to deform by dislocation glide at mantle conditions, and discuss their role in the Earth's lower mantle deformation.

Table des matières

Introduction	1
1 Généralités sur la bridgmanite	11
1.1 Domaine de stabilité	13
1.2 Structure	14
1.3 Propriété élastiques	17
2 Modélisation de la plasticité : Modèles et Méthodes	19
2.1 Modèle de glissement des dislocations	20
2.1.1 Friction de réseau	20
2.1.2 Glissement de dislocations thermiquement activé	21
2.1.3 Enthalpie de nucléation d'un double décrochement	23
2.1.4 Modèle IE basé sur une géométrie trapézoïdale	24
2.2 Modélisation atomistique : Techniques de calcul	26
2.2.1 Calculs atomistiques	26
2.2.2 Statique moléculaire	26
2.2.3 Recherche de chemin d'énergie minimal : la méthode nudged elastic band	31
2.3 Cellules de calcul	34
2.3.1 Cellule de type "slab"	37
2.3.2 Dipôle à deux dimensions	39
2.3.3 Dipôles à trois dimensions	39
2.4 Caractérisation des structures de dislocation	41
2.4.1 Déplacement différentiel	41
2.4.2 Structures de dislocations présentant un décrochement	43
3 Étude en pression des dislocations vis [100], [010] et [001]	45
3.1 Dislocation vis [100]	48
3.1.1 Structure à 30 GPa	48
3.1.2 Contrainte de Peierls	51

3.1.3	Effet de la pression	55
3.2	Dislocation vis $[010]$	58
3.2.1	Structure à 30 GPa	58
3.2.2	Contrainte de Peierls	61
3.2.3	Effet de la pression	62
3.3	Dislocation vis $[001]$	67
3.3.1	Dissociation	67
3.3.2	Caractérisation de la structure dans les plans (100) , (010) et (110)	69
3.3.3	Structures de la dislocation $[001]$ à différentes pressions	76
3.3.4	Contrainte critique de glissement dans le plan (010)	77
3.4	Discussion	80
3.4.1	Comparaison aux résultats du modèle PN	80
3.4.2	Dislocations coins $[100](010)$ et $[010](100)$	82
3.4.3	Équivalence des systèmes de glissement dans une perovskite cubique	84
3.4.4	Systèmes de glissement favorables dans la bridgmanite	87
4	Mobilité de la dislocation $[100]$ dans le plan (010) à 30 GPa par mécanisme de double décrochement	89
4.1	Potentiels de Peierls	90
4.1.1	Calcul NEB	90
4.1.2	Détermination du potentiel de Peierls	92
4.1.3	Potentiel de Peierls	99
4.1.4	Contrainte de Peierls	102
4.1.5	Analyse du potentiel de Peierls	103
4.2	Modélisation de doubles décrochements	107
4.2.1	Calcul de H_k	108
4.2.2	Structure des doubles décrochements	112
4.3	Enthalpies de nucléation critique de double décrochement	112
4.3.1	Paramétrage du modèle IE à $\tau = 0$ par les résultats atomistiques	113
4.3.2	Résultats du modèle à $\tau \geq 0$	114
4.4	Vitesse de dislocation	119

5	Glissement thermiquement activé [100](010) et [010](100) à 30 et 60 GPa	123
5.1	Résultats atomistiques	124
5.1.1	Dislocation vis [100] dans le plan (010)	124
5.1.2	Dislocation vis [010] dans le plan (100)	128
5.1.3	Conclusion des résultats atomistiques	132
5.2	Calcul de $\Delta H^*(\tau)$ à 60 GPa par le modèle IE	133
5.3	Modèle de double décrochements basé sur une interaction coulombienne élastique	134
5.3.1	Application du modèle CE	136
6	Discussion	139
6.1	Déformation de la bridgmanite par glissement des dislocations	140
6.1.1	De la mobilité des dislocations à la contrainte seuil de plasticité : modèle utilisé	140
6.1.2	Comportement mécanique aux conditions du laboratoire	142
6.1.3	Contraintes dans le manteau	146
6.2	Discussion du rôle de la diffusion atomique	149
6.2.1	Description des différents mécanismes de fluage intragranulaires	149
6.2.1.1	Fluage "Nabarro-Herring"	149
6.2.1.2	Fluage contrôlé par la montée des coins	150
6.2.2	Mécanismes de déformation de la bridgmanite	153
	Conclusions et perspectives	159
6.3	Rappel des principaux résultats	159
6.3.1	Systèmes de glissement dans la bridgmanite	159
6.3.2	Glissement thermiquement activé des dislocations [100] et [010]	160
6.3.3	Déformation de la bridgmanite par glissement des dislocations	161
6.3.4	Conclusions	162
6.4	Perspectives	163
	Bibliographie	184

Introduction

La Terre est une planète active. On estime la chaleur qu'elle dissipe à environ 44 TW. Cette chaleur est évacuée par le manteau terrestre, une couche de roches qui représente 80 % du volume terrestre et 65 % de sa masse. Le mécanisme par lequel la chaleur interne de la Terre s'évacue est la convection du manteau à l'état solide, contrôlée par la déformation des matériaux qui le composent. Parmi ces matériaux, la bridgmanite est majoritaire dans le manteau.

Pour le physicien des minéraux, ce phénomène pose la question suivante : comment les matériaux du manteau se déforment-ils dans les conditions physiques de pression, de température, et de vitesse de déformation de l'intérieur de la Terre ?

Structure radiale de l'intérieur du globe terrestre

L'intérieur de notre planète est encore inaccessible à l'exploration ou à l'observation directe. L'étude de la propagation des ondes sismiques est une source précieuse d'informations sur la structure interne de la Terre, et dans une moindre mesure sur sa dynamique. Dans le modèle PREM (pour Preliminary Reference Earth Model ; [Dziewonski & Anderson 1981], la compilation d'un nombre important d'événements sismiques permet d'aboutir à un modèle à symétrie radiale de la vitesse de propagation des ondes sismiques (figure 1). Ce modèle révèle les grandes structures de l'intérieur de la Terre (figure 1(a)). Le profil de vitesse des ondes sismiques est marqué par des discontinuités quasiment ubiquistes qui apparaissent à 410 et 670 km (et dans une moindre mesure à 520 km), ainsi qu'à 2890 et 5150 km de profondeur. Ces discontinuités définissent :

- La croûte terrestre. Son épaisseur varie selon les différents points du globe. La croûte océanique est plus fine, avec 5 à 7 km d'épaisseur. L'épaisseur de la croûte continentale peut atteindre 80 km.
- Le manteau supérieur, qui s'étend jusqu'à 410 km de profondeur.

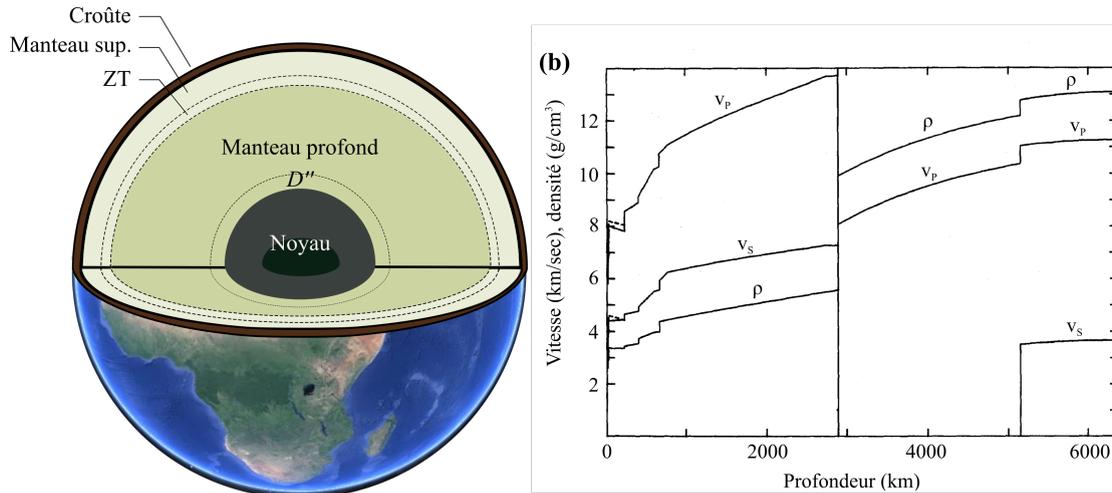


FIGURE 1 – Modèle radial de la Terre décrit à partir des variations de vitesses d’ondes sismiques et de densité. (a) Représentation de la structure interne (ZT pour zone de transition) (b) Profils de vitesses d’ondes sismiques obtenus dans le modèle PREM (image tirée de [Dziewonski & Anderson 1981]). V_s correspond à la vitesse d’onde de cisaillement, V_p à la vitesse d’onde de compression, et ρ est la densité.

- La zone de transition qui se situe entre 410 et 670 km.
- Le manteau inférieur, de 670 à 2890 km. À environ 200 km au dessus de la frontière manteau-noyau, des variations latérales de vitesse d’ondes de cisaillement sont observées [Wysession *et al.* 1999]. L’apparition de ces variations marque la couche D'' .
- De 2890 km au centre de la Terre s’étend le noyau terrestre. Sa frontière avec le manteau correspond à un saut de masse volumique important ($\Delta\rho = 4,5 \text{ g.cm}^{-3}$, [Dziewonski & Anderson 1981]). Le noyau est liquide dans sa partie externe (2885-5150 km), les ondes de cisaillement ne s’y propagent pas. L’intérieur, la graine, est solide.

Ce travail se concentre sur le manteau inférieur dont nous allons préciser quelques caractéristiques.

Conditions physiques du manteau inférieur

Les conditions de pression interne dans un modèle radial sont déterminées en considérant l’intérieur de la Terre en équilibre hydrostatique [Poirier 2000]. Dans le manteau inférieur, la pression augmente de 25 GPa en sa partie haute jusqu’à atteindre 135 GPa à la frontière noyau manteau (figure 2).

La température est moins bien connue que la pression, car elle ne peut pas être déduite de la vitesse de propagation des ondes sismiques qui y sont bien moins sensibles qu’à la pression. Les conditions de température sont connues à partir de points d’ancrages dans la structure terrestre

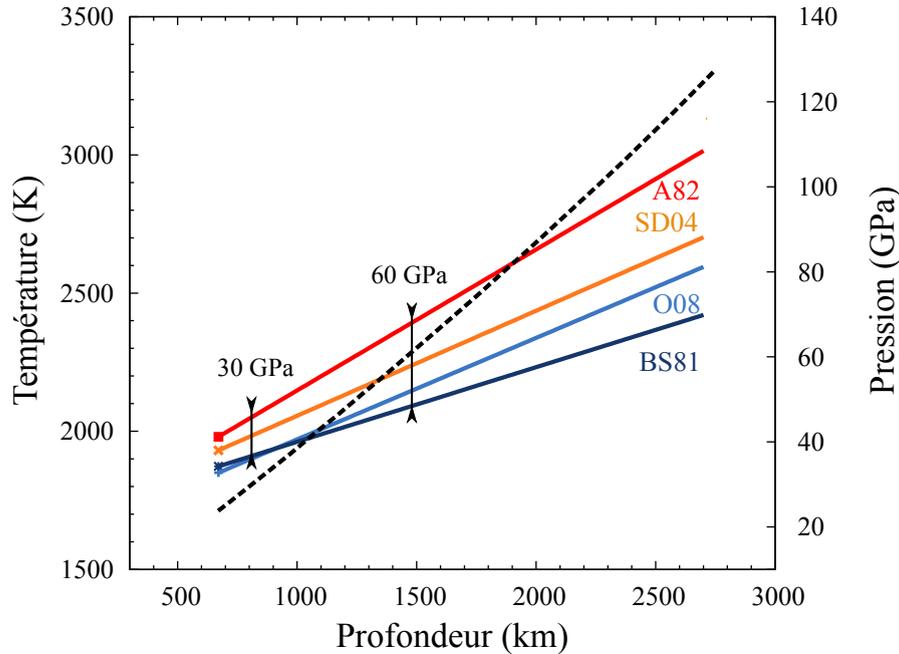


FIGURE 2 – Conditions de pression et de température à l’intérieur du manteau inférieur en fonction de la profondeur, et en ne considérant pas la couche D'' . Le profil de pression (trait pointillé, axe de droite) est obtenu à partir de [Dziewonski & Anderson 1981]. Les différents géothermes proviennent des travaux de [Anderson 1982] (A82), [Stacey & Davis 2004] (SD04), [Ono 2008] (O08) et [Brown & Shankland 1981] (BS81). À $P = 30$ GPa, les différents modèles prédisent une température comprise entre 1900 et 2050 K, à $P = 60$ GPa, $2050 < T$ (K) < 2400

interne. La discontinuité de 670 km, séparant la zone de transition du manteau inférieur est un point d’ancrage. Cette limite correspond à la transition de phase post-spinelle, qui à pression donnée permet d’estimer une température d’environ $T = 1900$ K (figure 2). Dans le manteau inférieur, le mécanisme de transfert de chaleur est la convection. À l’échelle de temps à laquelle le phénomène de convection a lieu, le manteau se comporte comme un fluide visqueux. Le gradient de température dans le manteau peut être assimilé à un gradient adiabatique, qui est connu à partir des propriétés thermoélastiques des matériaux du manteau terrestre. Ce gradient est estimé entre 0,3 et 0,5 K/km (figure 2).

Les domaines de pression et de température du manteau inférieur sont aujourd’hui accessibles expérimentalement. Les presses multi-enclumes permettent sur des charges expérimentales millimétriques, d’atteindre des gammes de pression correspondant à la partie la plus superficielle du manteau inférieur. Au delà, les cellules à enclumes de diamant (CED) peuvent être utilisées, au prix d’une réduction drastique des tailles d’échantillons. Ces expériences ont permis de préciser la nature minéralogique des assemblages représentatifs du manteau en fonction de la profondeur. En se basant sur un modèle pyrolitique [Ringwood 1975, Weidner & Ito 1987] dans lequel la composition moyenne du manteau inférieur correspondrait à celle du manteau

supérieur, le manteau inférieur est composé de trois phases : un silicate de structure perovskite appelé aujourd'hui bridgmanite ($(\text{Mg}_{(1-x-z)}, \text{Fe}_x, \text{Al}_z)(\text{Si}_{(1-y)}, \text{Al}_y)\text{O}_3$) à plus de 80 %, le ferropericlasé ($(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$), et une perovskite calcique CaSiO_3 (figure 3). Il a été découvert récemment qu'au voisinage de la frontière noyau-manteau ($P > 125$ GPa), la bridgmanite n'est plus stable et se transforme en une nouvelle phase appelée provisoirement post-perovskite [Murakami *et al.* 2004, Tsuchiya *et al.* 2004, Oganov & Ono 2004] (figure 3).

La bridgmanite est le constituant principal du manteau inférieur. La connaissance de ses propriétés représente un premier ordre incontournable pour la compréhension de la Terre interne. Cette thèse y est consacrée.

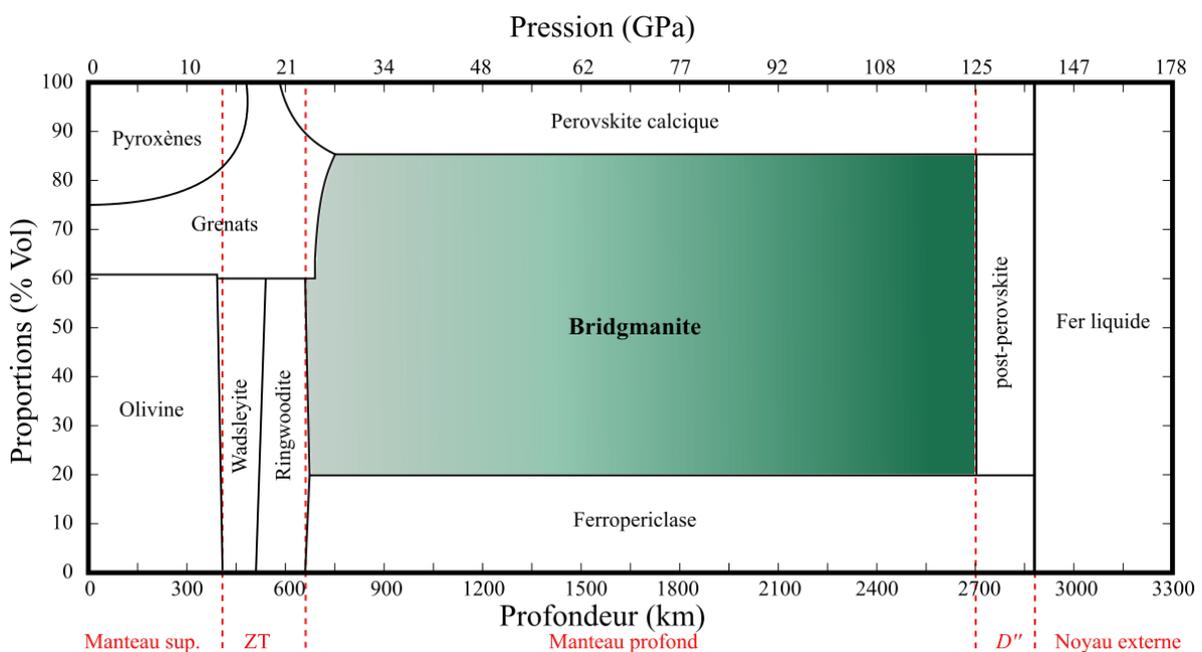


FIGURE 3 – Composition interne de la Terre dans un modèle pyrolitique, modifiée à partir de [Irfune 1993], basée sur le géotherme de [Brown & Shankland 1981]. La région colorée correspond à la bridgmanite.

Dynamique du manteau

Une étude fine de la propagation des ondes sismiques peut servir de marqueur de la dynamique terrestre. La tomographie sismique permet de reconstituer des modèles tridimensionnels décrivant les écarts de vitesse de propagation d'ondes sismiques par rapport au modèle moyen à symétrie sphérique. Un premier niveau d'interprétation consiste à corréliser les variations de vitesses aux températures. Les vitesses les plus élevées correspondraient à des zones plus froides, alors que les vitesses les plus lentes correspondraient à des zones plus chaudes. Cette description

prend sens dans le cadre d'un manteau convectif.

Au niveau des zones de subduction, on y voit des plaques lithosphériques denses et froides plongeant dans le manteau, matérialisant des mouvements convectifs descendants [Van der Hilst *et al.* 1997, Grand *et al.* 1997]. Ces mouvements convectifs sont particulièrement bien imagés et permettent d'observer la subduction de plaques à différents stades du processus [Fukao *et al.* 2001, Fukao *et al.* 2009, Fukao & Obayashi 2013]. À l'inverse, certaines zones chaudes peuvent être reliées à des mouvements de convection ascendants. L'ascension de panaches à travers le manteau est moins bien imagée que la subduction de plaques, mais certains panaches localisés sous les points chauds sont observés [Zhao 2004, Montelli *et al.* 2004, Suetsugu *et al.* 2009]. La source de certains panaches a récemment été localisée à la limite noyau-manteau dans les travaux de [French & Romanowicz 2015]. On observe que dans certaines régions, la propagation des ondes sismiques est anisotrope. Ce phénomène est également une source d'information sur la dynamique du manteau. En effet, les roches du manteau, bien que constituées de minéraux anisotropes de par leur structure cristalline, seraient à priori isotrope si l'orientation des grains était parfaitement aléatoire. L'anisotropie sismique pourrait donc résulter de l'orientation préférentielle des grains qui composent la roche dans lequel l'onde se propage [Montagner 1994, Mainprice 2007]. Une telle orientation préférentielle des grains peut être une signature des mécanismes de déformation. Par exemple, la déformation plastique impliquant le glissement de dislocation est un mécanisme très efficace pour générer une orientation préférentielle des grains, contrairement à d'autres mécanismes de fluage impliquant la diffusion. Des évidences d'anisotropie sismique ont été reportées dans le manteau supérieur, dans la zone de transition, ainsi qu'à la base du manteau profond (entre la limite D'' et la limite noyau-manteau). Le manteau profond est considéré majoritairement isotrope [Meade *et al.* 1995b, Panning & Romanowicz 2006], avec une faible anisotropie à sa base [de Wit & Trampert 2015].

Afin de comprendre la dynamique de notre planète, des modèles géodynamiques dont la convection est l'ingrédient principal ont été développés [van der Hilst 1999, Kellogg *et al.* 1999, Steinberger & Calderwood 2006]. Ces modèles sont, autant que faire se peut, basés sur les paramètres physiques du manteau et paramétrés par les observables géophysiques disponibles. Parmi les paramètres des modèles géodynamiques, la déformation du manteau est intégrée par un simple paramètre de viscosité, dont la connaissance représente un enjeu important à l'heure actuelle.

L'observation de l'évolution au cours du temps des grands reliefs et des grandes structures de la surface de la Terre permet de contraindre la viscosité interne. L'exemple le

plus connu est l'estimation de la viscosité du manteau supérieur à 10^{21} s^{-1} proposée dans les travaux de [Haskell 1935] à partir de la cinétique de remontée du bouclier scandinave suite à la déglaciation du Pléistocène. Cette estimation reste valide à l'heure actuelle. Le profil de viscosité du manteau a été depuis exploré par des modèles d'inversion basés sur plusieurs observables. À l'observation du rebond postglaciaire s'ajoute désormais l'étude du géoïde et des vitesses d'ondes sismiques obtenues par tomographie [Hager & Richards 1989, Ricard & Wuming 1991, Forte & Mitrova 1996, Steinberger & Calderwood 2001, McNamara *et al.* 2003, Mitrova & Forte 2004, Lawrence & Wysession 2006]. Le profil de viscosité obtenu dans ces travaux se situe autour de 10^{21} s^{-1} dans le manteau supérieur, et de 10^{22} s^{-1} dans le manteau inférieur.

La minéralogie du manteau terrestre étant connue dans ses grandes lignes, une approche radicalement différente de la viscosité peut être proposée à partir de l'étude de la déformation des roches du manteau et de leurs principaux minéraux constitutifs. Les développements de la physique des hautes pressions permettent désormais d'étudier la déformation du manteau terrestre en laboratoire, et d'ouvrir une fenêtre sur les mécanismes physiques ayant un rôle important dans la déformation du manteau.

Déformation expérimentale de la bridgmanite

Le domaine de stabilité de la bridgmanite en fait un matériau difficile à étudier. D'autres matériaux de structure perovskite sont stables à pression et température ambiante, ce qui les rend plus accessibles expérimentalement. La recherche de mécanismes de déformation systématiques dans ces analogues structuraux a constitué une voie importante vers la compréhension de la déformation de la bridgmanite. Il existe de nombreux travaux de déformation et d'observation de microstructure d'analogues allant dans ce sens : [Poirier *et al.* 1983, Doukhan & Doukhan 1986, Beauchesne & Poirier 1989, Beauchesne & Poirier 1990, Karato & Li 1992, Wright *et al.* 1992, Wang *et al.* 1992, Meisheng *et al.* 1992, Wang *et al.* 1993, Karato *et al.* 1995, Li *et al.* 1996, Mao & Knowles 1996, Besson *et al.* 1996, Wang *et al.* 1999].

La déformation des analogues est contrôlée pour une grande partie d'entre eux par la mobilité des dislocations. L'étude de leur déformation a permis de mettre en avant des systèmes de glissement communs à certains analogues, dont l'activation peut dépendre de la température. Cependant, les mécanismes de déformation peuvent varier d'un analogue à l'autre, car les matériaux de structure perovskite ne constituent pas une classe isomécanique.

La première expérience de déformation plastique de bridgmanite a été réalisée par micro-indentation sur un échantillon de bridgmanite MgSiO_3 synthétisé en presse multi enclumes, puis rapporté à température et pression ambiante [Karato *et al.* 1990]. Dans ces conditions, les duretés Vickers obtenues sont environ deux fois plus importantes que les duretés obtenues pour des minéraux du manteau supérieur tels que l'enstatite et l'olivine. Par ailleurs, les tests de micro-indentation révèlent une dureté anisotrope, ce qui dans les analogues s'explique par l'anisotropie des systèmes de glissement. Dans la même année, les travaux pionniers de [Meade & Jeanloz 1990] ont exploité le caractère fortement non-hydrostatique des premières expériences en CED pour estimer le niveau de contrainte soutenable par la bridgmanite. La résistance mécanique d'un polycristal de composition $(\text{Mg}_{0,88}\text{Fe}_{0,12})\text{SiO}_3$ à température ambiante a ainsi été estimée dans une CED à $25 < P \text{ (GPa)} < 60$, à partir du gradient de pression mesuré dans l'échantillon.

Par la suite, la diffraction à rayon X a été utilisée lors d'expériences de déformation afin de mesurer *in situ* les niveaux de contrainte supportés par l'échantillon au cours de la déformation, ou encore pour obtenir des informations sur la texture résultant de la déformation du matériau. Cette méthode a d'abord été appliquée en presses multi-enclumes, dans lesquelles les conditions de températures sont bien maîtrisées, ainsi que les conditions de contrainte appliquées à l'échantillon (contrainte isostatique ou déviatorique). Dans les travaux de [Weidner *et al.* 2001] et [Chen *et al.* 2002], un échantillon de bridgmanite est déformé sous une pression de 20 GPa, et une température allant jusqu'à 1023 K. Les auteurs y montrent que les niveaux de contrainte supportés par la bridgmanite sont bien supérieurs aux niveaux de contrainte supportés par les autres minéraux du manteau terrestre, tels que l'olivine, la ringwoodite, la wadsleyite, et le ferropériclase.

Les travaux de [Cordier *et al.* 2004] mettent en évidence la présence de dislocations dans des échantillons de bridgmanite déformés en presse multi-enclume à une température de 1773 K, qui sont caractérisées à partir de l'élargissement anisotrope des pics de diffraction. La présence de dislocations [100] et [010] est ainsi indirectement mise en évidence. Des bandes de déformation sont aussi observées en microscopie optique, témoignant de l'activité de systèmes de glissement durant la phase de déformation. Ces résultats seront complétés par une étude de [Miyajima *et al.* 2009] dans laquelle des dislocations [110] sont directement observées dans des échantillons de bridgmanite déformée, par microscopie électronique en transmission.

La déformation de bridgmanite en CED a été elle aussi réalisée en estimant les niveaux de contraintes par diffraction à rayon X *in situ*. Si les pressions atteignables sont plus importantes que celles des presses multi-enclume, le chauffage de l'échantillon est réalisé par chauffage laser, technique qui entraîne d'importants gradients de température dans l'échantillon. Les niveaux

de contrainte supportés par des échantillons de bridgmanite ($\text{Mg}_{0,9}\text{Fe}_{0,1}\text{SiO}_3$) sont estimés dans les travaux de [Merkel *et al.* 2003]. Dans [Wenk *et al.* 2004], un faible développement de texture est observé pendant la déformation de bridgmanite, révélateur de déformation par glissement de dislocation. Des textures sont aussi obtenues dans les travaux de [Miyagi 2009], dans lesquels les échantillons sont déformés à des pressions atteignant 55 GPa, et chauffés par intermittence à des températures atteignant 1100 K.

Enfin, la dernière avancée majeure dans la déformation de la bridgmanite a lieu en même temps que cette thèse. Dans les travaux de [Girard *et al.* 2016], la déformation d'un échantillon de bridgmanite et de ferropericlas est réalisée dans une presse rotative Drickamer à des conditions atteignant $T = 2100$ K, et $P = 27$ GPa. Pour la première fois, un échantillon est déformé dans les conditions de pression et de température réelles du manteau inférieur.

Étude proposée dans cette thèse

Les expériences de déformation de bridgmanite menées en laboratoire indiquent la présence et l'activité de dislocations [Cordier *et al.* 2004, Wenk *et al.* 2004, Miyajima *et al.* 2009]. Le lien entre la déformation d'un matériau polycristallin, et la mobilité des dislocations à l'échelle atomique nécessite une description à plusieurs échelles (Figure 4) :

1. La structure des dislocations contrôle leur mobilité car elle détermine la friction de réseau du cristal, c'est à dire la résistance que le cristal oppose au glissement des dislocations.
2. Le déplacement d'une dislocation est facilité par la température. La dislocation surmonte la friction de réseau par un mécanisme thermiquement activé. Les caractéristiques de ce mécanisme déterminent la dépendance de la vitesse des dislocations à la température.
3. La déformation d'un monocristal dépend de la population de dislocations, de leurs vitesses individuelles et de leurs interactions lors de la déformation.
4. Enfin, la déformation d'un matériau polycristallin dépend de la capacité de chaque grain à se déformer selon son orientation et la contrainte appliquée, mais aussi des interactions entre les différents grains qui composent la matériau.

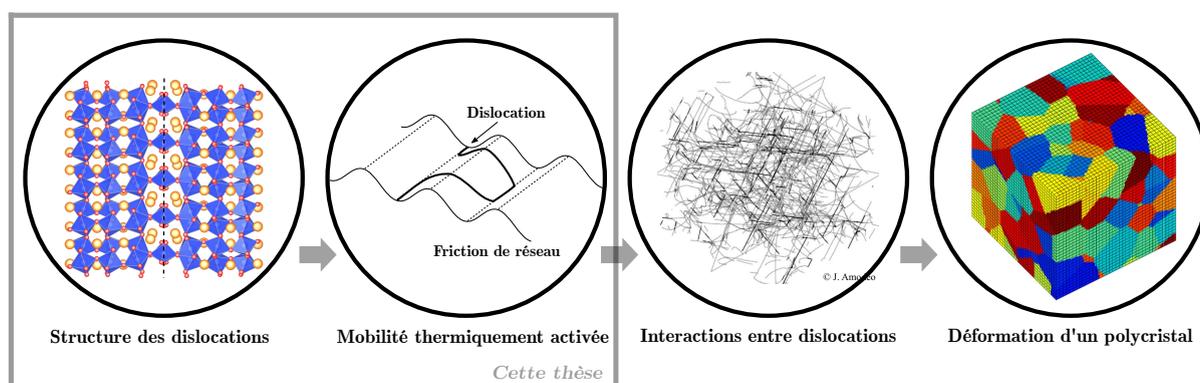


FIGURE 4 – Représentation multi-échelle de la déformation d'un matériau par glissement des dislocations.

Les différents systèmes de glissement dans la bridgmanite ont été modélisés numériquement par [Ferré *et al.* 2007], par la méthode Peierls Nabarro. Cette méthode indirecte reconstruit les structures de dislocations en équilibrant les forces dues aux interactions élastiques et les forces dues aux déplacements inélastiques des atomes au cœur de la dislocation [Joós & Duesbery 1997]. D'après [Ferré *et al.* 2007], les dislocations $[100]$ dans le plan (010) et $[010]$ dans (100) (dislocations observées dans la bridgmanite par [Cordier *et al.* 2004]) sont les systèmes de glissement les plus favorables. Cependant, l'effet de la température sur l'activation des différents systèmes de glissement n'est pas déterminé à ce stade.

Les résultats expérimentaux commencent à être obtenus à des conditions de pression et de température correspondant à la partie supérieure du manteau inférieur. Cependant, les vitesses de déformation accessibles lors d'expériences en laboratoire, de l'ordre de $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, sont dix ordres de grandeur supérieures aux vitesses de déformation dans le manteau. Est-ce que les températures élevées du manteau, couplées aux vitesses de déformation extrêmement lentes ($\dot{\epsilon} = 10^{-16} \text{ s}^{-1}$ [Carter 1976, Pfiffner & Ramsay 1982]), font du glissement des dislocations un mécanisme de déformation efficace de la bridgmanite dans le manteau terrestre ?

Nous proposons de décrire le glissement des dislocations dans la bridgmanite par modélisation des dislocations à l'échelle atomique. Cette étude permettra de caractériser pour la première fois de façon directe la structure des dislocations, structure qui détermine leur mobilité. Nous proposerons, grâce à ces méthodes, une ré-évaluation de la friction de réseau pour les dislocations d'intérêt (Figure 4, échelle 1). Puis, nous déterminerons le mécanisme de glissement thermiquement activé des dislocations (Figure 4, échelle 2). Cette approche permet de modéliser la contribution du glissement des dislocations à la déformation de la bridgmanite en s'affranchissant des difficultés rencontrées expérimentalement. Nous proposons une évaluation de la limite d'élasticité en prenant en compte la vitesse de déformation ce qui permettra de se placer aussi bien dans les conditions du laboratoire que celles du manteau terrestre.

Le plan de cette étude est le suivant. Les deux premiers chapitres présentent les caractéristiques de la bridgmanite, ainsi que les modèles et méthodes utilisés dans cette thèse. La structure des dislocations à l'échelle atomique (étape 1 figure 4) est modélisée dans le chapitre 3. Outre l'établissement des systèmes de glissement préférentiels de la bridgmanite, ce chapitre décrit l'effet de la pression sur les structures de dislocation, et en première approximation, sur leur mobilité. Les chapitres 4 et 5 traitent de la mobilité thermiquement activée des dislocations dans la bridgmanite (étape 2 figure 4). En particulier, l'étude des systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ y est réalisée, afin d'aboutir au glissement thermiquement activé de deux dislocations à 30 et 60 GPa. Ces résultats et leurs implications sont discutés chapitre 7. Les résultats sont comparés aux données expérimentales, et leurs implications sur la plasticité de la bridgmanite aux conditions du manteau terrestre y sont discutées.

Chapitre 1

Généralités sur la bridgmanite

Ce chapitre présente les propriétés de la bridgmanite décrites dans la littérature, utilisées par la suite lors de cette thèse. Le domaine de stabilité, la structure et les propriétés élastiques du matériau y sont présentés.

Aux pressions du manteau inférieur, les silicates présents dans les conditions du manteau supérieur se décomposent pour former des structures plus compactes telles que la structure perovskite [Ringwood 1962]. Cette tendance peut être illustrée à partir du diagramme de phase de MgSiO_3 (figure 1.1). La structure pyroxène, stable dans les conditions du manteau supérieur donne lieu à différentes structures dans les conditions de la zone de transition qui toutes se transforment aux pressions du manteau inférieur en un silicate de structure perovskite [Fei *et al.* 1990].

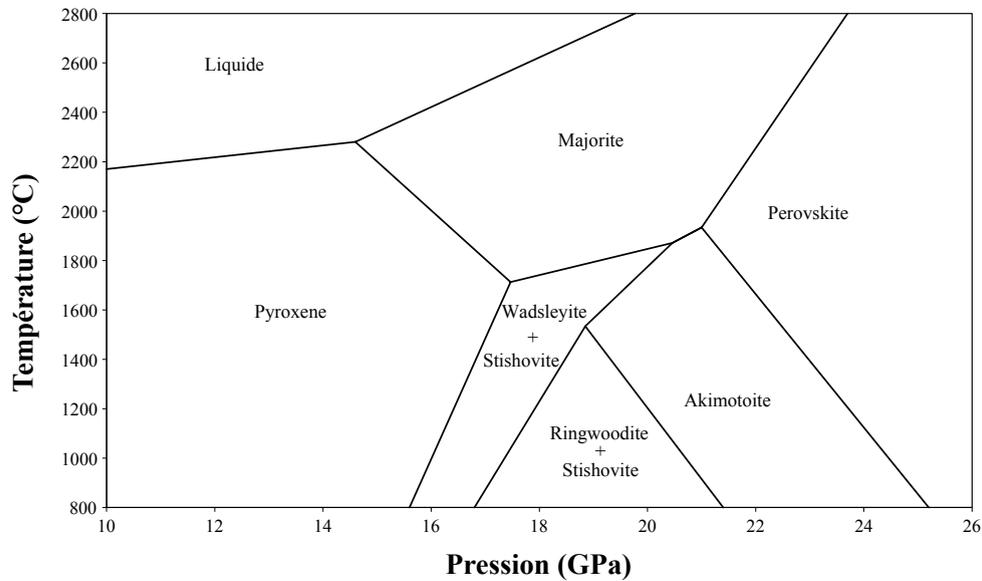


FIGURE 1.1 – Diagramme de phase de MgSiO_3 . La perovskite MgSiO_3 est la phase stable au-delà de 25 GPa.

Cette tendance n'est pas une spécificité de la composition MgSiO_3 . La présence d'une phase de structure perovskite dans les conditions du manteau inférieur a été démontrée en amenant des grenats silicatés à haute pression et température ($P \sim 30$ GPa, $T \sim 1073$ K), et en observant la formation de perovskite MgSiO_3 de structure orthorhombique [Liu 1974, Liu 1976]. On l'observe également dans le diagramme de phase de Mg_2SiO_4 [Fei *et al.* 1990]. De nombreux travaux confirment la stabilité de la perovskite MgSiO_3 dans les conditions du manteau inférieur [Knittle & Jeanloz 1987, Ringwood 1991, Stixrude & Cohen 1993, Shim *et al.* 2001, Stixrude & Lithgow-Bertelloni 2012]. En 2014, de la perovskite MgSiO_3 est pour la première fois trouvée à l'état naturel, dans une météorite choquée [Tschauner *et al.* 2014]. Le matériau est nommé bridgmanite, en référence à Percy Williams Bridgman, physicien américain ayant contribué à développer la physique des hautes pressions.

Dans le manteau terrestre, la bridgmanite contient des impuretés, tels que le fer ou l'aluminium ($\text{Mg}_{(1-x-z)}\text{Fe}_x\text{Al}_z(\text{Si}_{(1-y)}\text{Al}_y)\text{O}_3$). Ces impuretés ont une influence sur la structure et

les propriétés de la bridgmanite (e. g. [Knittle & Jeanloz 1987, Kudoh *et al.* 1990]), mais leur répartition est mal connue et varie aux différents endroits du manteau [Garnero & Jeanloz 2000, Badro 2003, Frost *et al.* 2004]. Dans cette thèse nous nous limiterons à l'étude de la bridgmanite de composition MgSiO_3 . Le terme bridgmanite sera généralement employé pour faire référence à un silicate de structure perovskite et de composition MgSiO_3 .

1.1 Domaine de stabilité

D'après les modèles géophysiques décrits dans l'introduction, la bridgmanite est stable pour des pressions comprises entre 24 et 125 GPa, et des températures comprises entre 1850 et 3000 K.

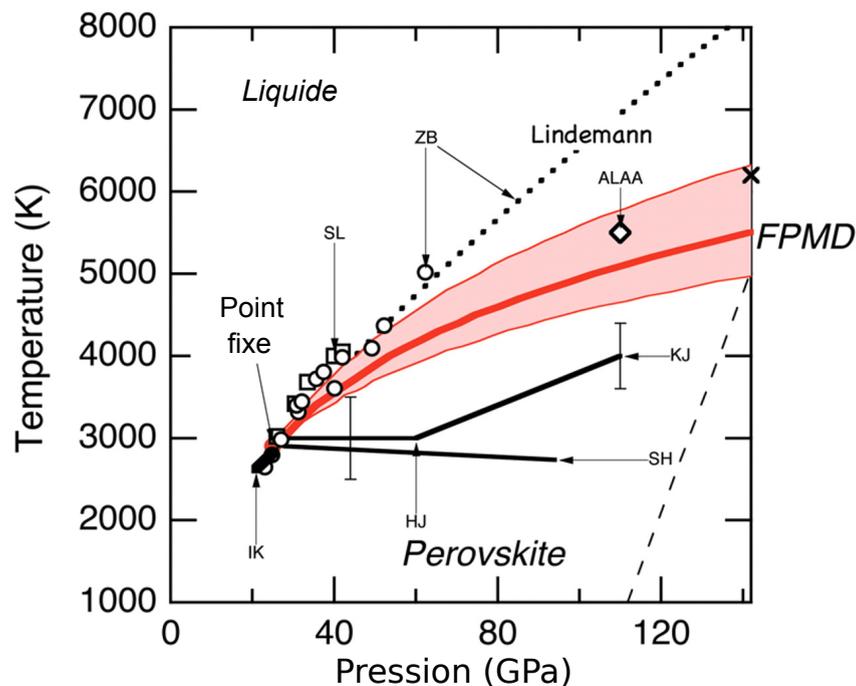


FIGURE 1.2 – Courbes de fusion de bridgmanite, figure issue de [Stixrude 2005]. La courbe rouge et la bande rouge correspondent aux valeurs calculés en dynamique moléculaire *ab initio* et leur incertitude [Stixrude 2005]. Ces résultats numériques sont comparés à des valeurs expérimentales de température de fusion de $(\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3$: HJ [Heinz & Jeanloz 1987], KJ [Knittle & Jeanloz 1989], IK [Ito & Katsura 1992], SH [Sweeney & Heinz 1993], ZB [Zerr & Boehler 1994], SL [Shen & Lazor 1995] et ALAA [Akins *et al.* 2004]. La droite en pointillé correspond à une extrapolation calculée dans [Zerr & Boehler 1994], la droite en tirets correspond à la transition perovskite/post-perovskite. La croix correspond au point triple bridgmanite/post-perovskite/liquide.

La figure 1.2 représente les températures de fusion de la bridgmanite, calculées par dynamique moléculaire *ab initio* [Stixrude 2005] et comparées à des températures de fusion déterminées expérimentalement. La température de fusion de la bridgmanite estimée est de $T_f \sim 2500$ K pour

$P = 25$ GPa, et $T_f \sim 5500$ K à $P = 120$ GPa. D'après ces calculs, et les température évaluées par les différents géothermes (figure 2 dans l'introduction), les températures de la bridgmanite évoluent de $T/T_f = 0,7$ dans la limite haute du manteau ($P = 25$ GPa), vers $T/T_f = 0,5$ dans sa limite basse (sommet de la couche D'' , $P = 125$ GPa).

1.2 Structure

La bridgmanite MgSiO_3 est un cristal de structure perovskite. La structure perovskite idéale ABX_3 est un cristal de structure cubique, composé d'ions A et d'octaèdres BX_6 . Les ions A sont positionnés au centre d'un cube dont les sommets correspondent à l'emplacement des octaèdres AX_6 (exemple : titanate de strontium, figure 1.3(a)). Il existe d'autres perovskites qui ne correspondent pas à ce cas idéal cubique. Dans ces perovskites, les octaèdres BX_6 sont inclinés et légèrement distordus, et la structure n'est plus cubique (figure 1.3(b)). La bridgmanite est une

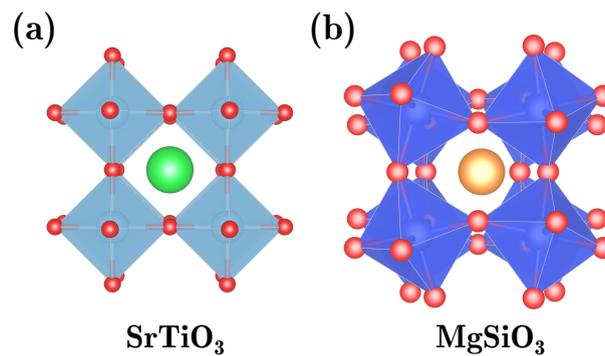


FIGURE 1.3 – Illustration de la distorsion des octaèdres entre deux perovskites, (a) de structure idéale (SrTiO_3 vert : Sr, bleu : Ti, rouge : O) (b) de structure distordue (MgSiO_3 jaune : Mg, bleu : Si, rouge : O).

perovskite distordue, de structure orthorhombique. Elle peut être décrite dans le groupe d'espace $Pbnm$, figure 1.4. Dans ce groupe d'espace, le paramètre de maille selon l'axe cristallographique $[001]$ est le plus long, viennent ensuite ceux selon les axes $[010]$ et $[001]$, de longueurs très proches (\AA $P = 30$ GPa, $a = 4,65$ \AA , $b = 4,80$ \AA et $c = 6,70$ \AA [Fiquet *et al.* 1998]).

Comme on peut le voir sur la figure 1.5, l'axe $[001]_o$ d'une maille de bridgmanite (o pour orthorhombique) équivaut dans un perovskite cubique (c pour cubique) au double de l'axe $[001]_c$. Toujours sur la figure 1.5, on observe que les axes $[100]_o$ et $[010]_o$, différents dans la bridgmanite, équivalent aux axes $\langle 110 \rangle_c$ dans la structure cubique.

L'écart de la bridgmanite, perovskite orthorhombique, à une structure cubique, peut être évalué en suivant la rotation des octaèdres SiO_6 . La figure 1.6 représente l'angle de rotation des axes

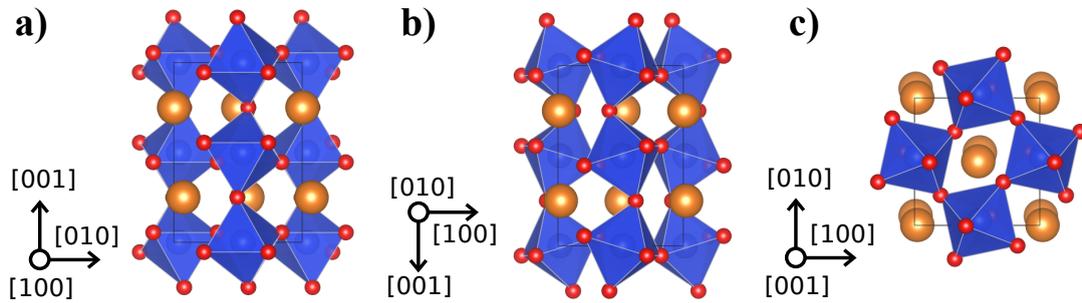


FIGURE 1.4 – Cellule élémentaire de Bridgmanite MgSiO_3 décrite dans un groupe d'espace $Pbnm$, vue selon les différents axes cristallographiques : (a) $[100]$ (b) $[010]$ (c) $[001]$. Les atomes de Mg sont représentés en jaune, les Si en bleu, et les oxygènes en rouge.

$[110]_c$, $[001]_c$ et $[111]_c$ dans différentes perovskites. Dans le cas de la bridgmanite, la rotation des octaèdres augmente avec la pression.

Les paramètres de maille et le volume de la bridgmanite ont été évalués expérimentalement [Knittle *et al.* 1986, Knittle & Jeanloz 1987, Ross & Hazen 1989, Ross & Hazen 1990, Belonoshko 1994, Funamori *et al.* 1996, Fiquet *et al.* 1998, Saxena *et al.* 1999, Fiquet *et al.* 2000] et numériquement [Wolf & Bukowinski 1985, Matsui *et al.* 1987, Stixrude & Cohen 1993, Wentzcovitch *et al.* 1993, Wentzcovitch *et al.* 1995,

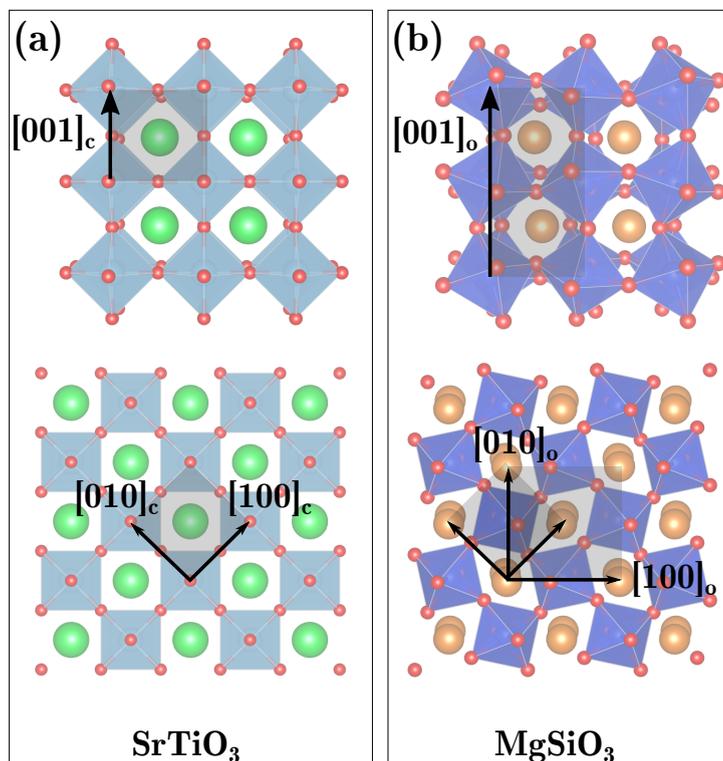


FIGURE 1.5 – Représentation (a) d'une perovskite idéale et des axes cristallographiques cubiques, SrTiO_3 , (b) d'une perovskite orthorhombique, MgSiO_3 , et des axes cristallographiques orthorhombiques.

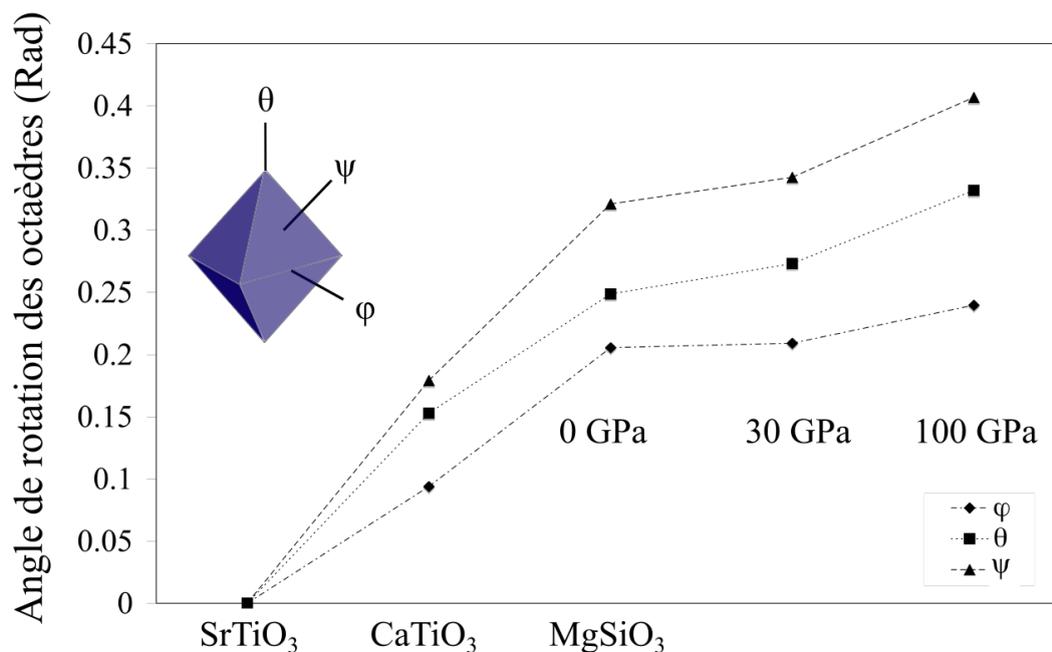


FIGURE 1.6 – Angles de rotation des octaèdres à 0 K autour des axes cubiques $[110]_c$ (ϕ), $[001]_c$ (θ), et $[111]_c$ (ψ) dans les perovskites SrTiO_3 , CaTiO_3 , et MgSiO_3 (à 0, 30 et 100 GPa).

da Silva *et al.* 2000, Karki *et al.* 2000, Oganov *et al.* 2001, Wentzcovitch *et al.* 2004, Stixrude 2005]. À $T = 0$ K et $P = 30$ GPa, le volume d'une maille élémentaire est d'environ 150 \AA^3 . Cette valeur décroît jusqu'à 130 \AA^3 à $P = 125$ GPa (figure 1.7). On observe aussi figure 1.7 que le volume d'une maille élémentaire est plus sensible à la pression qu'à la température. En outre, à mesure que la pression augmente, on observe une baisse de la dépendance en température du volume d'une maille élémentaire.

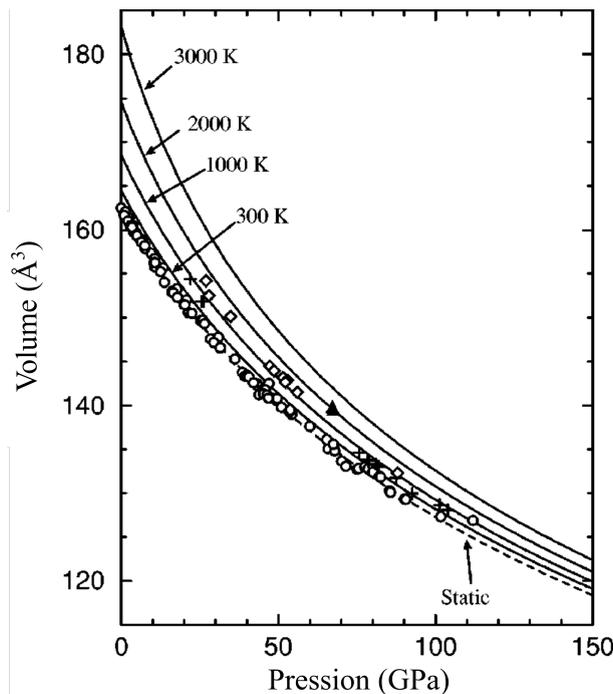


FIGURE 1.7 – Équation d'état de bridgmanite MgSiO_3 déterminée par calcul *ab initio* (figure issue de [Karki *et al.* 2000]). Les points correspondent aux valeurs obtenues expérimentalement (voir [Karki *et al.* 2000] pour les références).

1.3 Propriété élastiques

La bridgmanite étant de structure orthorhombique, le tenseur des constantes élastiques C_{ij} en notation matricielle de Voigt est :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

Ce tenseur est défini par neuf constantes indépendantes. Les constantes élastiques de la bridgmanite ont été étudiées dans différents travaux expérimentaux [Yeganeh-Haeri *et al.* 1989, Anderson 1998, Yeganeh-Haeri 1994] et numériques, [Cohen 1987, Matsui *et al.* 1987, Wentzcovitch *et al.* 1995, Karki *et al.* 1997, Wentzcovitch *et al.* 1998, Oganov *et al.* 2001, Wentzcovitch *et al.* 2004]. La figure 1.8 correspond aux valeurs des paramètres C_{ij} déterminées à différentes pressions et températures par

calculs de dynamique moléculaire *ab initio*. Là encore, l'influence de la pression sur la valeur des constantes élastiques est plus importante que l'influence de la température, en particulier sur les termes non diagonaux.

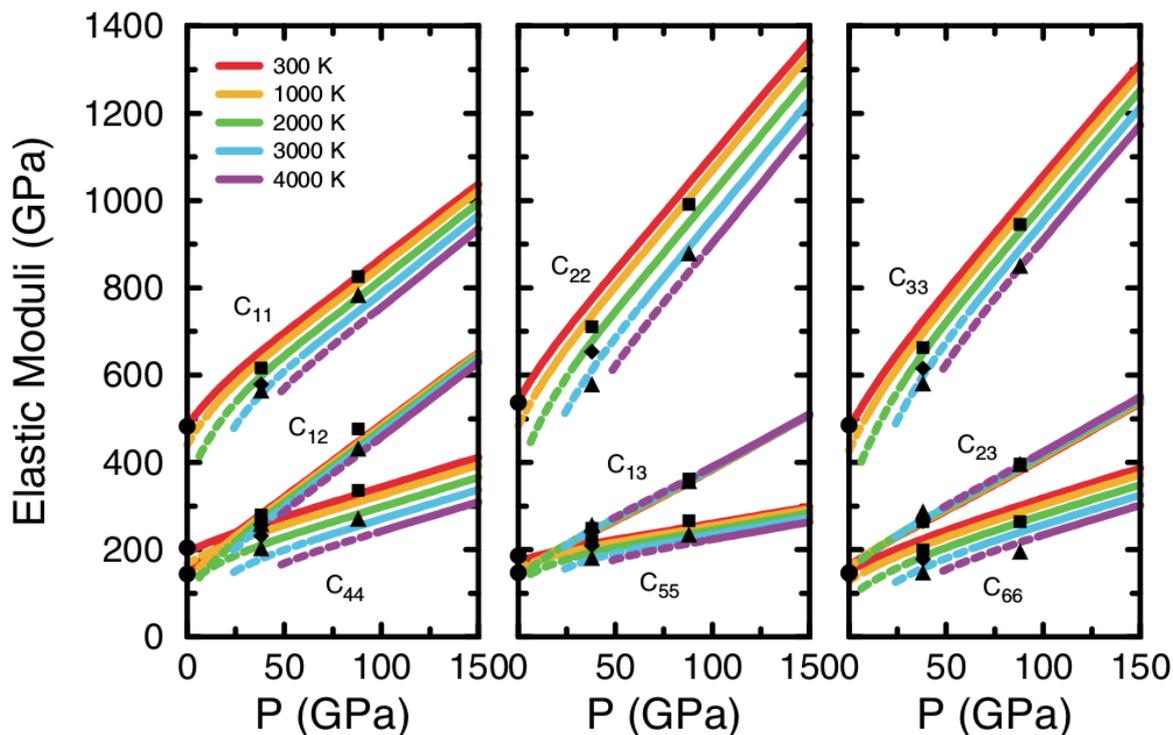


FIGURE 1.8 – Constantes élastiques C_{ij} en fonction de la température et de la pression, issues de l'article [Wentzcovitch *et al.* 2004]. Les symboles pleins correspondent aux mesures expérimentales, [Yeganeh-Haeri 1994] pour les cercles, [Oganov *et al.* 2001] pour les symboles restants à 38 et 88 GPa (carrés : 1500 K, diamants : 2500 K, triangles : 3500 K).

Chapitre 2

Modélisation de la plasticité : Modèles et Méthodes

Cette partie introduit les outils employés pour modéliser la plasticité de la bridgmanite dans cette thèse. Le modèle de glissement des dislocations y est premièrement décrit. La friction de réseau est la résistance que le cristal oppose au glissement des dislocations. Le glissement d'une dislocation dépend de l'intensité de la friction de réseau, mais aussi du mécanisme thermiquement activé utilisé pour surmonter la friction de réseau, la nucléation de double décrochement. Le modèle de description des doubles décrochements est discuté.

Le modèle de glissement nécessite la connaissance des propriétés des dislocations dans la bridgmanite. Ces propriétés seront obtenues par modélisation atomistique. Les techniques de modélisation sont présentées, et leur application à l'étude des dislocations.

Enfin, les outils d'analyse de structure des dislocations sont définis. Ces outils permettent de caractériser les structures de dislocations dans les calcul atomistiques réalisés.

2.1.2 Glissement de dislocations thermiquement activé

Sous l'action des fluctuations thermiques, des boucles peuvent se former le long de la ligne de dislocation, par nucléation d'un double décrochement. Un double décrochement est constitué de deux portions de ligne de dislocations, de signes opposés, se projetant hors d'une vallée de Peierls (Fig 2.2(a)). Les doubles décrochements sont instables car ils s'annihilent par attraction mutuelle. Cependant, sous l'effet d'une contrainte, un double-décrochement peut atteindre une taille critique au delà de laquelle le travail de la contrainte est supérieur à l'énergie d'attraction des deux décrochements (Fig 2.2(b)). Au delà de cette configuration critique, les deux décrochements s'écartent sous l'effet de la contrainte appliquée, et la dislocation a finalement glissée [Philibert 1979]. Ce mécanisme peut permettre à la dislocation de glisser à des contraintes bien inférieures à la contrainte de Peierls.

À une pression donnée, l'enthalpie libre d'un double décrochement $\Delta G = \Delta H(\tau, x_1, x_2 \dots x_n) - T\Delta S$ est une fonction de la contrainte appliquée, de la température du système, et des variables

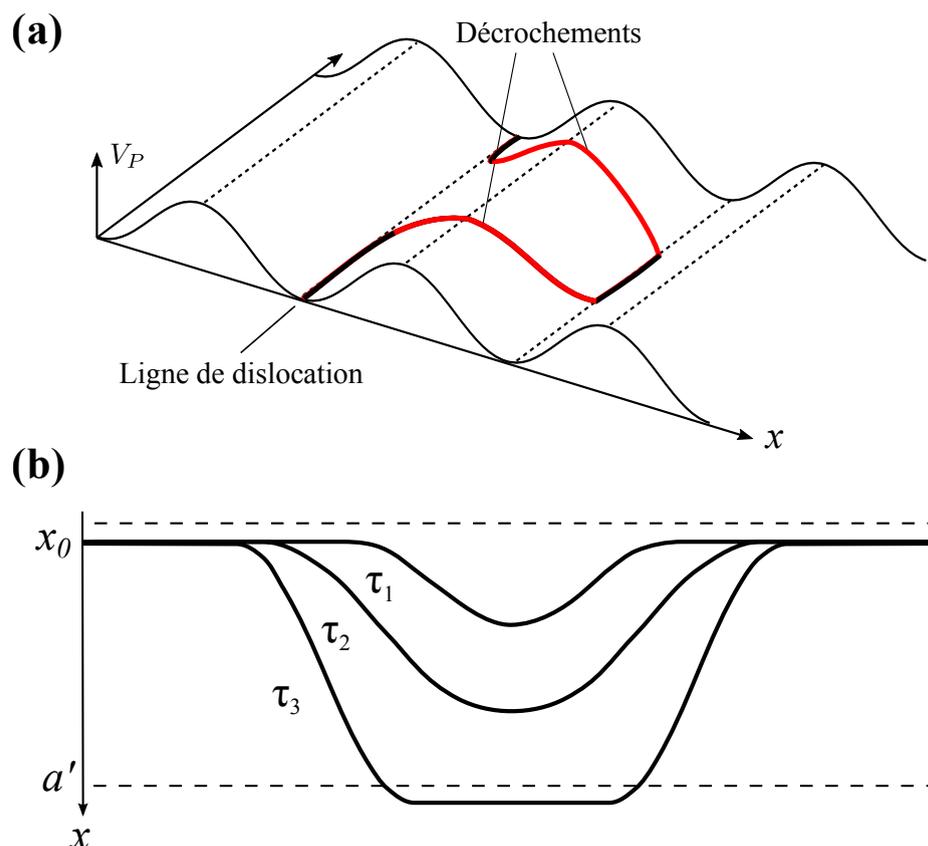


FIGURE 2.2 – (a) Représentation d'un double décrochement au delà du potentiel de Peierls. Chaque décrochement est représenté en rouge. (b) Représentation de trois configurations critiques de double décrochement, correspondant à des contraintes τ_1 , τ_2 et τ_3 , avec $\tau_1 > \tau_2 > \tau_3$. Les tirets correspondent aux vallées de Peierls.

décrivant la géométrie du double décrochement $(x_1 \dots x_n)$. La variation du module de cisaillement avec la température est considérée comme le terme principal de ΔS [Caillard & Martin 2003, Schoeck 1965], qui peut être négligé [Cagnon 1979]. Pour une contrainte τ donnée, l'augmentation de la taille du double décrochement se traduit initialement par une augmentation de son enthalpie $\Delta H(\tau, x_1, x_2 \dots x_n)$. Au delà d'une taille critique, le travail de la contrainte dépasse l'énergie nécessaire à la formation du double décrochement, la croissance du double-décrochement devient énergétiquement favorable ce qui se traduit par la décroissance de $\Delta H(\tau, x_1, x_2 \dots x_n)$ avec l'augmentation de la taille de double décrochement [Caillard & Martin 2003]. L'enthalpie de configuration critique peut être déterminée en minimisant l'enthalpie de nucléation selon les variables géométriques du double décrochement, elle est notée $\Delta H^*(\tau, x_1^*, x_2^* \dots x_n^*)$, ou plus simplement $\Delta H^*(\tau)$. La probabilité p qu'a un double décrochement de nucléer est donnée par une loi de type Boltzman :

$$p = \exp\left(-\frac{\Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (2.2)$$

Pour une dislocation de longueur L , la fréquence d'essai de nucléation de doubles décrochements ν_d se déduit en multipliant la probabilité p par une fréquence de vibration de la ligne de dislocation, et un nombre de sites de nucléations par longueur de ligne L [Guyot & Dorn 1967] :

$$\nu_d = \frac{\nu_D b L}{d \cdot 2d} \exp\left(-\frac{\Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (2.3)$$

La fréquence de vibration de la dislocation correspond à $\nu_D b/d$, ν_D étant la fréquence de Debye. d est la largeur moyenne d'un double décrochement, $L/2d$ correspond donc à une longueur d'onde de nucléation de double décrochement.

Lorsque le double décrochement est nucléé, la prochaine étape pour aboutir à la propagation de la dislocation est la migration des décrochements. La migration des décrochements correspond à l'expansion latérale du double décrochement (écartement de chaque décrochement, figure 2.2(a)). La migration des décrochements dépend de la friction de réseau secondaire et de son interaction avec le décrochement voisin. L'énergie de migration est faible devant l'énergie de nucléation d'un double décrochement pour une majorité de matériaux, à l'exception des matériaux à liaisons covalentes [Kubin 2013].

Dans le cas d'une énergie de migration inférieure à l'énergie de nucléation d'un double décrochement, le temps requis pour nucléer un double décrochement est largement supérieur au temps requis pour l'expansion du double décrochement [Caillard & Martin 2003]. Dans un tel régime, la nucléation est le processus limitant la progression de la dislocation, la vitesse de dislocation

est donnée par :

$$v = a' \nu_d = a' \frac{\nu_D b}{d} \frac{L}{2d} \exp\left(-\frac{\Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \quad (2.4)$$

Dans cette formulation de la vitesse de nucléation d'une dislocation, la probabilité de nucléation d'un double décrochement à l'opposé de la contrainte est considérée négligeable et n'est pas prise en compte.

2.1.3 Enthalpie de nucléation d'un double décrochement

L'enthalpie d'un double décrochement peut se décomposer en trois contributions :

$$\Delta H = \Delta W_P - \Delta W_\tau + \Delta E_{elas} \quad (2.5)$$

Le terme ΔW_P représente le surplus d'énergie engendré par le franchissement du potentiel de Peierls. Le terme ΔW_τ correspond au travail de la contrainte. Le terme ΔE_{elas} correspond à l'énergie élastique de la dislocation. Différents modèles proposent une description de ΔH . Leur principale différence repose sur le calcul de l'énergie élastique ΔE_{elas} .

- Le modèle de tension de ligne [Celli *et al.* 1963, Seeger 1984] et le modèle de [Dorn & Rajnak 1964] permettent de décrire l'enthalpie de nucléation de doubles décrochements dans un régime haute contrainte, où la faible taille du double-décrochement permet de considérer que la variation d'interaction élastique entre les différentes parties du double décrochement est négligeable devant la variation d'énergie de ligne [Caillard & Martin 2003].
- Si à basse contrainte la taille d'un double-décrochement critique est suffisamment importante ($w \gg l$), son énergie peut être estimée par le calcul de l'interaction entre décrochements à longue portée [Seeger & Schiller 1962, Hirth & Lothe 1982].
- En 1993, 1994, Koizumi et collaborateurs proposent une description de l'enthalpie des doubles décrochements qui permet d'unifier les différents régimes de contrainte, basé sur le calcul des interactions élastiques (IE) entre les différentes parties qui composent le double décrochement [Koizumi *et al.* 1993, Koizumi *et al.* 1994, Suzuki *et al.* 1995]. Ce modèle requiert de faire une hypothèse sur la géométrie des doubles décrochements afin de les décomposer en plusieurs portions de lignes droites [Hirth & Lothe 1982]. Le premier modèle fait l'hypothèse de doubles décrochements rectangulaires [Koizumi *et al.* 1993]. Le second modèle fait l'hypothèse de doubles décrochements de forme trapézoïdale

[Koizumi *et al.* 1994], qui permet de mieux s'approcher de la structure des doubles décrochements. Les configurations de double décrochements critiques obtenues ainsi sont en bon accord avec les configurations obtenues dans un modèle de tension de ligne [Koizumi *et al.* 1994].

Le but de cette thèse étant d'étudier la plasticité d'un matériau soumis à des températures élevées, nous avons choisi de privilégier les modèles capable de reproduire un régime basse contrainte.

2.1.4 Modèle IE basé sur une géométrie trapézoïdale

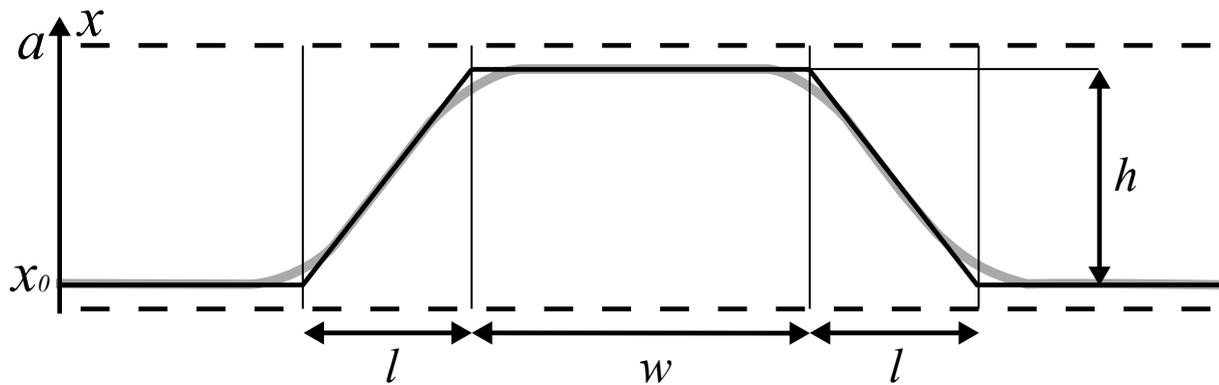


FIGURE 2.3 – Double décrochement dans le modèle trapézoïdal de [Koizumi *et al.* 1994]. Le trait gris correspond à une géométrie de double-décrochement réaliste, les lignes en pointillé correspondent aux vallées de Peierls.

La description du double décrochement sous forme trapézoïdale nécessite trois paramètres w , l et h (figure 2.3). Le premier terme de l'expression (2.5), ΔW_P , est le surplus énergétique relatif au chevauchement du potentiel de Peierls par la dislocation :

$$\Delta W_P = 2 \frac{\sqrt{l^2 + h^2}}{h} \int_{x_0}^{x_0+h} V_P(x) dx + w[V_P(x_0 + h) - V_P(x_0)] - 2lV_P(x_0) \quad (2.6)$$

x_0 correspond à la position d'équilibre de la dislocation à une contrainte τ (expression 2.1). Le second terme de l'équation 2.5 correspond au travail de la contrainte :

$$\Delta W_\tau = \tau b h (l + w). \quad (2.7)$$

Le troisième terme, ΔE_{elas} , est l'énergie élastique de la dislocation. L'énergie peut être séparée en deux contributions, une énergie d'interaction entre les divers segments de la dislocation ΔE_{int} , et la somme des énergies intrinsèques de chaque dislocation ΔE_{self} . Ces énergies, décrites pour des

segments droits, sont calculées à partir des formulations des énergies intrinsèques et d'Interaction dans [Hirth & Lothe 1982], chapitre 6. Elles ont pour expression :

$$\Delta E_{self} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \times \left[2 \frac{l^2 + h^2/(1-v)}{\sqrt{l^2 + h^2}} \ln\left(\frac{\sqrt{l^2 + h^2}}{e\rho}\right) + w \ln\left(\frac{w}{w+2l}\right) - 2l \ln\left(\frac{2l+w}{e\rho}\right) \right] \quad (2.8)$$

et

$$\begin{aligned} \Delta E_{int} = & \frac{\mu b^2}{2\pi} \times \left[\sqrt{h^2 + (l+w)^2} - \sqrt{l^2 + h^2} - w + (w+2l) \ln\left(\frac{2(w+2l)}{\sqrt{h^2 + (l+w)^2} + l+w}\right) \right. \\ & \left. + l \ln\left(\frac{\sqrt{h^2 + (l+w)^2} + l+w}{\sqrt{l^2 + h^2} + l}\right) \right] \\ & + \frac{\mu b^2}{4\pi} \times \frac{1}{l\sqrt{l^2 + h^2}} (l^2 + h^2/(1-v)) \times \left[w \ln\left(\frac{\sqrt{h^2 + (l+w)^2} + \sqrt{l^2 + h^2}}{\sqrt{h^2 + (l+w)^2} - \sqrt{l^2 + h^2}}\right) \right. \\ & \left. + 2(w+l) \ln(\sqrt{l^2 + h^2}(l+w) + l\sqrt{h^2 + (l+w)^2}) - 2(w+l) \ln((\sqrt{l^2 + h^2} + l)) \right. \\ & \left. - 2(w+l) \ln(\sqrt{l^2 + h^2} + \sqrt{h^2 + (l+w)^2}) \right] \end{aligned} \quad (2.9)$$

μ est le module de cisaillement, ν le coefficient de Poisson et ρ un paramètre contrôlant l'énergie intrinsèque des segments de dislocations. La finalité du modèle IE trapézoïdal est la description de l'enthalpie de nucléation d'une dislocation, et d'obtenir une loi de mobilité thermiquement activée de la dislocation (expression 2.4). Le modèle IE doit pour ce faire être lui même pourvu des caractéristiques de la dislocation, tel que ses plans de glissement préférentiels et la friction de réseau correspondante. Ces caractéristiques seront obtenues par calculs atomistiques, à l'aide des méthodes décrites dans la suite de ce chapitre.

2.2 Modélisation atomistique : Techniques de calcul

2.2.1 Calculs atomistiques

Les calculs atomistiques sont utilisés pour modéliser les dislocations dans la bridgmanite. La modélisation de dislocations impose des contraintes sur la taille des systèmes calculés. Le champ de contrainte généré par une dislocation a une décroissance en $1/r$, les dislocations interagissent donc avec leur environnement à longue portée. De ce fait, la modélisation de dislocations requiert des cellules de calcul constituées d'un nombre important de mailles cristallines. Une maille élémentaire de bridgmanite comporte 20 atomes, la limite du nombre d'atomes qui peuvent être modélisés par méthode *ab initio* (environ 250 atomes selon les ressources numériques standards actuelles) est vite dépassée. Les calculs de statique moléculaire constituent quant à eux une bonne option, dès lors qu'un potentiel inter-atomique est disponible. La statique moléculaire n'est applicable à la problématique de cette thèse que si les interactions entre atomes peuvent être représentés par un potentiel inter-atomique reproduisant fidèlement la structure, les propriétés élastiques, ainsi que les déplacements inélastiques ayant lieu dans le cœur des dislocations. Cette partie décrit le principe des calculs de statique moléculaire, ainsi que le potentiel inter-atomique sur lequel se baseront l'ensemble des calculs.

2.2.2 Statique moléculaire

Calcul de l'énergie du système

Dans un système constitué de N atomes, l'énergie totale E est égale à la somme des énergies de chaque particule, et la somme des énergies d'interactions entre chaque particule.

$$E = \sum_{i=1}^N U_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U_{ij} + \frac{1}{6} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N U_{ijk} + \dots \quad (2.10)$$

Dans cette équation, le premier terme correspond aux énergies potentielles des atomes, le second terme correspond aux interactions entre couples d'atomes, le troisième terme aux interactions à trois corps, etc. Pour modéliser la bridgmanite, les interactions entre ions peuvent être décrites uniquement par un potentiel d'interaction à deux corps, la prise en compte d'interactions à 3 corps n'amenant pas de réelle amélioration [Chen *et al.* 2012]. Pour deux ions i et j , séparés

d'une distance R_{ij} , le potentiel U_{ij} se présente sous la forme :

$$U_{ij}(R_{ij}) = \frac{q_i q_j}{R_{ij}} + b_{ij} \exp\left(-\frac{R_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{c_{ij}}{R_{ij}^6} \quad (2.11)$$

Ce potentiel est composé de trois termes qui correspondent à différentes interactions physiques [Price *et al.* 1989]. Le premier terme représente l'interaction coulombienne entre atomes de charges nettes q_i et q_j , il s'agit d'une interaction longue portée. Les seconds et troisièmes termes correspondent au potentiel de Buckingham, qui reproduit des interactions à courte portée. Le second terme est une interaction forte répulsive, introduite par [Gilbert 1968], de paramètres ρ_{ij} et b_{ij} , et le troisième terme représente l'attraction de van der Waals, de paramètre c_{ij} .

Il existe différents choix possibles pour les paramètres du potentiel (2.11) [Oganov *et al.* 2000, Alfredsson *et al.* 2005, Chen *et al.* 2007]. La paramétrisation choisie dans cette thèse est celle proposée par [Oganov *et al.* 2000], les valeurs des différents paramètres sont résumées table 2.1. Cette paramétrisation considère des charges ioniques partielles, qui ne correspondent pas aux charges réelles.

i-j	q_i	b_{ij}	ρ_{ij}	c_{ij}
Mg-O	1,9104	1041,435	0,2866	0,00
Si-O	2,9043	1137,028	0,2827	0,00
O-O	-1,6049	2023,8	0,2674	13,83

TABLE 2.1 – Paramétrisation du potentiel inter-atomique utilisée par [Oganov *et al.* 2000].

La convergence de la somme de l'expression (2.10) est assurée par deux paramètres : le rayon de coupure du potentiel et le critère de somme d'Ewald. Le rayon de coupure r_c correspond à la portée maximale choisie pour le potentiel de Buckingham. Pour un rayon d'interaction compris entre 0 et r_c , l'énergie E est calculée dans l'espace direct. Au delà, l'interaction est due à la partie coulombienne, sa portée est infinie et sa décroissance est lente. Au delà de r_c , la somme est calculée dans l'espace réciproque au moyen d'une somme d'Ewald nécessitant un critère de convergence [Ewald 1921, Nijboer & De Wette 1957, Karasawa & Goddard 1989, in 't Veld *et al.* 2007]. Dans les calculs réalisés dans cette thèse, la valeur choisie pour le rayon de coupure est 16 \AA , et la valeur du critère de convergence de la somme d'Ewald est de 10^{-9} eV/\AA .

Recherche d'état d'énergie minimal

Le but d'un calcul de statique moléculaire est de minimiser l'énergie E du système (expression (2.10)) pour atteindre l'état fondamental. Le minimum d'énergie s'obtient en optimisant les coordonnées atomiques de manière à annuler les forces entre atomes, ces dernières correspondant aux dérivées du potentiel d'interaction (Equ. 2.11). Ce calcul, réalisé à volume fixé, est appelé calcul de relaxation. L'algorithme de minimisation de force utilisé est un algorithme de gradient conjugué [Lewis & van de Geijn 1993]. L'annulation totale des forces n'est jamais atteinte, le calcul est considéré convergé lorsque les forces entre atomes sont inférieures à un critère de force maximal. Les calculs menés dans cette thèse utilisent un critère de force maximale par atome de 10^{-9} eV/Å⁻¹. Les calculs de statique moléculaire sont utilisés dans ce travail pour obtenir les structures de cœur de dislocations stables. Du fait de l'utilisation d'une interaction coulombienne à longue portée dans le potentiel inter-atomique, les calculs de relaxation réalisés dans cette thèse requièrent un temps CPU important. À titre de comparaison, un calcul réalisé à l'aide de potentiels de type EAM, généralement utilisés dans la modélisation de métaux [Ercolessi & Adams 1994], permettent des calculs environ 100 fois plus rapides que les calculs réalisés dans cette thèse. Les capacités de calcul disponibles lors de cette thèse ont permis la recherche d'état d'énergie minimal de cellules de calcul contenant en moyenne 100 000 atomes en moins d'une journée. Les cellules de calcul les plus importantes, de l'ordre du million d'atome, peuvent être modélisées en augmentant la parallélisation du calcul (jusqu'à 126 CPU) à l'aide de calculs nécessitant jusqu'à deux semaines.

Fiabilité du potentiel

La qualité des résultats de cette thèse dépend de la fiabilité du potentiel inter-atomique et de sa paramétrisation. Leurs choix reposent sur la capacité du potentiel à reproduire les propriétés physiques de la bridgmanite.

Le potentiel (2.11), utilisé avec la paramétrisation table 2.1, est utilisé pour ses bonnes prédictions des propriétés thermodynamiques de la bridgmanite, à températures et pressions élevées [Oganov *et al.* 2000, Liu *et al.* 2007, Ito & Toriumi 2010, Chen *et al.* 2012]. Les paramètres structuraux et mécaniques sont la première observable. Ces paramètres ont été calculés à l'aide du potentiel (2.11), et comparés aux paramètres issus de calcul DFT utilisant deux approximations différentes (GGA [Ferré *et al.* 2007, Mainprice *et al.* 2008], et LDA [Wentzcovitch *et al.* 1998]). Les résultats, issus de l'article [Gouriet *et al.* 2014], sont réunis table 2.2. Les paramètres de

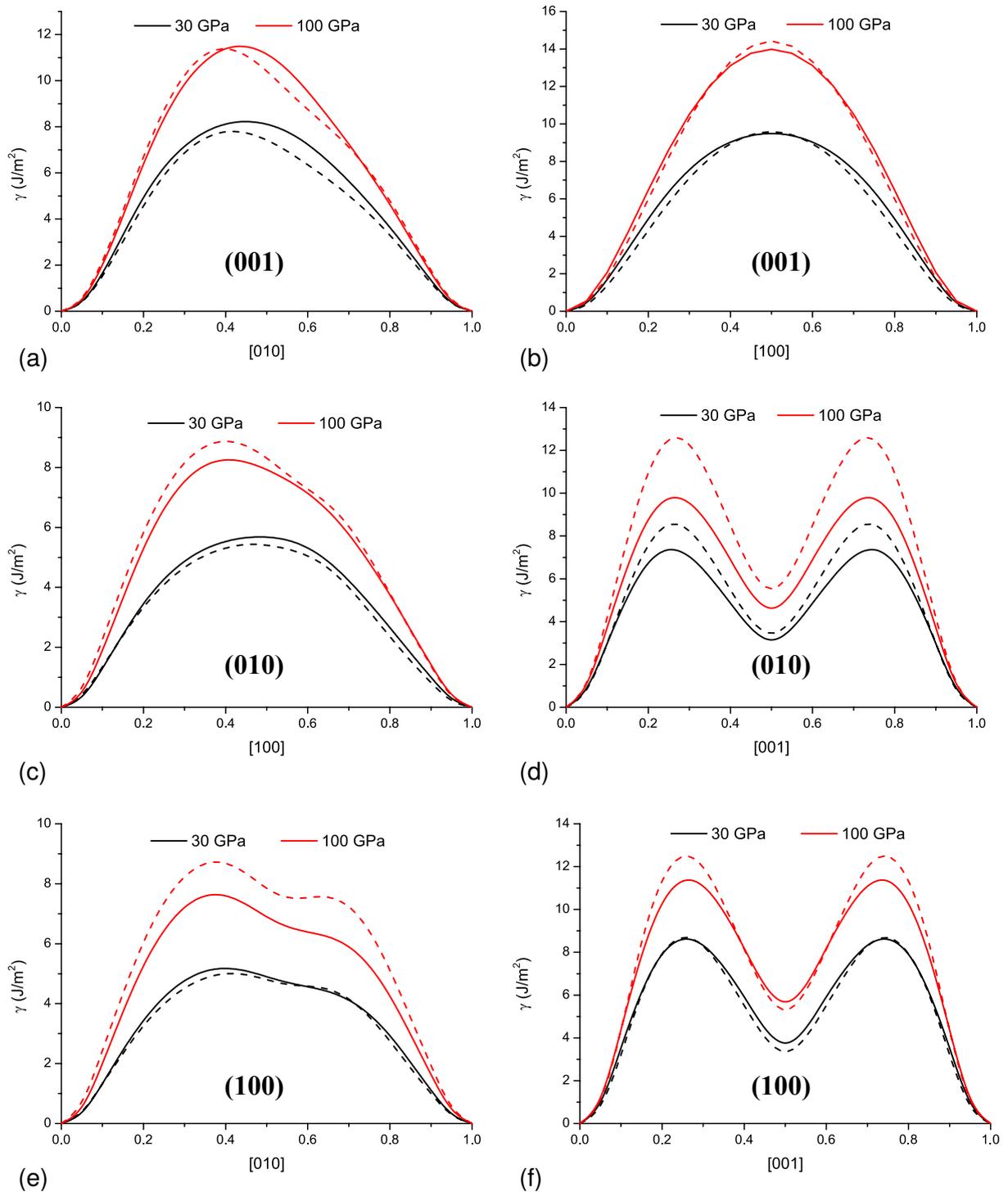


FIGURE 2.4 – Comparaison des résultats du potentiel (2.11) et des résultats DFT GGA pour une sélection de γ -énergies. Les γ -énergies sont calculées selon les axes (a) [010], (b) [100] dans (001), selon (c) [100] et (d) [001] dans (010), et enfin selon (e) [010] et (f) [001] dans (100).

Cette figure est issue de [Gouriet *et al.* 2014]

maille trouvés avec le potentiel sont en bon accord avec les paramètres calculés en DFT. Les constantes élastiques obtenues avec le potentiel sont relativement proches des valeurs calculées en DFT. L'écart est le plus marqué pour les valeurs de C_{33} et C_{66} qui sont plus basses que les valeurs DFT, et les valeurs de C_{13} et C_{23} qui sont plus importantes. Les modules de cisaillement élastiques et les coefficients de Poisson fournis table 2.2 sont calculés dans le cadre de la théorie de Stroh, en utilisant l'énergie élastique anisotrope de dislocations vis et coin [100], [010] et [001] [Douin *et al.* 1986].

La deuxième observable pertinente pour les calculs qui seront réalisés dans cette thèse est l'énergie de défaut d'empilement généralisé (*e.g.* [Gouriet *et al.* 2014]). Le cœur d'une dislocation correspond à une distribution de désaccords atomiques par rapport à la structure parfaite. Ces désaccords atomiques sont généralement suffisamment important pour sortir du cadre de l'hypothèse harmonique. Les défauts d'empilement généralisés permettent de faire correspondre un désaccord unidirectionnel à une quantité d'énergie, et donc de reconstruire les structures de dislocations (par exemple, la méthode Peierls Nabarro (PN) [Vitek 1968, Joós *et al.* 1994]). Les défauts d'empilement généralisés dans la brigmanite sont représentés figure 2.4, réalisés en cisailant selon l'axe [100] dans les plans (001) et (010) ; selon [010] dans les plans (001) et (100) ; et enfin selon [001] dans les plans (100) et (010). Ces défauts d'empilement ont été calculés à partir du potentiel et de la paramétrisation décrite ci-dessus, mais aussi à partir de calculs *ab*

Pressure (GPa)	30	60	100	140
a_0 (Å)	4.65 (4.64) ^a	4.54	4.43 (4.37) ^a	4.34
b_0 (Å)	4.76 (4.82) ^a	4.66	4.57 (4.62) ^a	4.49
c_0 (Å)	6.72 (6.71) ^a	6.56	6.40 (6.37) ^a	6.28
C_{11} (GPa)	620 (592) ^a (632) ^b	713 (753) ^b	818 (850) ^a (926) ^b	908
C_{22} (GPa)	655 (672) ^a (735) ^b	771 (922) ^b	910 (1064) ^a (1160) ^b	1039
C_{33} (GPa)	560 (617) ^a (653) ^b	688 (835) ^b	839 (997) ^a (1056) ^b	976
C_{44} (GPa)	211 (235) ^a (250) ^b	237 (300) ^b	266 (334) ^a (360) ^b	291
C_{55} (GPa)	215 (205) ^a (204) ^b	233 (234) ^b	252 (253) ^a (265) ^b	266
C_{66} (GPa)	150 (192) ^a (212) ^b	183 (268) ^b	218 (306) ^a (330) ^b	250
C_{12} (GPa)	235 (214) ^a (225) ^b	343 (320) ^b	484 (450) ^a (460) ^b	622
C_{13} (GPa)	289 (197) ^a (209) ^b	369 (278) ^b	478 (382) ^a (380) ^b	587
C_{23} (GPa)	285 (216) ^a (233) ^b	376 (306) ^b	486 (367) ^a (406) ^b	597
$\mu_{[100]}$ (GPa)	179 (197) ^a	206.34	234 (279) ^a	257
$\mu_{[010]}$ (GPa)	177 (212) ^a	208.17	247 (319) ^a	269
$\mu_{[001]}$ (GPa)	212	229	252	270
$\nu_{[100]}$	0.27	0.25	0.23	0.19
$\nu_{[010]}$	0.29	0.28	0.25	0.21

TABLE 2.2 – Constantes élastiques à température nulle, modules de cisaillement élastiques calculés selon les axes [100], [010] et [001] et coefficients de Poisson selon les axes [100] et [010]. Les valeurs sont calculées à l'aide du potentiel (2.11), et comparées (a) aux calculs DFT GGA [Ferré *et al.* 2007, Mainprice *et al.* 2008], (b) aux calculs DFT LDA [Wentzcovitch *et al.* 1998].

initio. Les défauts d'empilement calculés à partir des deux méthodes sont en bon accord. On peut donc s'attendre à ce que l'écart à la structure cristalline engendré par la présence d'une dislocation soit correctement décrit par le potentiel inter-atomique.

D'autres paramétrisations du potentiel ionique existent. Notamment la paramétrisation de [Alfredsson *et al.* 2005], qui utilise des charges partielles tel que $q_{Mg} = -q_O = \frac{1}{2}q_{Si}$. On peut noter que l'usage de cette paramétrisation [Alfredsson *et al.* 2005] donne des résultats similaires à la paramétrisation de [Oganov *et al.* 2000] employée ici.

2.2.3 Recherche de chemin d'énergie minimal : la méthode nudged elastic band

La méthode NEB, pour nudged elastic band [Jónsson *et al.* 1998], est utilisée ici pour déterminer le potentiel de Peierls de dislocations. Cette méthode, initialement introduite pour le calcul de barrière de migration d'événements simples, tel que la migration de défauts ponctuels, a été appliquée récemment à la recherche de potentiel de Peierls dans des métaux (Métaux de transition [Gröger *et al.* 2008, Weinberger *et al.* 2013, Dezerald *et al.* 2014], Aluminium [Rodney & Proville 2009], Zirconium [Chaari *et al.* 2014]), ou encore des matériaux covalents (Silicium [Pizzagalli *et al.* 2008a]).

Principe de la nudged elastic band

La méthode NEB vise à déterminer la chaîne d'état transitoires, et leur énergie, qu'emprunte un système entre deux états d'équilibre (figure 2.5). Cette méthode opère à partir de N configurations du système, nommées répliques, constituées de deux configurations d'équilibre et de N-2 états transitoires approximatifs (généralement interpolés à partir des configurations d'équilibre). Le but du calcul NEB est de minimiser l'énergie des N-2 configurations transitoires, tout en les maintenant hors équilibre.

Chaque réplique i correspond à un ensemble de positions atomiques R_i . Une chaîne de N répliques est notée $[R_0, R_1, R_2, \dots, R_N]$. La direction tangente à la chaîne de répliques est définie tel que :

$$\vec{\tau}_i = \frac{\vec{R}_i - \vec{R}_{i-1}}{|\vec{R}_i - \vec{R}_{i-1}|} + \frac{\vec{R}_{i+1} - \vec{R}_i}{|\vec{R}_{i+1} - \vec{R}_i|} \quad (2.12)$$

La tangente est une moyenne des répliques précédentes et suivantes. La méthode utilise par la suite le vecteur normalisé $\hat{\tau}_i = \tau_i/|\tau_i|$. La force agissant sur chaque réplique est dérivée du

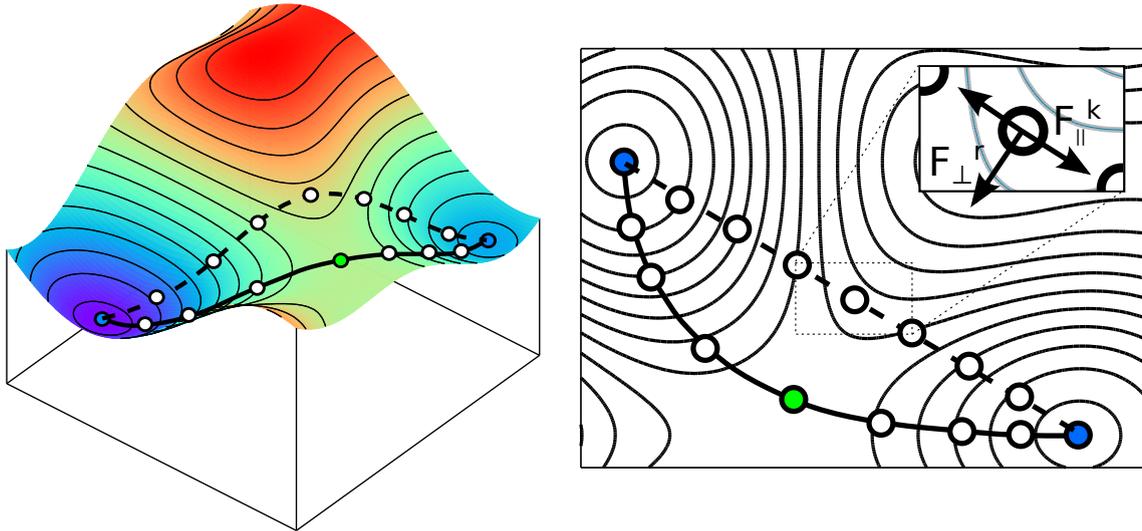


FIGURE 2.5 – Surface d'énergie potentielle attribuée à un événement dans l'espace des configurations. Les courbes pleines et en pointillé représentent des chemins d'énergie, la courbe pleine est le MEP. Le chemin d'énergie en pointillé correspond à une interpolation linéaire entre les configurations initiales et finales. Les cercles le long des chemins d'énergie correspondent à des configurations transitoires. Les cercles pleins bleus sont les configurations d'équilibre stable du système, le point vert est un point d'équilibre instable ou point col du MEP. **Figure de gauche** : Représentation de la surface d'énergie dans l'espace des configurations **Figure de droite** : Projection de la surface d'énergie. Dans un calcul NEB, le chemin d'énergie du premier pas de calcul correspond au chemin représenté en pointillé. Par minimisation des forces F_{\perp}^r et F_{\parallel}^k , le calcul converge vers le MEP.

potentiel interatomique V , tel que $F_i = -\nabla V(\vec{R}_i)$. Dans la méthode NEB, seule la composante de cette force orthogonale à la chaîne de configuration est appliquée aux répliques :

$$\vec{F}_i|_{\perp} = -\nabla V(\vec{R}_i)|_{\perp} = -(\nabla V(\vec{R}_i) - \nabla V(\vec{R}_i) \cdot \hat{\tau}_i) \quad (2.13)$$

Une force dite de ressort est appliquée le long de la chaîne de répliques, afin de les maintenir artificiellement en équilibre. Les "ressorts" ont une constante de raideur k , leur force correspond à :

$$\vec{F}_i^S = k(|\vec{R}_{i+1} - \vec{R}_i| - |\vec{R}_i - \vec{R}_{i-1}|) \cdot \hat{\tau}_i \quad (2.14)$$

La force totale appliquée à chaque réplique lors d'un calcul NEB s'écrit donc :

$$\vec{F}_i = \vec{F}_i^S - \nabla V(\vec{R}_i)|_{\perp} \quad (2.15)$$

Le calcul NEB est une minimisation des forces \vec{F}_i de chaque réplique (figure 2.5). Le calcul NEB est considéré convergé lorsque la force \vec{F}_i la plus élevée parmi les N répliques passe en dessous d'un critère de force fixé au début du calcul. Une fois le calcul NEB convergé, les énergies

obtenues pour la chaîne d'états de transition correspondent au MEP pour "minimum energy path".

Paramètres de calcul NEB utilisées lors de cette thèse

L'algorithme de Nudged Elastic Band implémenté dans LAMMPS est utilisé dans cette thèse pour établir le MEP qu'emprunte une dislocation lorsqu'elle glisse. La méthode NEB doit être paramétrée pour s'adapter au problème. Les paramètres à ajuster pour réaliser le calcul sont l'algorithme de minimisation (quickmin, fire [Sheppard *et al.* 2008]), le critère de convergence du calcul et la constante des forces de raideur entre répliques.

Les forces le long du MEP (Eq. (2.15)) sont minimisées par un algorithme de dynamique amorti nécessitant un pas de temps dt [Jónsson *et al.* 1998, Sheppard *et al.* 2008]. Avec l'algorithme "quickmin", la valeur $dt = 10^{-4}$ ps est optimale pour les calculs réalisés. Le calcul de minimisation est considéré convergé lorsque les normes des forces par répliques \vec{F}_i sont toutes inférieures à une valeur de 0,01 eV/Å.

Les forces de ressorts $\vec{F}_{\|(i\pm 1)\rightarrow i}^k$ reliant les différentes répliques ont été paramétrées avec une constante de raideur de 0.1 eV/Å.

Enfin, la précision du calcul NEB peut être améliorée grâce à deux procédures. La première appelée "Improved tangent estimate" [Henkelman & Jónsson 2000] permet d'éviter le blocage d'une réplique isolée dans un minimum local. La seconde procédure est la méthode de "Climbing image" [Henkelman *et al.* 2000]. Lorsque le calcul est convergé, le calcul entre dans une seconde phase de recherche de point col pour la réplique de plus haute énergie. Ces deux procédures sont implémentées dans le code LAMMPS [Plimpton 1995].

2.3 Cellules de calcul

Les dislocations vis sont modélisées dans des cristaux de bridgmanite de dimension finie, tel que représenté figure 2.6(a). Les atomes de cette cellule de départ sont déplacés selon le champ de déplacement élastique isotrope d'une dislocation vis. Le résultat sur un plan atomique est illustré figure 2.6(b). La minimisation de l'énergie du système permet ensuite de trouver la structure de dislocation, en particulier proche du cœur de dislocation, là où les déplacements atomiques sont inélastiques.

Dans cette thèse, les dislocations sont systématiquement orientées selon la convention suivante : la ligne de dislocation est selon l'axe z et le plan de glissement est normal à l'axe y . Le vecteur de Burgers \vec{b} de la dislocation est orienté selon l'axe z . La normale au plan de glissement est notée \vec{n} , et est donc orientée selon l'axe y . Enfin, la direction de glissement de la dislocation, \vec{a} , est orientée selon l'axe x (figure 2.6(b)). La norme des vecteurs \vec{a} , \vec{n} et \vec{b} correspond à un paramètre de maille.

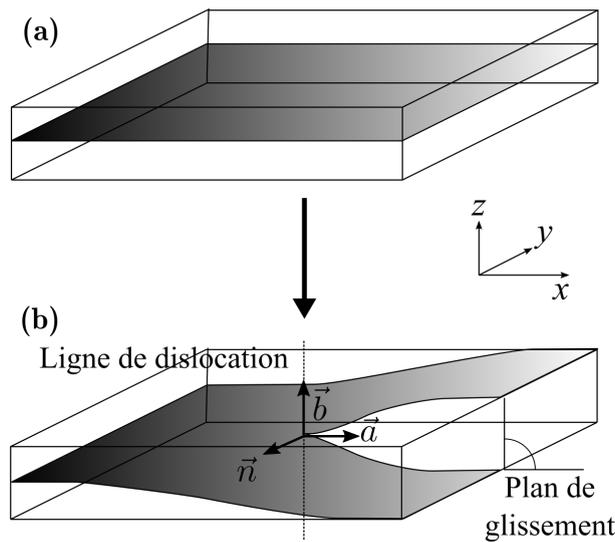


FIGURE 2.6 – Représentation d'une cellule de calcul (a) avant insertion d'une dislocation : le plan grisé correspond à un plan d'atomes du cristal. (b) Après insertion d'une dislocation vis : le plan grisé correspond au même plan d'atomes, cette fois en présence de la dislocation vis.

Conditions aux limites

Les surfaces libres de bridgmanite sont chargées. Afin d'éviter la création d'un champ électrique dans la cellule de calcul, des conditions périodiques sont utilisées soit avec des bords fixés pour écranter les charges, soit avec des bords libres mais parfaitement raccordés.

Selon l'axe z , les conditions périodiques s'appliquent naturellement. La dislocation est périodique

selon sa ligne, de périodicité b dans le cas d'une vis. Cependant, la présence d'une dislocation vis induit un décalage des coordonnées des atomes selon l'axe z . Le raccord des plans atomiques avec leur répliques périodiques selon les axes x et y n'est donc pas assuré, et les calculs réalisés ne reproduisent le cas d'une dislocation isolé qu'à condition d'appliquer les conditions de bords adéquates.

Présentation des conditions de bords selon un axe X

Trois types de conditions de bord différentes sont utilisées dans cette thèse pour les axes x et y . Afin d'introduire ces conditions aux bords, elles sont illustrées selon un axe X figure 2.7. Chaque type de conditions aux bords présente des avantages et des inconvénients.

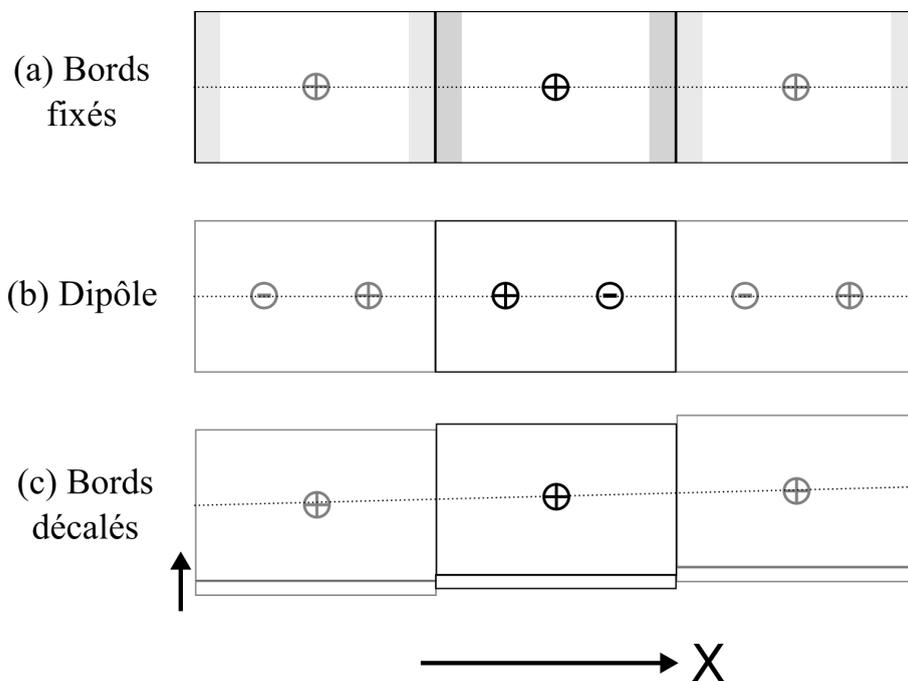


FIGURE 2.7 – Illustration de trois conditions de bord qui permettent de raccorder la cellule avec ses répliques périodiques selon un axe X.

Le premier type de conditions aux bords est représenté figure 2.7 (a), il s'agit des bords fixés. Le mauvais raccord des bords est préservé dans ce type de cellule de calcul. Cependant, lors du calcul de relaxation, les forces entre atomes localisées dans les bords fixés sont maintenues nulles, et leur position est donc constante. Les coordonnées atomiques initiales des atomes localisés dans les bords fixés correspondent au champ de déplacement élastique imposées par la dislocation. En utilisant ce type de condition aux bords, les dislocations sont relativement isolées de leur environnement selon X (figure 2.7). Néanmoins, un calcul d'énergie de la cellule de calcul est

entaché d'erreur, du fait des atomes non relaxés. Le calcul du tenseur de contrainte dans la cellule de calcul, dépendant de la distance entre atomes, peut diverger si il est réalisé en prenant en compte les atomes localisés dans les bords fixés. L'application de cette condition aux bords selon les directions x et y correspond à une cellule de type "cluster".

Le deuxième type de conditions aux bords est représenté figure 2.7 (b). En disposant deux dislocations de signes opposés le long de X , le désaccord introduit selon z par la dislocation est rattrapé, et les bords se rattachent correctement. Ce type de condition permet une relaxation totale de la cellule de calcul, et des calculs d'énergie précis. Son inconvénient est qu'il faut doubler la taille des cellules de calcul, et qu'il impose donc d'utiliser plus de ressources de calcul. En outre, les énergies obtenues dans ce genre de cellule de calcul ne correspondent pas aux énergies d'une dislocation isolée, mais aux énergies de deux dislocations interagissant entre elles, et avec leur répliques périodiques. L'application de ce type de bords selon les axes x et y correspond à une quadripôle de dislocations.

Enfin, il est possible de rattacher les bords de la cellule selon X en modifiant les vecteurs de périodicité de la cellule de calcul [Cai *et al.* 2003]. En donnant une côte $z = b/2$ au vecteur X , les plans atomiques modifiés par la présence d'une dislocation vis se raccordent correctement (figure 2.8). Ce type de raccord présente les mêmes avantages et inconvénients que le dipôle, à ceci près qu'il n'est pas nécessaire de doubler la cellule. Enfin, il faut noter que ce type de condition de bord n'est applicable qu'à une direction de l'espace, et doit être combiné à des bords fixés ou la présence d'un dipôle selon l'autre direction de l'espace.

Les cellules utilisées dans cette thèse correspondent (i) à la combinaison de bords décalés et de

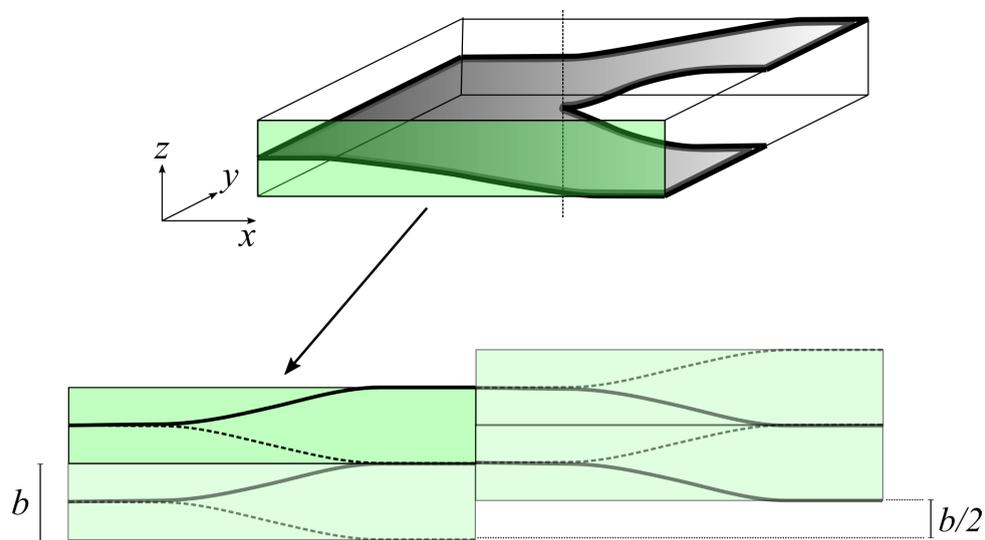


FIGURE 2.8 – Illustration du raccord des bords d'une cellule de calcul avec ses répliques périodiques selon x , en utilisant un décalage de $b/2$ selon z .

bords fixés pour les cellules de type "slab", (ii) à la combinaison de bords décalés d'un dipôle pour une cellule de type "dipôle". Les caractéristiques de ces différentes cellules de calcul sont détaillées dans les parties suivantes.

2.3.1 Cellule de type "slab"

Les cellules de calcul de type "slab" (figure 2.9) sont utilisées pour la détermination de structure de cœur de dislocations (Chapitre 3), et pour le calcul de contrainte de Peierls (Chapitre 4 et 5). La cellule de calcul est un parallélépipède de dimensions $l_x = k \cdot a$, $l_y = k \cdot n$ et $l_z = b$, avec k un entier. Une dislocation vis est placée au centre de la cellule.

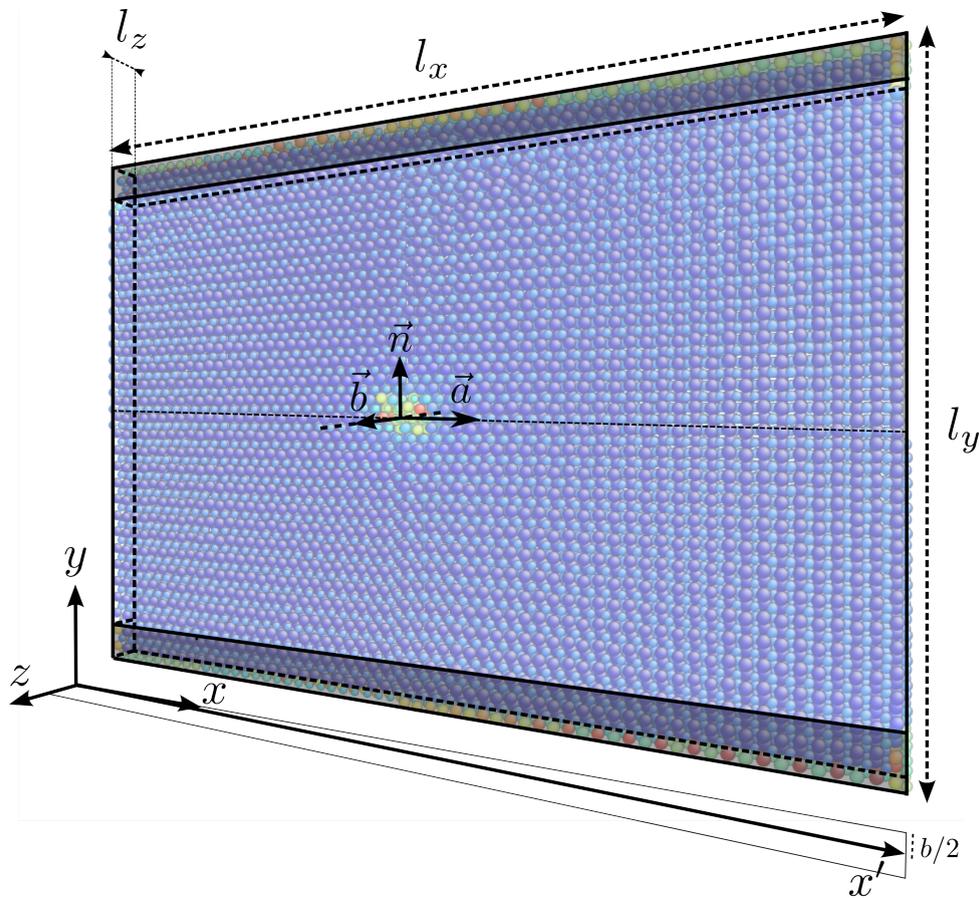


FIGURE 2.9 – Cellule de calcul de type "slab". Les axes x , y , et z correspondent au repère cartésien, les vecteurs de périodicité sont selon les axes x' , y et z . Les parties grisées, en haut et en bas, délimitent la zone où les coordonnées atomiques sont fixées. Un critère de déformation locale de type Von Mises est appliqué, les atomes proche du centre de la dislocation, ainsi que ceux aux bords apparaissent en couleur vives.

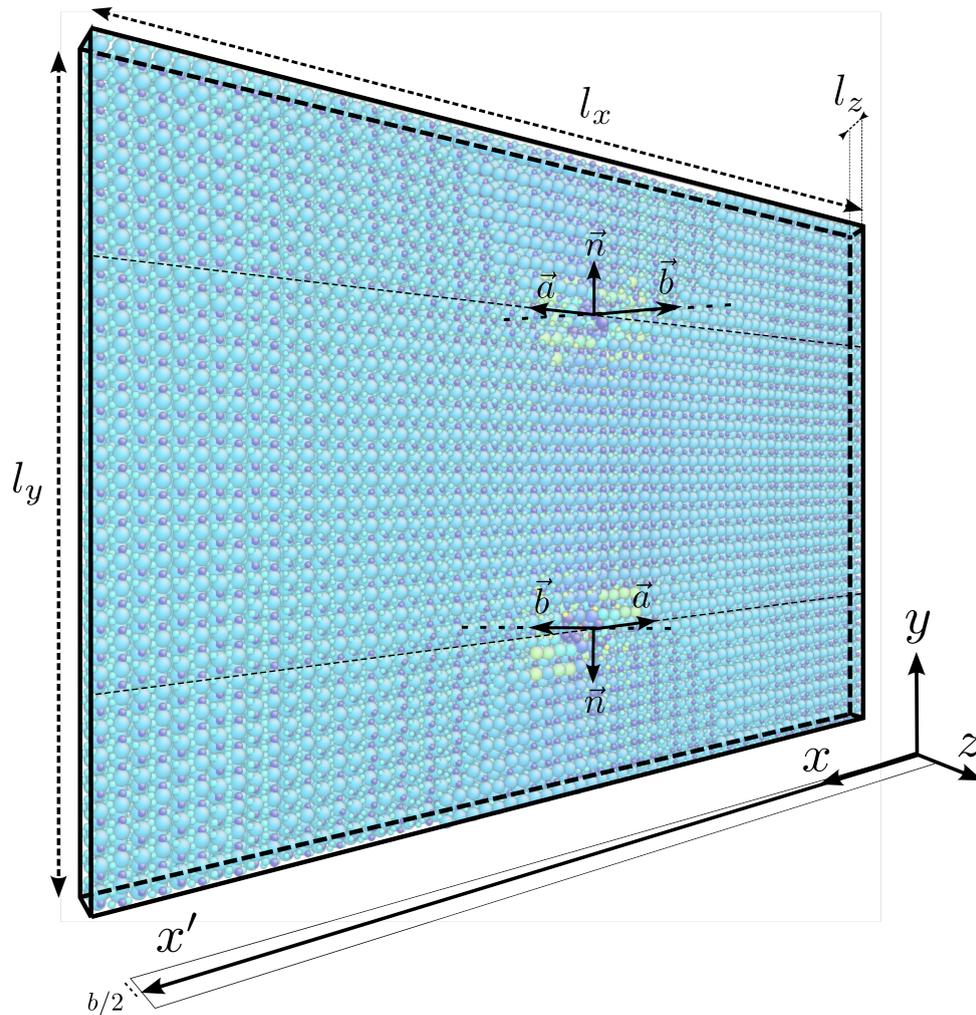


FIGURE 2.10 – Dipôle 2D. Les axes x , y , et z correspondent au repère cartésien, les vecteurs de périodicité sont selon x' , y et z . Le plan de glissement des deux dislocations est représenté par un trait en pointillé. Un critère de déformation locale de type Von Mises est appliqué, les atomes proches du centre des dislocations apparaissent en couleur vives.

Afin d'assurer le bon raccords des bords selon l'axe x , des bords décalés sont utilisés. Un axe x' est construit en ajoutant une composante $b/2$ selon z à x . Les conditions aux limites périodiques sont appliquées selon les axes x' , y et z . Le raccord selon l'axe y est assuré par des bords fixés. Les bords inférieurs et supérieurs de la cellule de calcul ($0 < y < n$; $l_y - n < y < l_y$) sont fixés. Dans ce type de calcul, la dimension du paramètre l_y de la cellule de calcul doit être suffisamment importante pour assurer le bon raccord des atomes relaxés avec les atomes non relaxés, et la dimension du paramètre l_x doit être suffisamment importante pour minimiser les interactions de la dislocation avec ses répliques périodiques selon x .

2.3.2 Dipôle à deux dimensions

Un dipôle à deux dimensions (dipôle 2D) est représenté figure 2.10. Ce type de cellule est utilisé lors de calculs de potentiel de Peierls, dans les chapitres 4 et 5. Les deux dislocations sont centrées selon l'axe x , et positionnées de sorte à créer par condition périodique un axe de dislocations équidistantes. La dislocation de signe positif a pour coordonnée $(0.5 \cdot l_x, 0.25 \cdot l_y)$, et la dislocation de signe négatif a pour coordonnée $(0.5 \cdot l_x, 0.75 \cdot l_y)$. Le dipôle de dislocation permet le bon raccord des bords selon l'axe y . Afin d'assurer le bon raccord des bords selon l'axe x , des bords décalés sont utilisés. Un axe x' est construit en ajoutant une composante $b/2$ selon z à x . Les conditions aux limites périodiques sont appliquées selon les axes x' , y et z .

Les forces d'interaction élastique dans ce type de configuration sont minimales lorsque les dislocations vis sont alignées sur le même axe. La force de Peach et Koehler entre les deux dislocations est nulle dans une configuration parfaitement alignée.

Les dipôles 2D permettent de déterminer l'énergie qui correspond à la présence d'un dipôle de dislocations, c'est à dire la somme des énergies de cœur des dislocations et des énergies d'interaction entre dislocations. Dans les travaux de [Dezerald *et al.* 2014, Dézerald 2014], des calculs NEB sont utilisés pour déterminer des potentiels de Peierls dans des métaux de structure cubique centré, sur des cellules de type quadripôle. Les interactions élastiques y sont calculées, et permettent de calculer des potentiels de Peierls *ab initio*, sur des cellules de moins de 150 atomes.

2.3.3 Dipôles à trois dimensions

Les dipôles à trois dimensions, ou dipôles 3D, sont utilisés pour modéliser des dislocations présentant un double décrochement (chapitres 4 et 5). Ce type de cellule, représenté figure 2.11, permet de modéliser un dipôle de dislocations de vecteur de Burgers de sens opposés, dans lequel les dislocations présentent un double décrochement dans un même plan. Initialement, trois blocs sont créés : les blocs (a), (b) et (c) (figure 2.11). Les blocs contiennent tous les trois un dipôle de dislocations droites de sens opposé. Les blocs (a) et (c) sont identiques, le bloc (b) contient un dipôle décalé d'une distance a selon x . Les blocs sont ensuite réunis selon l'axe z , le calcul de relaxation permet d'obtenir le double décrochement. Le bon raccord de la cellule et de ses répliques périodiques est assurée selon l'axe x par l'alternance de dislocations de signe positif et négatif. Selon y , ce raccord est assuré grâce à des bords décalés, avec un vecteur de périodicité selon y' . La cellule de calcul est un parallélépipède de dimension $l_x = i \cdot a$, $l_y = j \cdot b$ et $l_z = k \cdot n$

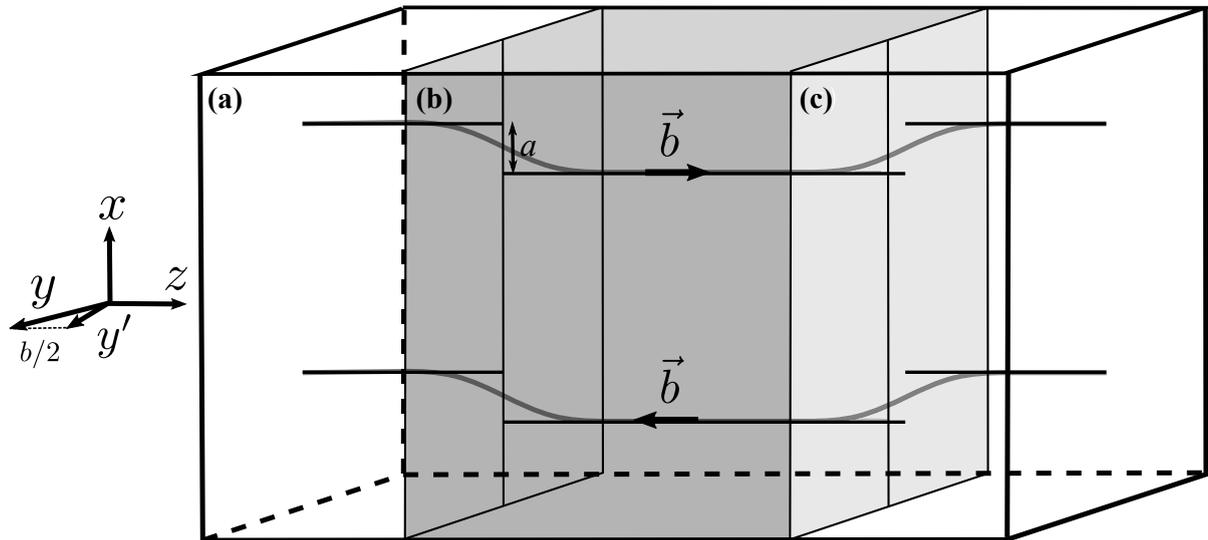


FIGURE 2.11 – Cellule de calcul C. Les axes x , y , et z correspondent au repère cartésien, les vecteurs de périodicité sont selon x , y' et z . Un dipôle de dislocations de sens de vecteur de Burgers opposés et qui présentent un double décrochement est modélisé. Les dislocations sont initialement droites, créées indépendamment dans trois blocs (a), (b) et (c). Après relaxation, un double décrochement est créé (traits grisés).

(i, j, k sont des entiers). Les décrochements le long de la ligne sont espacés d'une distance $l_z/2$. Dans cette configuration, du fait des conditions périodiques selon z , les lignes de dislocations sont infinies et présentent des doubles décrochements de taille $w = l_z/2$, espacés périodiquement d'une distance $l_z/2$.

Les dipôles 3D permettent de créer des dislocations présentant un double décrochement par calcul de statique moléculaire. Les calculs dans ce type de cellule atteignent les limites des capacités de calcul mises à disposition lors de cette thèse, de par le nombre d'atomes de l'ordre du million. Il est impossible d'y modéliser des dislocations qui n'interagiront pas entre elles, les décrochements ne sont jamais isolés de leur environnement. En outre, les interactions à prendre en compte sont de deux natures. Celles-ci sont à la fois transverses à la ligne de dislocation (axes x et y), comme c'était le cas jusqu'à présent, mais aussi selon la ligne de dislocation (axe z). Les décrochements sont susceptibles d'interagir fortement entre eux, et avec leur réplique périodique.

2.4 Caractérisation des structures de dislocation

2.4.1 Déplacement différentiel

Une dislocation peut être caractérisée par les écarts à la structure cristalline qu'elle induit dans le cristal, définis par le déplacement différentiel de paires d'atomes. Le déplacement différentiel d'une paire d'atomes au voisinage d'une dislocation correspond à l'écart qu'ont subi leurs coordonnées par rapport à leurs coordonnées dans le cristal parfait. Le vecteur de déplacement différentiel $\vec{\phi}_{ij}$ d'un couple d'atomes i et j est :

$$\vec{\phi}_{ij} = \vec{d}_{ij} - \vec{c}_{ij} \quad (2.16)$$

\vec{d}_{ij} est la différence de coordonnée d'un couple d'atomes i et j en présence d'une dislocation, et \vec{c}_{ij} est la différence de coordonnée des mêmes atomes dans le cristal parfait. La figure 2.12 représente un exemple de déplacement différentiel dans le cas d'une dislocation coin dans un réseau cubique. La norme du vecteur de déplacement différentiel varie entre 0 et b . Un modulo du vecteur de Burgers doit être appliquée au déplacement différentiel (2.16) si on veut corriger le cisaillement plastique pris en compte hors du cœur de dislocation.

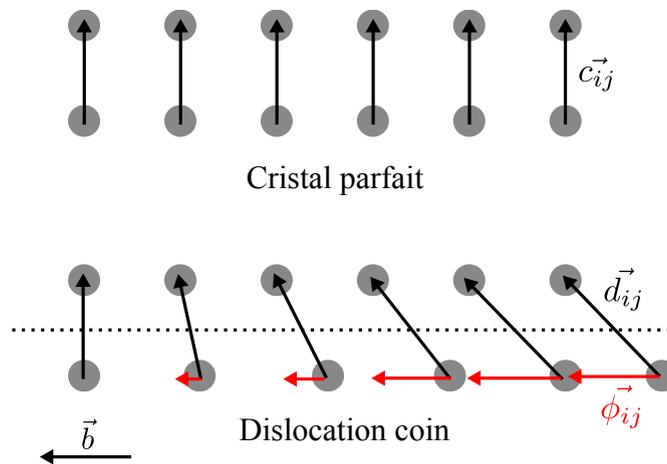


FIGURE 2.12 – Représentation du vecteur de déplacement différentiel $\vec{\phi}_{ij}$ induit par une dislocation coin, vue selon sa ligne. Le trait en pointillé correspond au plan de glissement.

On peut définir les différents caractères de la dislocation à partir des composantes du vecteur de déplacement différentiel. Les composantes du vecteur de déplacement différentiel perpendiculaires à la ligne de dislocation sont les composantes coin, la composante parallèle est la composante vis.

Carte de déplacement différentiel

Une carte de déplacement différentiel (ou carte de Vitek), est une représentation en deux dimensions des déplacements induits par la dislocation dans le cristal. Les déplacements entre paires d'atomes sont matérialisés par des vecteurs entre atomes, de longueur proportionnelle aux composantes du vecteur de déplacement différentiel. Un exemple de carte de déplacement différentiel est représenté figure 2.13, dans le cas d'une dislocation vis $1/2[111]$ dans un cristal cubique. Dans cet exemple, cette carte permet d'établir que les déplacements différentiels vis et coin induits par la dislocation sont localisés dans trois plans distincts.

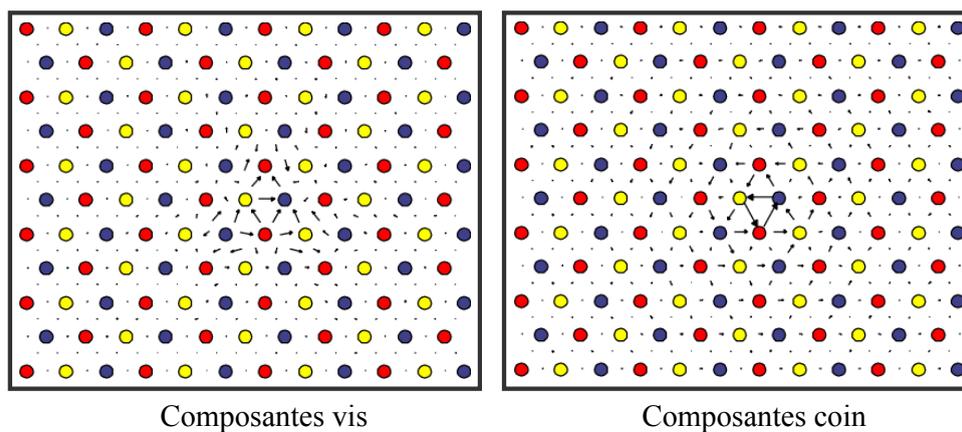


FIGURE 2.13 – Cartes de déplacement différentiel des composantes vis et coin d'une dislocation vis $1/2[111]$. Le bloc est formé en répétant périodiquement trois plans atomiques (111) (distingués par la couleur des atomes) le long de la ligne de dislocation.

Désaccord atomique et fonction de désaccord

Le désaccord atomique correspond à l'évolution d'une composante du vecteur de déplacement différentiel, le long d'une direction du cristal. Le désaccord atomique le long d'un axe du cristal est mesurée sur un nombre fini de couples d'atomes, et correspond donc à une fonction discrète. Une fonction continue $S(x)$, appelée fonction de désaccord, peut être ajustée sur le désaccord atomique. Cette fonction s'exprime :

$$S(x) = \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot \arctan \left(\frac{x - x_i}{e_i} \right) + \frac{b}{2} \quad (2.17)$$

La condition $\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1$ doit être respectée. La fonction $S(x)$ est une fonction croissante initialement fixée à 0 loin du coeur de dislocation, puis qui croît jusqu'à b . Par analogie au

modèle de Peierls Nabarro [Joós *et al.* 1994], la dérivée spatiale ($dS(x)/dx$) s'apparente à la densité de vecteur de Burgers.

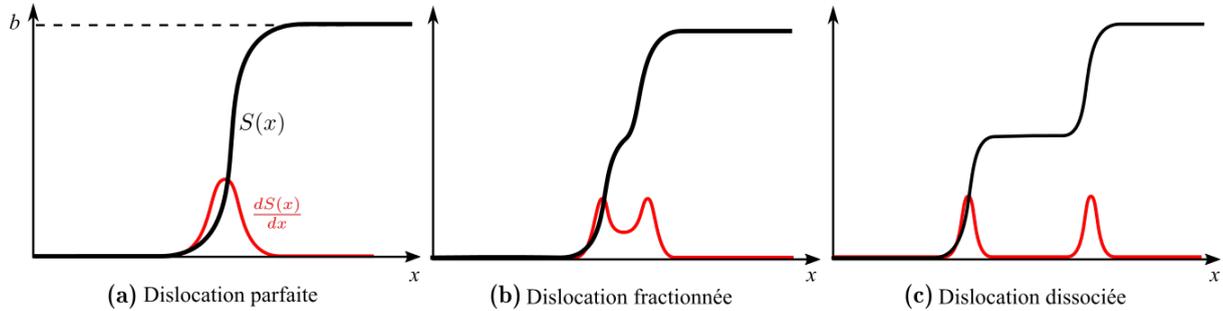


FIGURE 2.14 – Représentation de désaccords atomiques (courbes en noir), et des densité de vecteur de Burgers (courbes en rouge) dans le cas **(a)** d'une dislocation parfaite **(b)** d'une dislocation fractionnée pour $N=2$ et **(c)** d'une dislocation dissociée pour $N=2$.

Dans le cas d'une dislocation parfaite, le désaccord de la dislocation peut être représenté par l'expression (2.17), en choisissant $N = 1$ (figure 2.14(a)) soit une seule fonction arctan. Pour une dislocation parfaite, le paramètre x_1 correspond alors au centre de la dislocation, et e_1 à son étalement.

Si la structure de dislocation est plus complexe (figure 2.14(b) et (c)), on peut choisir de décrire sa structure avec plusieurs fonctions arctan. Pour $N \geq 2$, la fonction est fractionnée dans le cas d'un coeur compact, dissociée dans le cas d'un coeur étalé où on observe un plateau de la fonction de désaccord [Seeger A. 1953, Schoeck 2001]. Le paramètre N correspond alors au nombre de dislocations fractionnelles ou partielles. Le centre de la dislocation x_c peut être défini pour une structure complexe est défini comme le centre de masse de la densité de vecteur de Burgers :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (dS(x)/dx)dx = \int_{-\infty}^{x_c} (dS(x)/dx)dx + \int_{x_c}^{+\infty} (dS(x)/dx)dx \quad (2.18)$$

On obtient $x_c = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \alpha_i x_i$. La largeur à mi-hauteur de la densité de vecteur de Burgers, notée ξ , est utilisée pour quantifier l'étalement de la dislocation.

2.4.2 Structures de dislocations présentant un décrochement

Dans le cas d'un décrochement, la ligne n'est plus droite, et n'est plus périodique de période b selon sa ligne. Pour caractériser un double décrochement, une cellule est divisée en tranches de largeur b selon la ligne de dislocation. On considère ici la ligne de dislocation orientée selon z . Dans chaque tranche, un désaccord atomique de la dislocation est calculé et ajusté par une

fonction continue (expression (2.17)). La coordonnée $x_c(z)$, correspondant au centre de la dislocation d'une tranche de coordonnée z , peut ensuite être utilisée pour localiser précisément la ligne de dislocation (figure 2.15), et tracer le profil du décrochement.

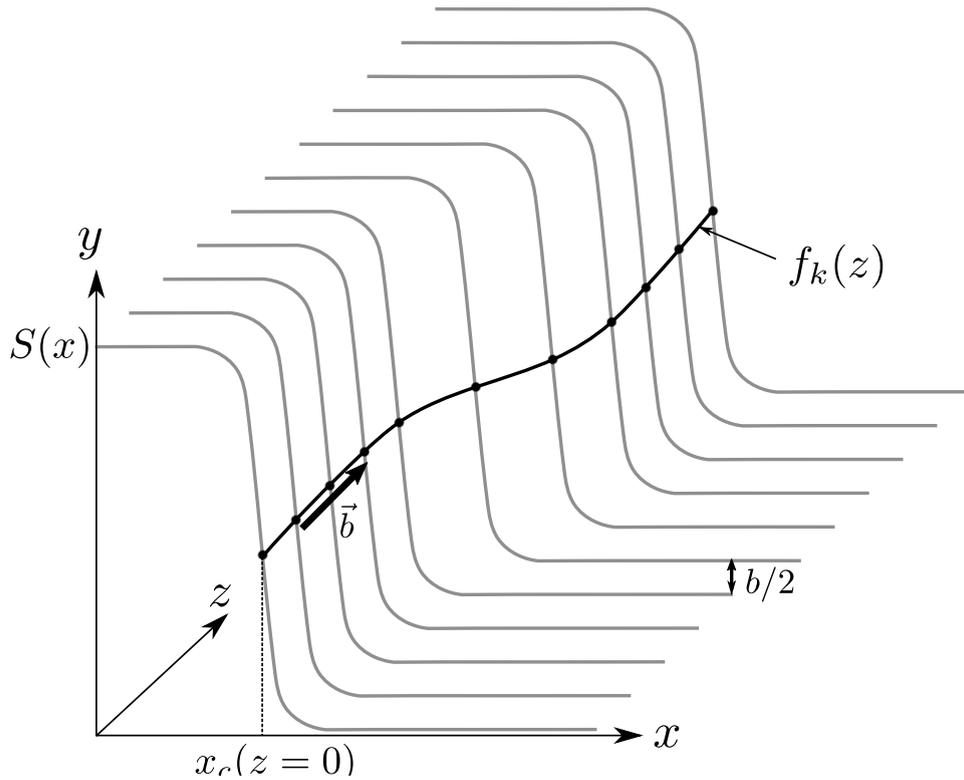


FIGURE 2.15 – Représentation du calcul de structure d'un décrochement à partir des fonctions de désaccords de la dislocation. La ligne de dislocation est selon l'axe z , le décrochement est dans le plan y . Les fonctions de désaccords de la dislocation dans le plan de glissement sont représentées en gris, tracées dans chaque tranche de largeur $b/2$. Le centre de ces fonctions de désaccord $x_c(z)$ se déplace de $x_c(z=0)$ à $x_c(z=0) + a$. Le décrochement est représenté par la courbe noire, sa structure est obtenue à partir des points $x_c(z)$.

La structure d'une dislocation présentant un décrochement prélevée des simulations atomiques est encore une fois une fonction discrète. De la même manière que pour le désaccord atomique, la structure des décrochements peut être ajustée par une fonction continue [Joós & Zhou 2001]. Cette fonction est notée $f_k(z)$ et s'exprime :

$$f_k(z) = \frac{2h}{\pi} \arctan \left(\exp \left\{ \frac{\pi(z - z_0)}{\lambda b} \right\} \right) \quad (2.19)$$

Le paramètre z_0 correspond au centre du décrochement, le paramètre λ caractérise l'étalement du décrochement.

Chapitre 3

Étude en pression des dislocations vis [100], [010] et [001]

Les dislocations vis [100], [010] et [001] sont modélisées à l'échelle atomique, à des pressions allant de 30 à 140 GPa. La structure de cœur de ces dislocations est analysée, notamment leur étalement dans les différents plans. Une première évaluation de la friction de réseau est obtenue en cisillant les dislocations afin qu'elles quittent leur vallée de Peierls.

Le chapitre est construit comme suit. Tout d'abord, la cellule de calcul commune aux résultats de ce chapitre est décrite. Viennent ensuite, dans trois différentes parties, l'étude des dislocations vis [100], [010] et [001]. Ces résultats sont discutés dans une dernière partie. Ils sont comparés aux résultats du modèle PN, puis les résultats sur les dislocations coins sont discutés.

Précisions sur les calculs réalisés dans ce chapitre

Les dislocations sont modélisées dans des cellules de type "slab" (figure 3.1), dont la description est l'objet de la partie 2.3.1. Dans l'ensemble des calculs, la longueur l_x est supérieure à l_y , et $l_z = b$. Les différents systèmes de glissement étudiés sont résumés table 3.1, avec les correspondances du vecteur de Burgers \vec{b} , de la périodicité selon la direction de glissement \vec{a} , et de la périodicité selon la normale au plan de glissement \vec{n} .

Parmi les propriétés des dislocations étudiées dans ce chapitre (structure de cœur et contrainte de Peierls), la contrainte de Peierls est la propriété la plus sensible aux dimensions de la cellule de calcul. Une étude de l'influence de l_x et l_y sur les contraintes de Peierls dans le cas du système de glissement $[100](010)$ est représentée figure 3.2. Sur cette figure, on observe que pour l_x et l_y supérieurs à 150 \AA , la contrainte de Peierls obtenue est stable, avec une incertitude de $0,5 \text{ GPa}$. Les dimensions retenues dans la suite pour les paramètres l_x et l_y , en fonction des systèmes de glissement étudiés sont listées table 3.1.

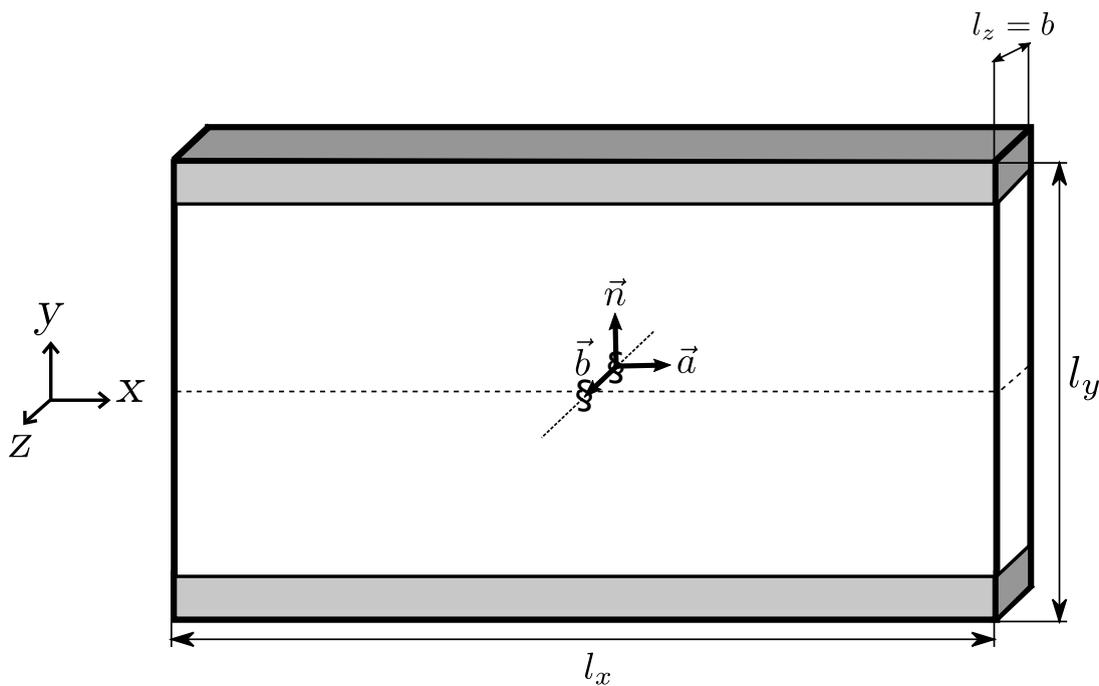


FIGURE 3.1 – Géométrie employée pour l'étude des structures de dislocation réalisée dans ce chapitre. La dislocation est au centre de la boîte, son plan de glissement de normale \vec{n} est représenté au centre de la cellule. Les zones grisées en haut et en bas correspondent aux bords fixes.

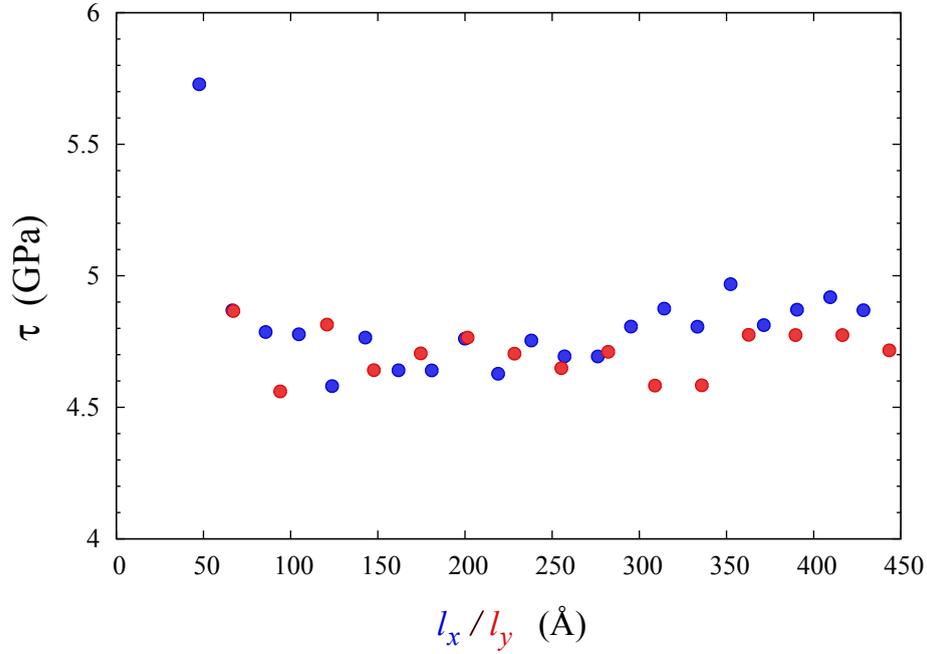


FIGURE 3.2 – Valeur des contraintes de Peierls obtenues pour la dislocation $[100]$ dans (010) , en fonction de l_x et l_y . Lorsque l'influence de l_x est évaluée (points bleus) $l_y = 201$ Å, et lorsque l_y varie (points rouges), $l_x = 143$ Å.

	Systèmes de glissement	\vec{b}	\vec{a}	\vec{n}	Dimensions cellule
Partie 3.1	$[100](010)$	$[100]$	$[001]$	$[010]$	$l_x = 60 \cdot a, l_y = 30 \cdot n$
	$[100](001)$		$[010]$	$[001]$	
Partie 3.2	$[010](100)$	$[010]$	$[001]$	$[010]$	$l_x = 60 \cdot a, l_y = 30 \cdot n$
	$[010](001)$		$[100]$	$[001]$	
Partie 3.3.1	$[001](100)$	$\vec{b}_1 = \frac{1}{2}[001]$ $\vec{b}_2 = \frac{1}{2}[001]$	$[010]$	$[100]$	$l_x = 80 \cdot a, l_y = 60 \cdot n$
	$[001](010)$		$[001]$	$[010]$	$l_x = 60 \cdot a, l_y = 40 \cdot n$
	$[001](110)$		$[\bar{1}10]$	$[110]$	$l_x = 90 \cdot a, l_y = 48 \cdot n$

TABLE 3.1 – Résumé des systèmes de glissement étudiés, et correspondance des paramètres \vec{a} , \vec{b} et \vec{n} dans chaque cas.

3.1 Dislocation vis $[100]$

3.1.1 Structure à 30 GPa

La figure 3.3 représente une maille cristalline selon l'axe cristallographique $[100]$. Les symboles noirs correspondent aux positions d'équilibre de la dislocation auquel il est possible d'aboutir après relaxation, selon la condition d'introduction initiale du champ de déplacement élastique isotrope de la dislocation. Il n'existe qu'une structure possible pour la dislocation vis $[100]$. Néanmoins, la position de la dislocation dans le réseau cristallin dépend du signe de vecteur de Burgers de la dislocation (Fig. 3.3). Cette particularité a déjà été observé sur des dislocations vis, notamment dans les métaux de structure cubique centré [Seeger & Wüthrich 1976]. Dans ces travaux, une propriété supplémentaire nommée polarité est utilisée pour décrire les dislocations. Deux dislocations identiques peuvent se distinguer par leur polarité p , de valeur $p = 1$ ou $p = -1$.

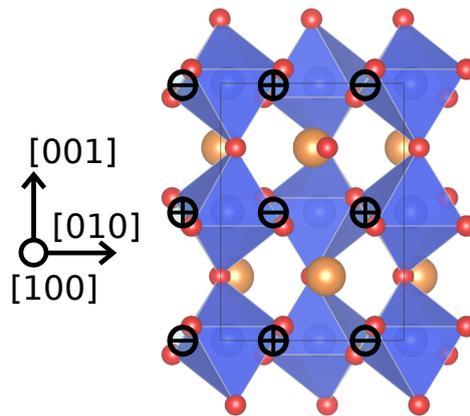


FIGURE 3.3 – Maille de bridgmanite à 30GPa, vue selon l'axe $[100]$. Les cercles contenant les signes + et - désignent les positions d'équilibre de la dislocation vis $[100]$ selon le sens de son vecteur de Burgers. Les dislocations positionnées sur les signes + et - ont une structure identique, mais une polarité p opposée.

La figure 3.4 représente la structure atomique de la dislocation vis $[100]$, observée dans les plans (010) et (001) . Le cœur de la dislocation vis $[100]$ est composé de paires d'octaèdres SiO_6 connectés par leurs arêtes, au lieu d'être connectés par un sommet comme c'est le cas dans le cristal parfait. Dans cette configuration, la ligne de dislocation définit un joint d'antiphase, un type de défaut d'empilement similaire à ceux observés dans d'autres perovskites [Hirth & Lothe 1982, Wu *et al.* 2005, Hirel *et al.* 2012]. Des cartes de déplacements différentiel sont tracées afin de positionner selon x et y les déplacements induits par la dislocation vis selon sa ligne (selon z). Comme on peut le voir sur la figure 3.4(b), des paires d'atomes Mg-Mg et

Si-Si entourent la ligne de dislocation. Ces paires d'atomes sont utilisées pour représenter les déplacements différentiels induits par la dislocation, figure 3.5. Les déplacements différentiels les plus importants sont localisés au voisinage du plan (010), les déplacements dans le plan (001) sont moins marqués.

Le désaccord atomique peut être tracé dans le plan (010), en utilisant les paires Si-Si et Mg-Mg

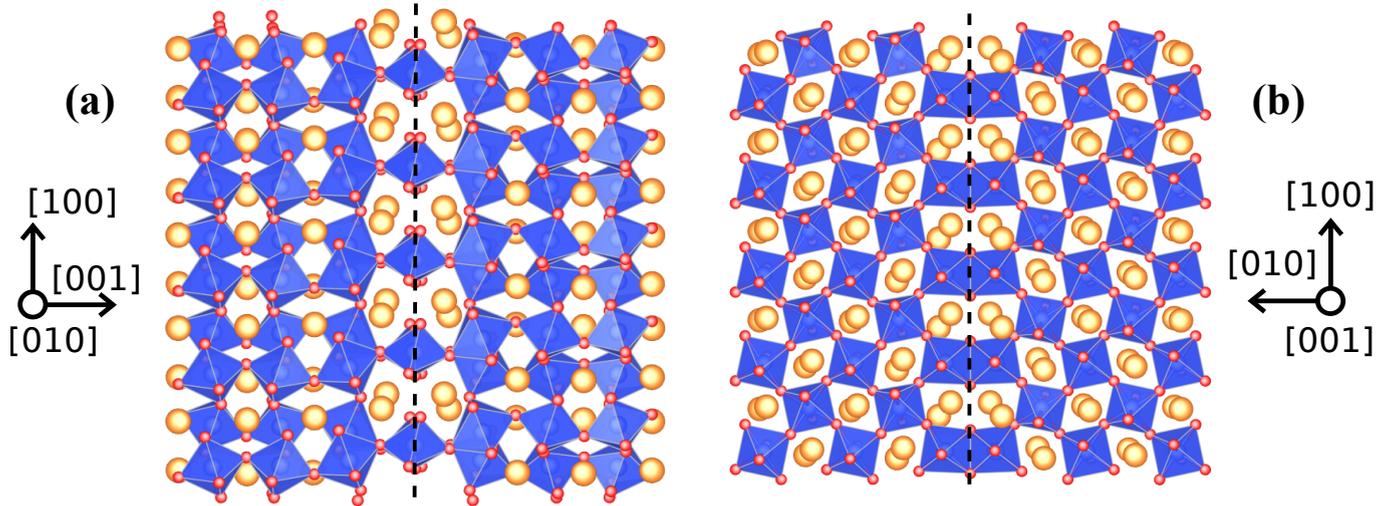


FIGURE 3.4 – Configuration atomique de la dislocation vis $[100]$ à 30 GPa (a) vue dans le plan (010) (b) vue dans le plan (001). Les traits en pointillés représentent la ligne de dislocation.

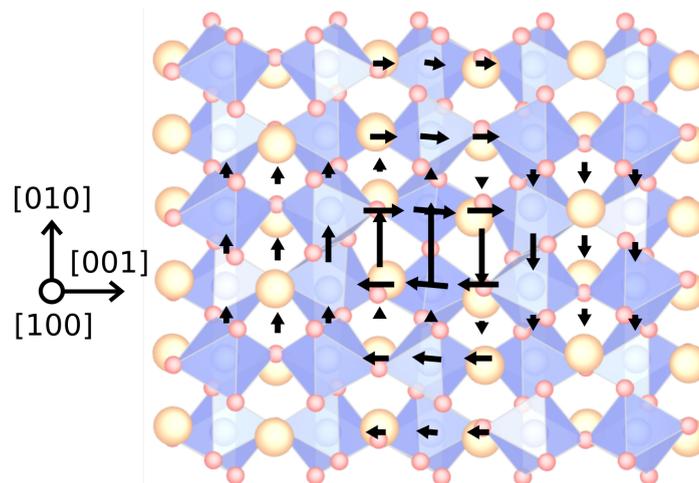


FIGURE 3.5 – Carte de déplacement différentiel vis des couples Mg-Mg et Si-Si de la dislocation vis $[100]$, vue selon sa ligne. Les déplacements différentiels sont superposés à une image de la dislocation relaxée. Les atomes de Mg sont représentés en jaune, les Si en bleu et les oxygènes en rouge.

successivement alignées dans les deux plans d'atomes (010) qui entourent le centre de la dislocation (figure 3.5). Le désaccord atomique obtenu dans le plan (010) est représenté figure 3.6(a). On observe un léger épaulement du désaccord atomique, qui par conséquent est mieux ajusté par deux fonctions arctan (expression (2.17) avec $N=2$). Les paramètres d'ajustement obtenus sont

$e_1 = 1,34$, $e_2 = 1,68$, et $\alpha_1 = 0,4$. En dérivant cette fonction, on obtient la densité de vecteur de Burgers de la dislocation, figure 3.6(b). Cette représentation du cœur de dislocation permet de mettre en évidence un cœur de dislocation fractionné. La densité de dislocation est en effet composée de deux fonctions lorentziennes fortement corrélées [Schoeck 2001]. L'étalement de la dislocation est quantifié à partir de la largeur à mi-hauteur de la densité de vecteur de Burgers, et correspond à $\xi = 6,64 \text{ \AA}$, soit $1,0 \cdot c$.

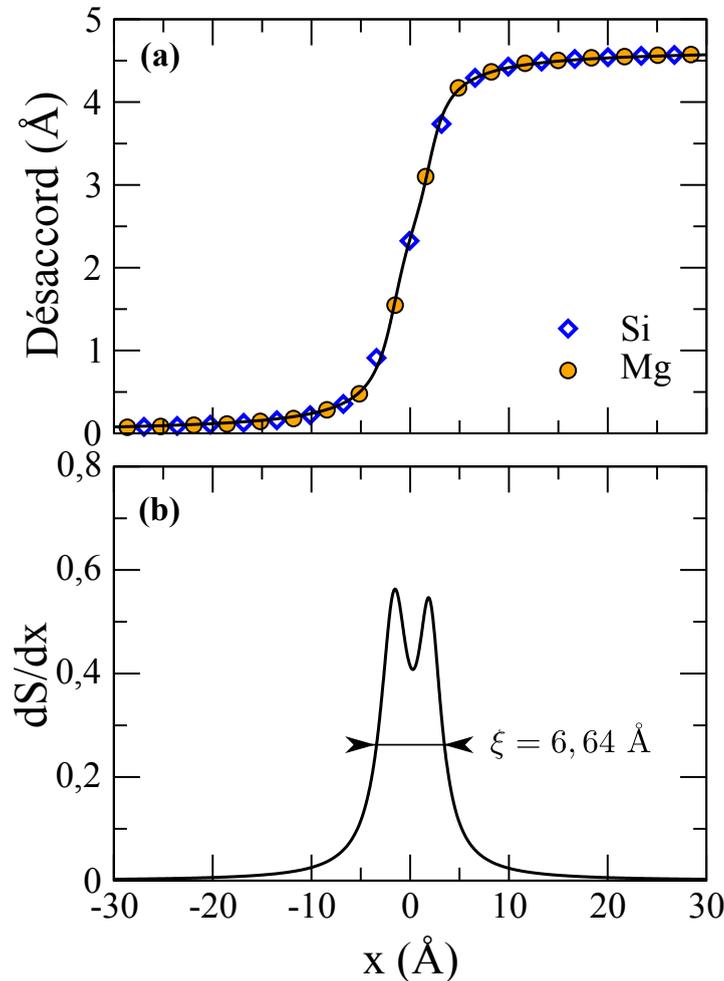


FIGURE 3.6 – Structure de la dislocation vis $[100]$ dans le plan (010) à 30 GPa, calculée à partir du déplacement différentiel des couples Mg-Mg et Si-Si. (a) Les points correspondent au désaccord atomique, la fonction continue est une fonction de désaccord ajustée au désaccord atomique. (b) Densité de vecteur de Burgers, qui correspond à la dérivée de la fonction de désaccord.

Un désaccord atomique en (001) peut être tracé en utilisant les couples Si-Si ou les couples Mg-Mg contenus dans les plans atomiques (001) autour du centre de la dislocation (figure 3.5). Le désaccord atomique dans le plan (001) est représenté figure 3.7. Ce désaccord est abrupt. Une fonction de désaccord (expression (2.17)) est ajustée avec $N=1$. On trouve un étalement

$\xi = 0.78 \text{ \AA}$, soit $0.16 \cdot b$.

La comparaison des désaccords atomiques de la dislocation $[100]$ dans les plans (010) et (001) indique que la dislocation s'étale préférentiellement dans le plan (010) .

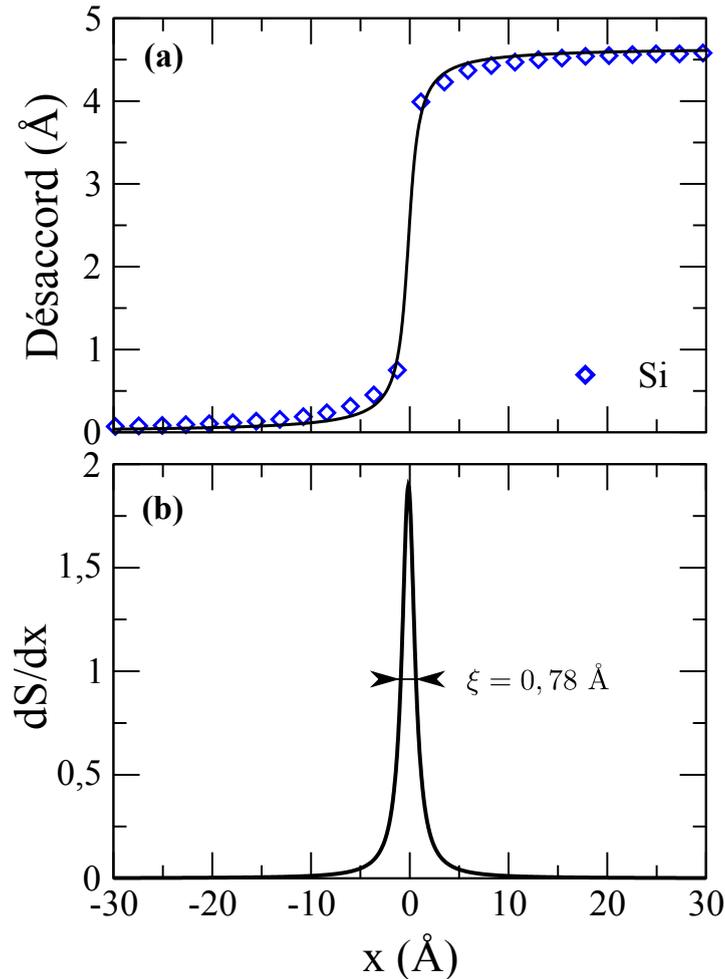


FIGURE 3.7 – Structure de la dislocation vis $[100]$ dans le plan (001) à 30 GPa, calculée à partir du déplacement différentiel des couples Si-Si. **(a)** Les points correspondent au désaccord atomique, la fonction continue est une fonction de désaccord ajustée au désaccord atomique. **(b)** Densité de vecteur de Burgers, qui correspond à la dérivée de la fonction de désaccord.

3.1.2 Contrainte de Peierls

Les calculs de relaxation peuvent servir à estimer la contrainte de Peierls de la dislocation. Un cisaillement ε_{yz} est appliqué à la cellule de calcul, afin d'appliquer une contrainte projetée dans le plan de glissement de la dislocation¹. Le cisaillement est appliqué par incréments de 0,1 %. Après chaque pas de cisaillement, la cellule de simulation est relaxée et son énergie est relevée. La figure 3.8(a)) représente l'énergie du système en fonction de la déformation appliquée. L'énergie

1. Les calculs de relaxation sont réalisés à volume fixé. Une contrainte est donc appliquée au système par l'intermédiaire d'un cisaillement.

de la cellule augmente à mesure que le cisaillement augmente. La contrainte induite dans la cellule de calcul par un cisaillement ε_{yz} se déduit des calculs d'énergie à partir de la relation :

$$\tau_{yz} = \frac{1}{2V} \frac{dE(\varepsilon_{yz})}{d\varepsilon_{yz}} \quad (3.1)$$

V est le volume de la cellule de calcul. Cette relation permet d'obtenir la fonction $\tau(\varepsilon_{yz})$, représentée figure 3.8 (b). Aux faibles valeurs de cisaillement, la contrainte est reliée au cisaillement par la loi de Hooke, la pente initiale de la fonction $\tau(\varepsilon_{yz})$ correspond à $2C_{ii}$ avec $i = 4,5$ ou 6 selon le système de glissement étudié. Dans le cas représenté figure 3.8 (b), on obtient la valeur de la constante élastique C_{66} . La valeur obtenue est $C_{66} = 150$ GPa, identique à la constante élastique calculée sur une cellule de cristal parfait (table 2.2, $C_{66} = 150$ GPa).

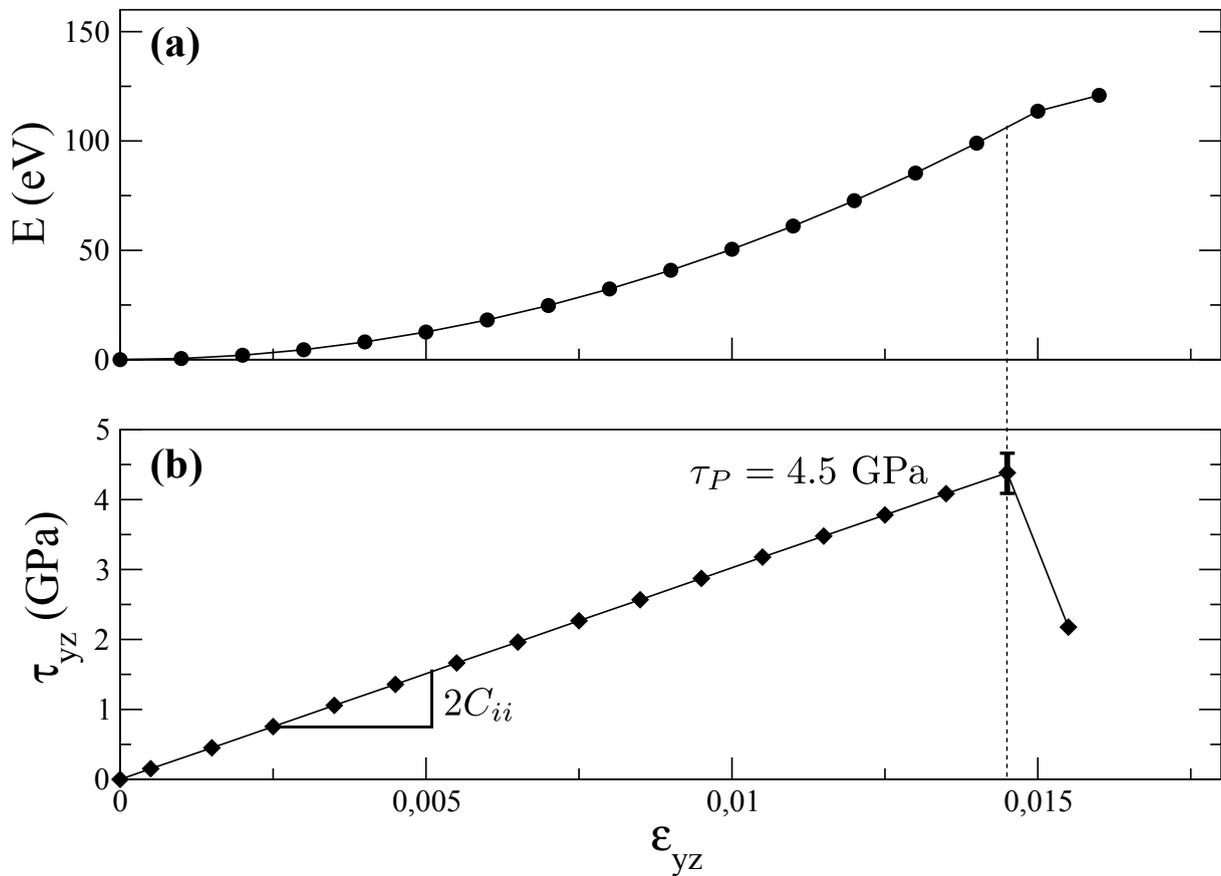


FIGURE 3.8 – Calcul de la contrainte de Peierls τ_P , réalisé pour une dislocation $[100]$ glissant dans le plan (010) à 30 GPa. **(a)** Énergie de la cellule de calcul, déformée par incréments de 0,1 %. **(b)** Contraintes obtenues à partir des énergies de la même cellule de calcul. Les points sont décalés en abscisse, du fait de l'emploi d'une dérivée centrée pour le calcul de la contrainte (eq. 3.1).

À partir d'un cisaillement critique correspondant à une contrainte de 4,5 GPa, on constate sur la figure 3.8(b) une baisse de contrainte. Dans la cellule de calcul, cette diminution de contrainte

correspond à la mise en mouvement de la dislocation, comme on peut le voir sur la figure 3.9 où la densité de vecteur de Burgers de la dislocation est représentée à différents stades du cisaillement. Cette contrainte critique permet d'estimer la contrainte de Peierls de la dislocation. Une barre d'erreur due au pas de calcul est ajoutée, elle correspond à environ 0,5 GPa. En outre, on peut observer sur la figure 3.9 un effet de la contrainte appliquée sur la structure de dislocation. Le cœur de dislocation $[100]$ est composé de deux dislocations fractionnelles. La contrainte a pour effet de diminuer la symétrie du cœur de dislocation, la structure de la fractionnelle de tête dépend de la contrainte, contrairement à la fractionnelle de queue qui reste stable.

Le même type de calcul est réalisé en appliquant un cisaillement $-\varepsilon_{yz}$, afin d'amener la dislocation à glisser dans le sens opposé. Les contraintes de Peierls obtenues pour le glissement de la dislocation $[100]$ dans le plan (010) sont $4,5 \pm 0,5$ GPa selon \vec{a} , et $5 \pm 0,5$ GPa selon $-\vec{a}$. Dans le plan (001) , les contraintes de Peierls obtenues selon $\pm\vec{a}$ correspondent toutes deux à $21,7 \pm 0,5$ GPa.

L'étude de la structure de dislocation vis $[100]$ a montré un étalement dans le plan (010) . Les contraintes de Peierls obtenues sont largement plus faibles dans le plan (010) . C'est dans ce même plan que l'étalement de la dislocation est le plus important. Ce résultat est cohérent. Dans le plan (010) , la dislocation $[100]$ est fortement étalée et son cœur correspond à une large distribution de désaccords atomiques faibles. Au contraire, dans le plan (001) , les désaccords sont importants mais portés par un faible nombre d'atomes. Lorsque la dislocation glisse, les liaisons entre atomes sont rompues et recrées avec l'atome suivant. Il est plus favorable d'un point de vue énergétique de déplacer faiblement un nombre important d'atomes que de décaler fortement un faible nombre d'atomes.

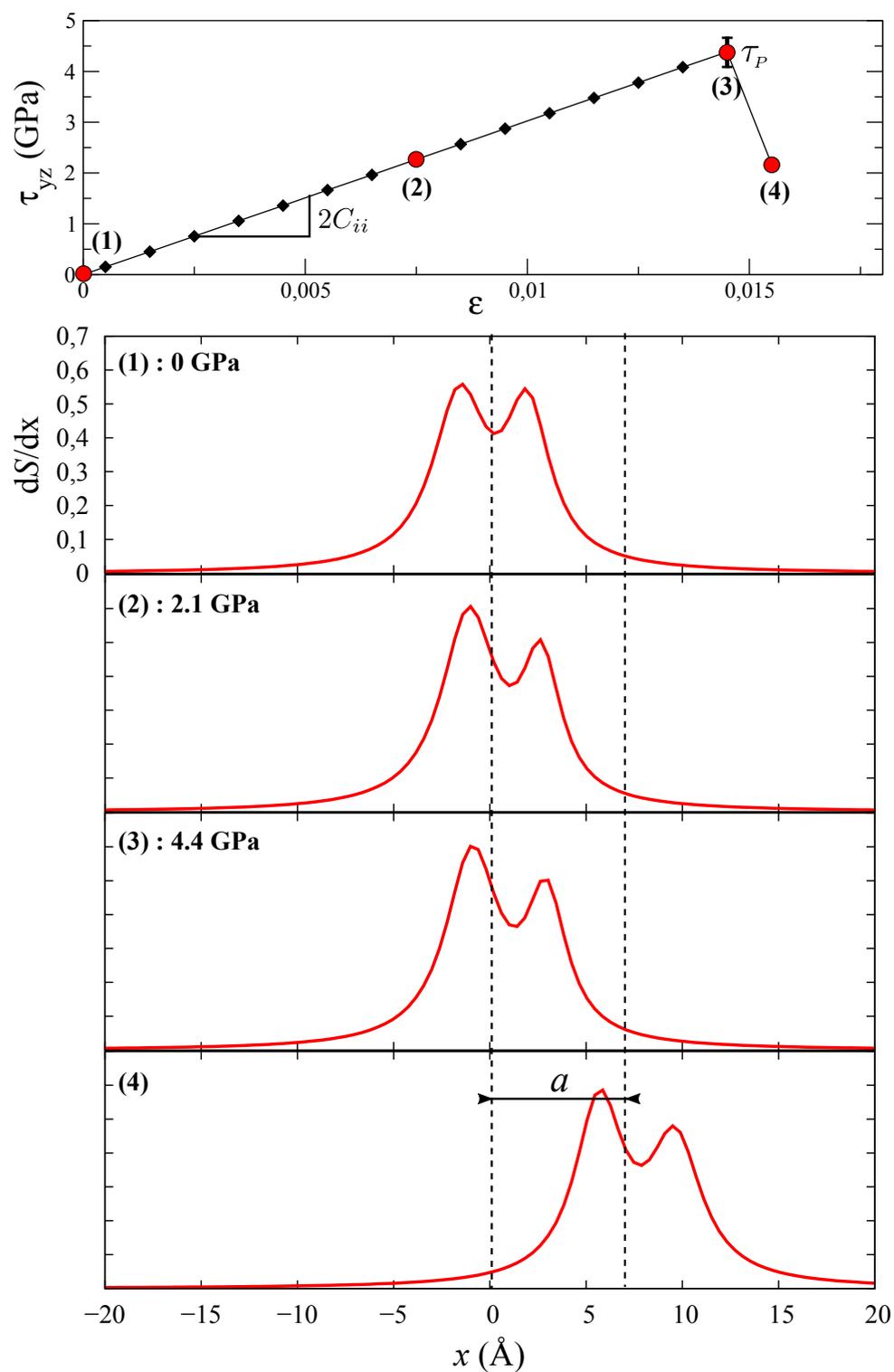


FIGURE 3.9 – Évolution de la structure de la dislocation $[100]$ pour différentes valeurs de contraintes projetées dans le plan (010) . La figure du haut correspond aux contraintes calculées dans la cellule de calcul, les figures du bas correspondent aux dérivées des fonctions de désaccords obtenues à partir de la structure de la dislocation.

3.1.3 Effet de la pression

Sur la structure de dislocation

La structure de dislocation est modélisée en augmentant la pression de 30 à 140 GPa, par pas de 10 GPa. La structure de la dislocation $[100]$ observée à 30 GPa est préservée avec la pression. La figure 3.10 représente la dérivée des fonctions de désaccord de la dislocation $[100]$ dans le plan (010) en fonction de la pression. Hormis une légère symétrisation du cœur de dislocation, l'augmentation de la pression opère principalement à travers la modification des paramètres élastiques du matériau. L'étalement du cœur de dislocation et sa distribution générale restent constants avec la pression. Dans les plans (010) , la dislocation conserve une largeur de cœur proportionnelle au paramètre de maille c , soit $\xi = 1,0 \cdot c$.

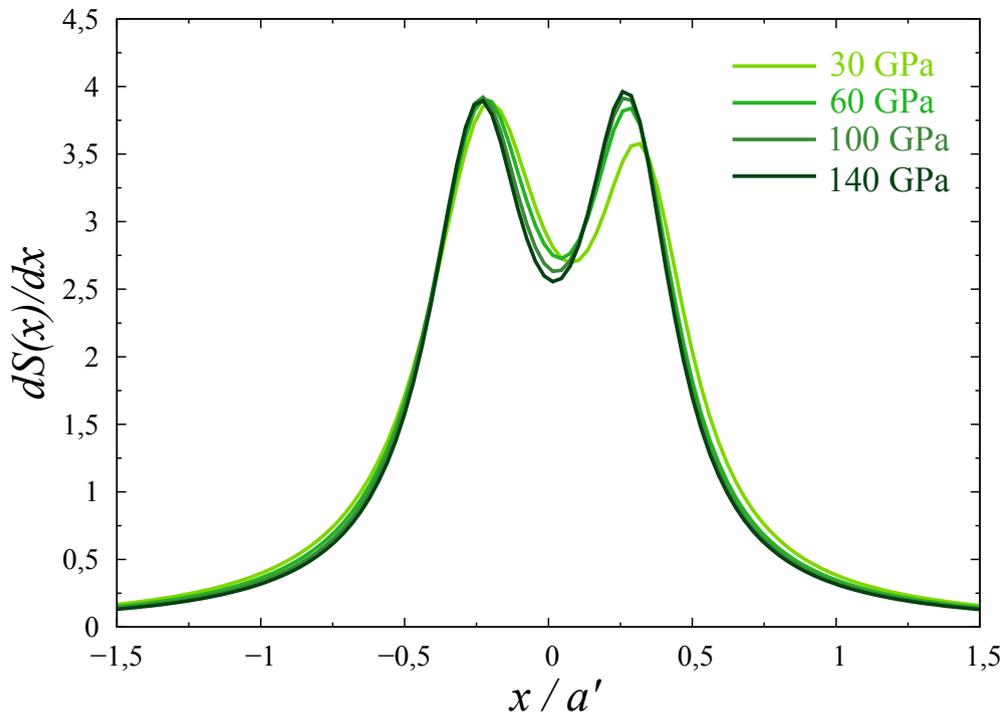


FIGURE 3.10 – Variation de la densité de vecteur de Burgers de la dislocation vis $[100]$ dans le plan (010) avec la pression. Les densité de Burgers sont tracées selon un axe x normalisé par a' , qui dans ce cas correspond au paramètre c , afin d'être comparées aux différentes pressions.

Sur la contrainte de Peierls

La contrainte de Peierls de la dislocation $[100]$ a été calculée dans les plans (010) et (001) à différentes pressions allant de 30 à 140 GPa, avec un pas de 10 GPa, en suivant la méthode utilisée à 30 GPa pour la dislocation $[100]$ (*cf* partie 3.1.2). Les résultats sont réunis figure 3.11.

Premièrement, au vu des barres d'erreur, les contraintes de Peierls obtenues peuvent être considérées indépendantes au sens de glissement de la dislocation. Deuxièmement, on observe une importante différence de contrainte entre les plans (010) et (001). Le plan (010) est le plan de glissement préférentiel de la dislocation $[100]$ de 30 à 140 GPa. Lorsque la pression augmente, les contraintes de Peierls augmentent quasi linéairement dans le plan (010).

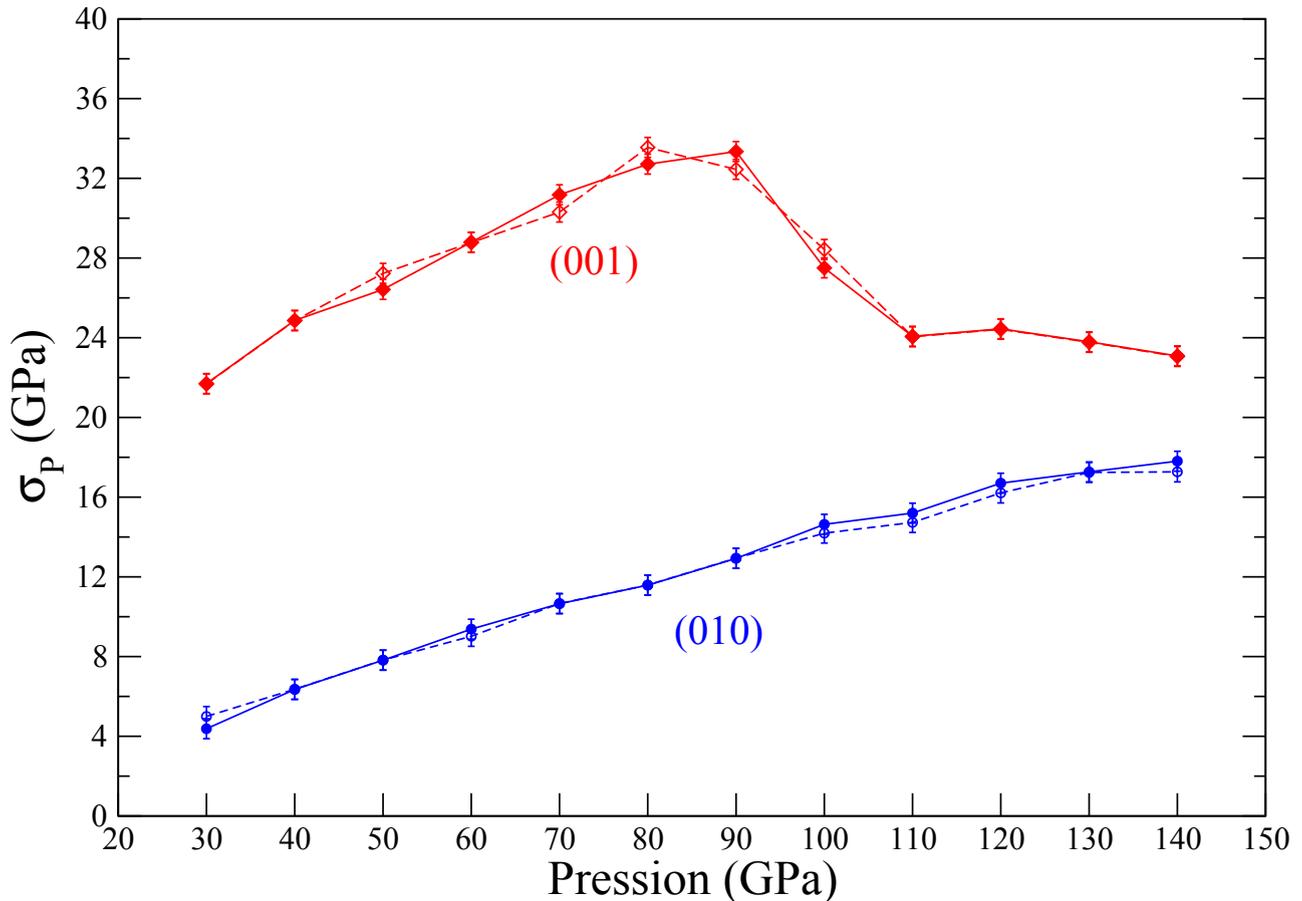


FIGURE 3.11 – Contraintes de Peierls de la dislocation (100) calculées dans les plans (010) et (001) à différentes pressions. Les symboles pleins réunis par des traits pleins représentent un sens de glissement, les symboles vides réunis par des traits en pointillés représentent le sens de glissement opposé.

Dans le plan (001), les contraintes augmentent linéairement jusqu'à une pression de 80 GPa, puis diminuent. Cette diminution de la contrainte s'explique en observant le mode de glissement de la dislocation. La figure 3.12 représente les cartes de déplacements différentiels à $P = 30$ GPa et $P = 120$ GPa avant et après glissement de la dislocation. À basse pression, le glissement est orienté dans le plan (001). À pression plus importante, la structure finale a dévié, et la dislocation présente des composantes d'étalement dans le plan (011). Cette observation explique la baisse des contraintes dans le plan (001) observée à haute pression (figure 3.11), relative à un mécanisme de glissement différent.

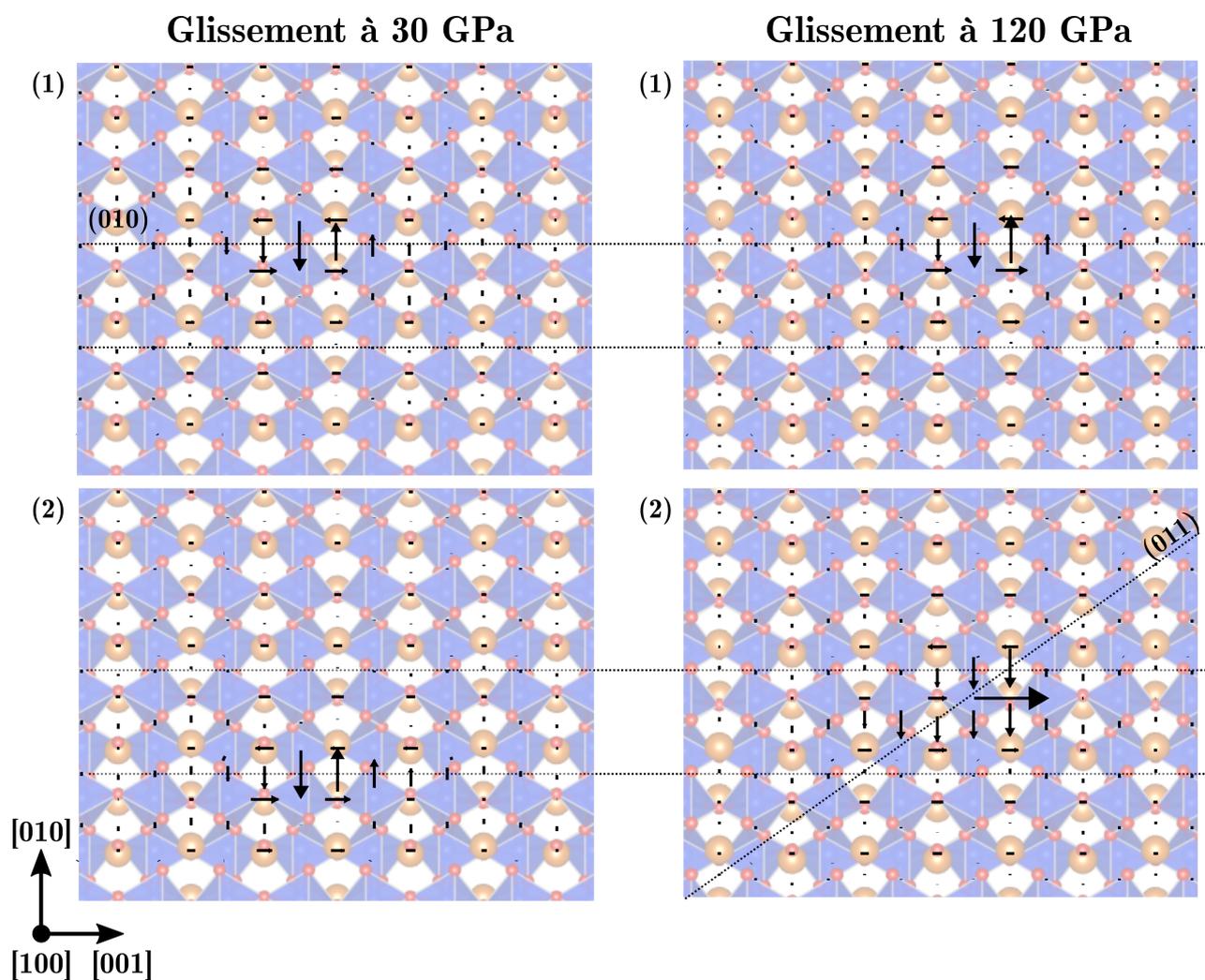


FIGURE 3.12 – Carte de déplacement différentiel représentant le glissement de la dislocation $[100]$ à 30 et 120 GPa. La configuration (1) correspond à la dislocation avant glissement, (2) à la dislocation le glissement engendré par un cisaillement dans le plan (001).

3.2 Dislocation vis $[010]$

3.2.1 Structure à 30 GPa

Lors des calculs atomistiques, deux différents cœurs de dislocation peuvent être obtenus selon la condition d'introduction initiale du champ de déplacement élastique isotrope de la dislocation avant relaxation de la cellule de calcul. Les deux structures possibles, visualisées dans le plan (100) , sont représentées figure 3.13. Un calcul d'énergie de dislocation est réalisé, afin de déterminer la structure dont l'énergie de cœur est la plus basse. Ce type de calcul est réalisé sur une cellule de dipôles 2D (*cf* partie 2.3.2), afin de comparer les énergies de deux cellules contenant un dipôle des deux types de dislocations. Les énergies des cellules sont directement comparées, en considérant que les interactions élastiques dans les deux cellules sont identiques. La dislocation dont l'énergie est la plus basse est la dislocation représentée figure 3.13(a). Par ailleurs, la structure métastable à 30 GPa, représentée figure 3.13(b), n'existe plus à une pression supérieure à 40 GPa. Dans la suite, seule la structure d'énergie de cœur la plus faible est décrite.

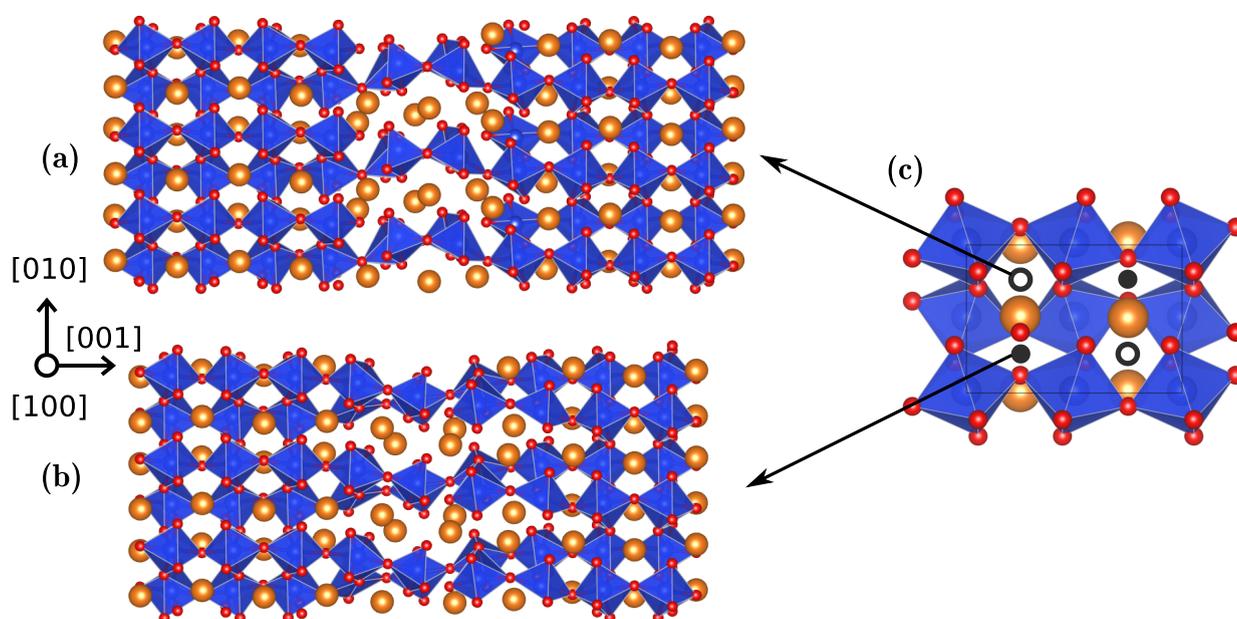


FIGURE 3.13 – Structures d'équilibre de la dislocation vis $[010]$ à 30 GPa. (a) Structure stable traitée dans les résultats, (b) structure métastable, et (c) positions correspondantes dans la maille cristalline.

Contrairement à la dislocation $[100]$, la dislocation $[010]$ n'est pas polarisée, et peut être positionnée indifféremment du sens de \vec{b} . La configuration atomique de la dislocation vis $[010]$ à 30 GPa est représentée figure 3.14 dans les plans (010) et (001) . Le cœur de dislocation est marqué par la présence de deux paires d'octaèdres reliés par leurs arrêtes, contrairement à la dislocation vis $[100]$ où il ne s'agissait que d'une paire d'octaèdres. On observe aussi dans cette dislocation un défaut de coordinence d'un des atomes de Silicium localisé dans le cœur. Un atome de Silicium du cœur a cinq atomes d'oxygène pour premiers voisins, au lieu de six.

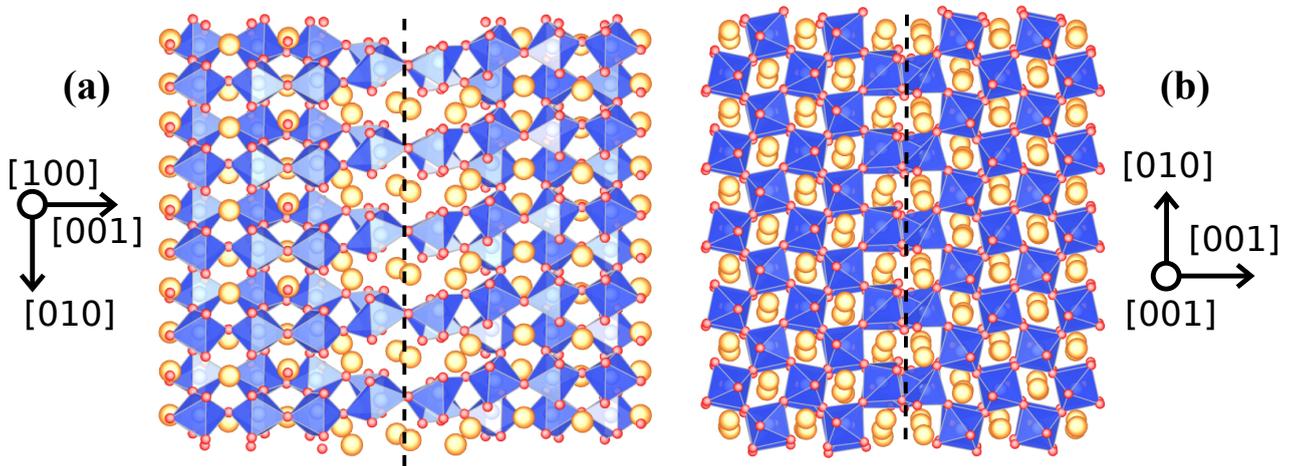


FIGURE 3.14 – Configuration atomique de la dislocation vis $[010]$ à 30 GPa, (a) vue dans le plan (100) (b) vue dans le plan (001) . Les traits en pointillé représentent la ligne de dislocation.

La carte de déplacement différentiel de la dislocation $[010]$ est représentée figure 3.15. Les déplacements différentiels les plus importants sont localisés dans le plan (100) . Le désaccord atomique peut être tracé dans le plan (100) , en utilisant les paires de Si-Si et Mg-Mg successivement alignées le long des deux rangées d'atomes qui entourent le cœur de la dislocation dans le plan (100) (figure 3.15).

Le désaccord atomique dans le plan (100) , représenté figure 3.16(a), montre un cœur non symétrique, avec un épaulement proche du centre. Une fonction de désaccord $S(x)$ (eq. (2.17)) est ajustée sur le désaccord atomique. La fonction de désaccord correspond à deux fonctions arctan, afin de reproduire l'épaulement observé sur le désaccord atomique (soit $N = 2$ dans l'expression (2.17)). Les paramètres obtenus en ajustant la fonction sont $e_1 = 0,81$, $e_2 = 2,5$ et $\alpha_1 = 0,24$. Comme on peut le voir sur la dérivée de la fonction de désaccord figure 3.16(b), la dislocation est séparée en deux fractionnelles, de poids et d'étalement différents. L'étalement de la dislocation, défini comme la largeur à mi-hauteur de la densité de vecteur de Burgers (figure 3.16(b)), correspond à $\xi = 8,9 \text{ \AA}$, soit $1,3 \cdot c$.

Dans les plans (001) , le désaccord atomique peut être tracé entre des rangées d'atomes de Si-Si

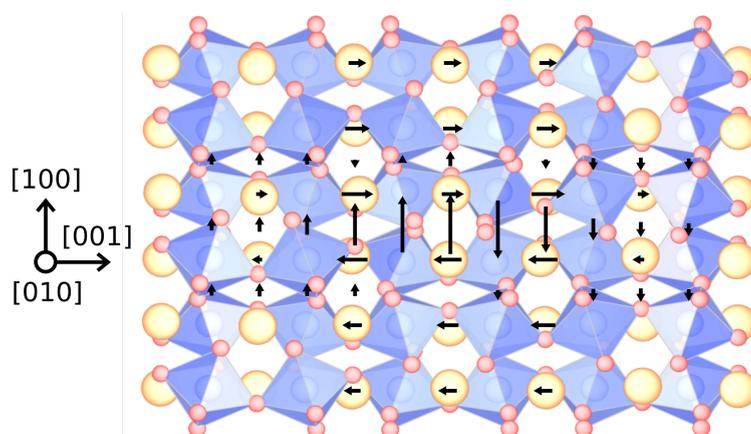


FIGURE 3.15 – Carte de déplacement différentiel vis des couples Mg-Mg et Si-Si de la dislocation vis $[100]$, vue selon l'axe $[010]$. Les déplacements différentiels sont superposés à une image de la dislocation relaxée. Les atomes de Mg sont représentés en jaune, les Si en bleu et les oxygènes en rouge.

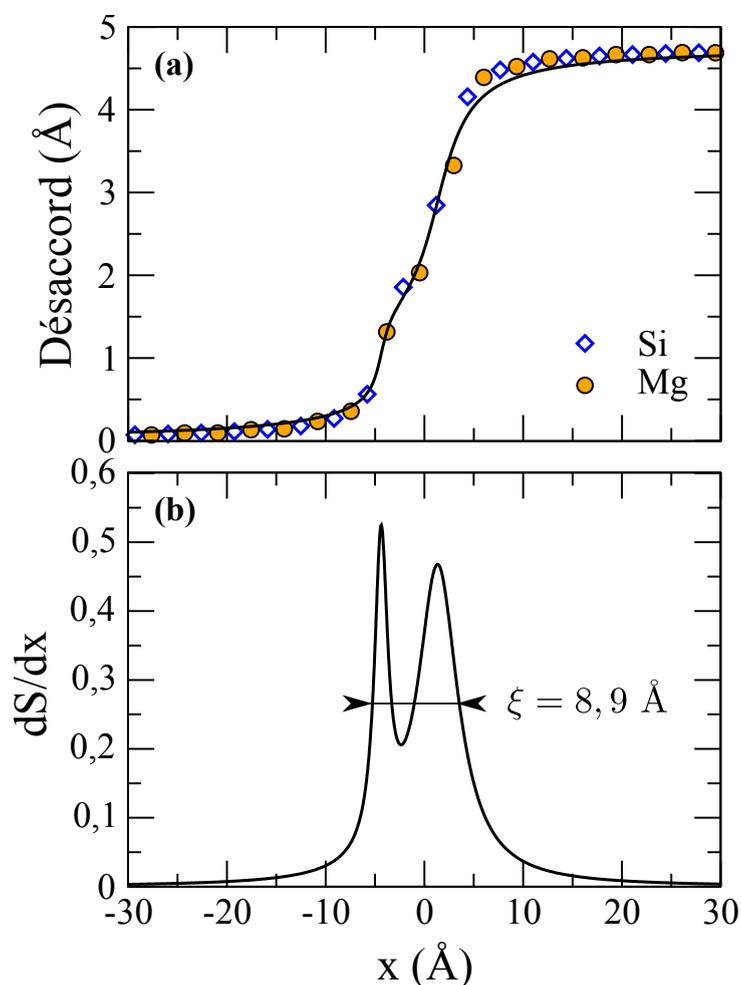


FIGURE 3.16 – Structure de la dislocation vis $[010]$ dans le plan (100) à 30 GPa, calculée à partir du déplacement différentiel des couples Mg-Mg et Si-Si. **(a)** Les points correspondent au désaccord atomique, la fonction continue est une fonction de désaccord ajustée au désaccord atomique. **(b)** Densité de vecteur de Burgers, définie comme la dérivée de la fonction de désaccord.

ou des rangées d'atomes Mg-Mg (figure 3.15). Le désaccord atomique dans le plan (001) est représenté figure 3.17. Tout comme pour la dislocation $[100]$ dans le plan (001), ce désaccord abrupt témoigne d'un étalement quasi-inexistant dans le plan (001). L'étalement de la dislocation correspond à $\xi = 0,57 \text{ \AA}$, soit $0,12 \cdot a$.

La comparaison des désaccords atomiques de la dislocation $[010]$ dans les plans (100) et (001) montre que la dislocation est étalée dans le plan (100).

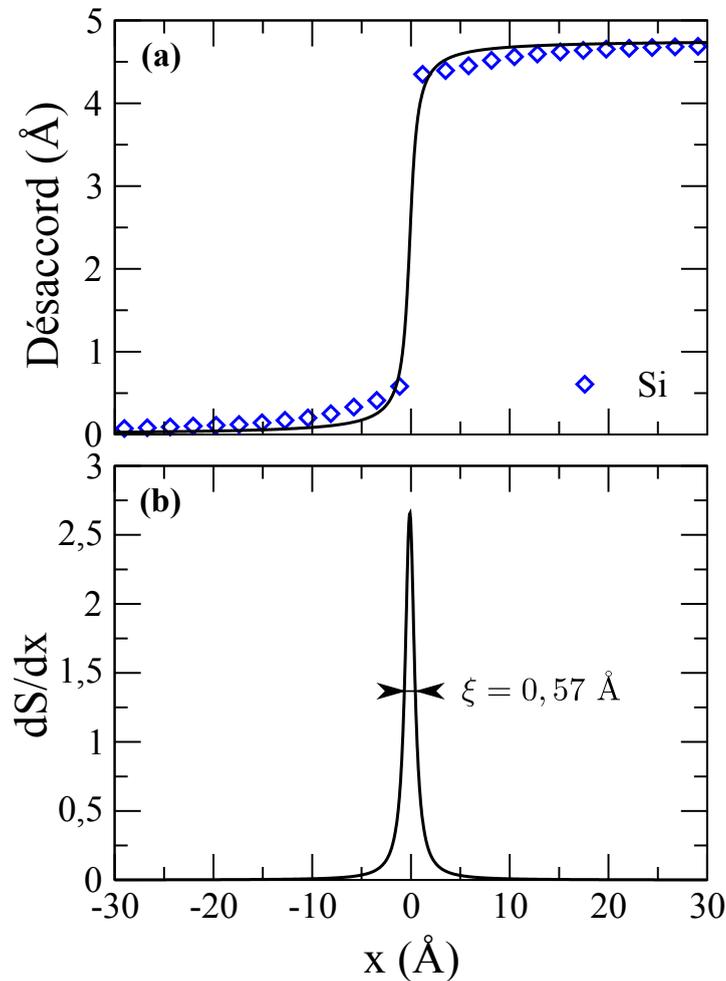


FIGURE 3.17 – Structure de la dislocation vis $[010]$ dans le plan (001) à 30 GPa, calculée à partir du déplacement différentiel des couples Si-Si. (a) Les points correspondent au désaccord atomique, la fonction continue est une fonction de désaccord ajustée au désaccord atomique.

(b) Densité de vecteur de Burgers défini comme la dérivée de la fonction de désaccord.

3.2.2 Contrainte de Peierls

La contrainte de Peierls de la dislocation $[010]$ est estimée dans les plans (100) et (001). La démarche est identique à celle appliquée à la dislocation $[100]$, décrite partie 3.1.2. Dans le plan (100) la contrainte trouvée est de 4,5 GPa et 11,8 GPa selon le sens de glissement de la

dislocation. L'écart de contrainte dans le plan (010) dépasse l'incertitude de 0,5 GPa associée à ce type de calcul. Dans le plan (001), la contrainte trouvée est de 16,2 et 17,3 GPa selon le sens de glissement. L'écart entre les deux contraintes est compris dans les barres d'incertitudes de 0,5 GPa. La contrainte nécessaire au glissement de la dislocation $[010]$ est plus basse dans le plan (100). Ce résultat est là aussi cohérent avec l'étalement observé de la dislocation $[010]$, plus important dans le plan (100) que dans le plan (001).

3.2.3 Effet de la pression

Sur la structure de dislocation

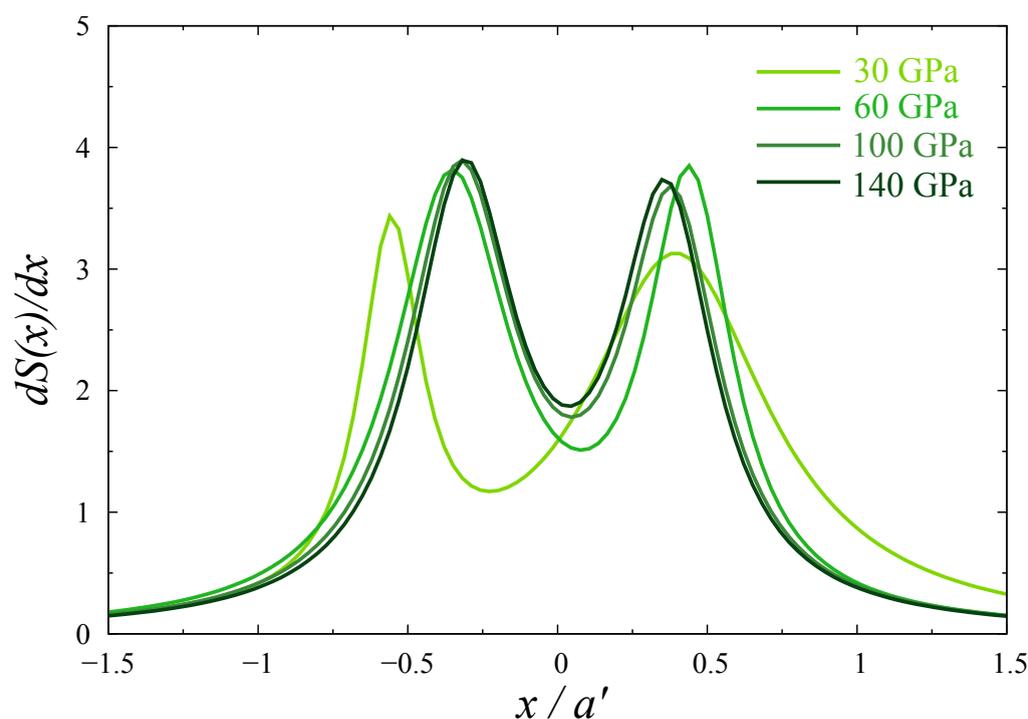


FIGURE 3.18 – Variation de la densité de vecteur de Burgers de la dislocation $[010]$ dans le plan (100) avec la pression. Les densités de vecteur de Burgers sont tracés selon un axe x normalisé par a' afin d'être comparés.

Tout comme pour la dislocation $[100]$, la dislocation vis $[010]$ est modélisée à différentes pressions allant de 30 à 140 GPa. Au delà de 40 GPa, il n'existe qu'une structure possible pour la dislocation, localisée dans le réseau par les cercles vides figure 3.13(c), comme c'est le cas de la structure stable à 30 GPa. Avec la pression, le cœur de dislocation à 30 GPa subit une modification puis se stabilise à 60 GPa, comme on peut l'observer sur la densité de vecteur de Burgers représentée pour différentes valeurs de pression figure 3.18. La structure à 60 GPa est par la suite conservée jusqu'à 140 GPa. Bien que la pression ait pour effet d'augmenter les distorsions des

octaèdres (*cf* partie 1.2), on observe une symétrisation du cœur de dislocation avec la pression. Ces changements s'observent directement dans une représentation de la structure de dislocation dans (100) (figure 3.20), où le défaut de coordinence observé à 30 GPa disparaît (la distorsion des octaèdres dans le cœur est moins importante), et où la position des Mg au centre du cœur est alignée selon $[100]$.

Le désaccord atomique de la dislocation à 60 GPa dans le plan (010) est représenté figure 3.19, la structure est symétrique et plus compacte qu'à 30 GPa (à 60 GPa, $\xi = 8,1 \text{ \AA}$, soit $1,2 \cdot c$ au lieu de $1,3 \cdot c$ à 30 GPa). Entre 60 et 140 GPa, l'étalement de la dislocation dans le plan (010) garde la même proportion de c , soit $\xi = 1,2 \cdot c$. La dislocation $[010]$ conserve un étalement plus important que la dislocation $[100]$.

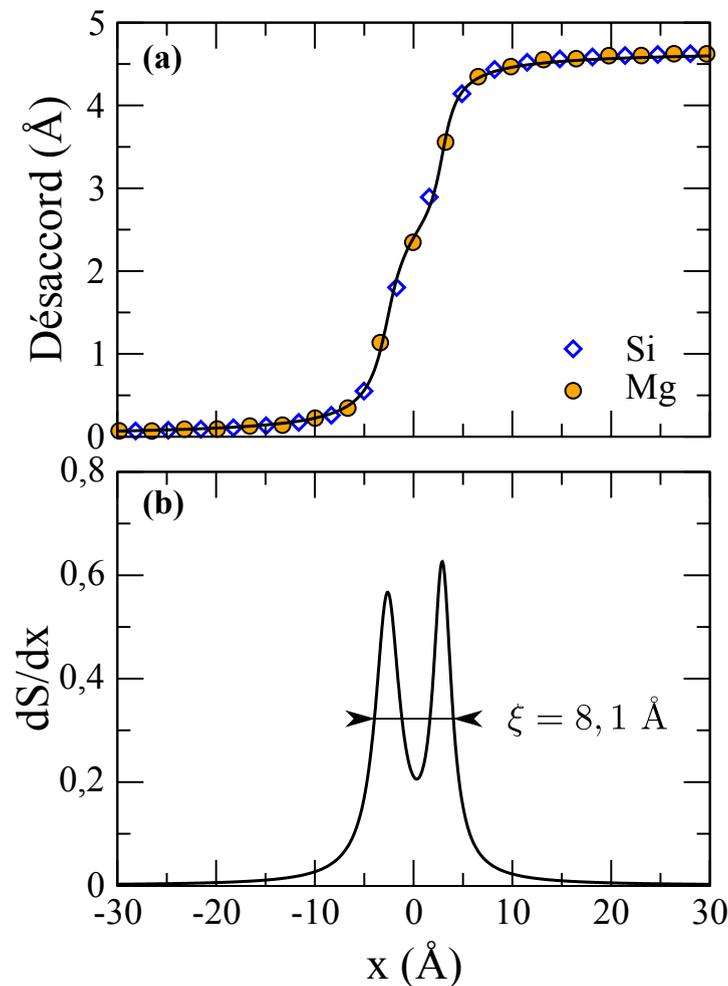
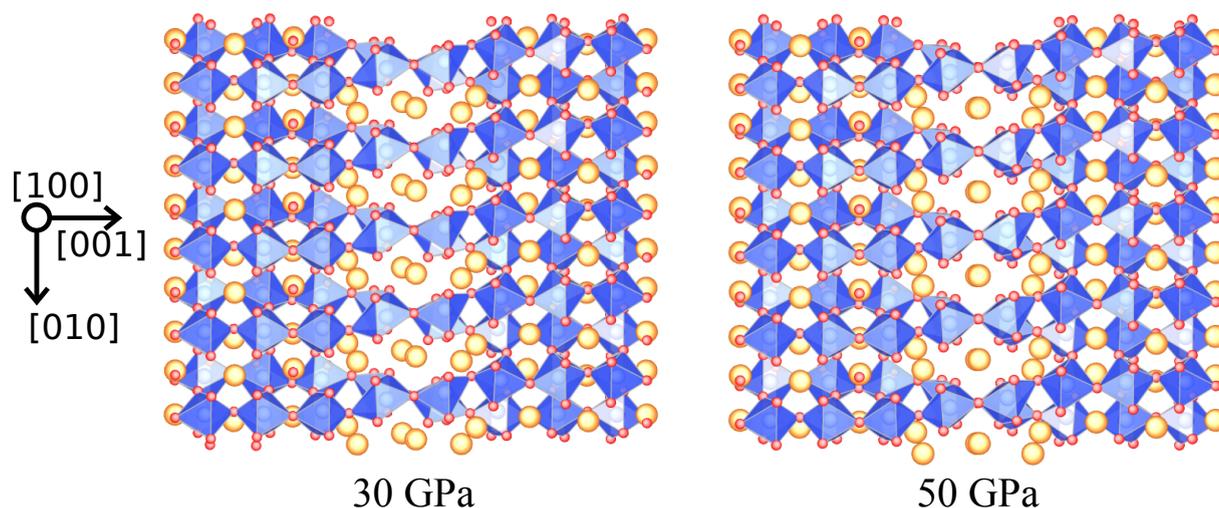


FIGURE 3.19 – Structure de la dislocation vis $[010]$ dans le plan (100) à 50 GPa, calculée à partir du déplacement différentiel des couples Mg-Mg et Si-Si. (a) Les points correspondent au désaccord atomique, la fonction continue est une fonction de désaccord ajustée au désaccord atomique. (b) Densité de vecteur de Burgers, calculé comme la dérivée de la fonction de désaccord.

FIGURE 3.20 – Vue la dislocation vis $[010]$ dans le plan (100) à 30 et 50 GPa

Sur la contrainte de Peierls

L'effet de la pression est étudié sur les contraintes de Peierls dans les plans (100) et (001) . Les résultats obtenus sont représentés figure 3.21. Deux observations générales peuvent être faites. Premièrement, les contraintes de Peierls dans les plans (100) sont nettement inférieures à celles obtenues dans les plans (001) , et ce à toutes les pressions. Ce résultat est cohérent avec les résultats obtenus sur les structures de cœur. Deuxièmement, les contraintes de Peierls augmentent avec la pression, de façon quasi linéaire, pour les deux plans.

Une troisième observation peut être faite sur la figure 3.21, aux pressions les plus faibles (30-40 GPa), sur le glissement de la dislocation dans le plan (100) . On remarque une forte dépendance de la contrainte de Peierls au sens de glissement. Cet effet est très marqué dans le plan (100) à 30 GPa, pour lequel la contrainte varie de 4,5 GPa à 11,8 GPa. Un écart de contrainte est aussi observé à 40 GPa, mais cette fois-ci dans le sens inverse (variation de contrainte de 8 à 11 GPa). L'étude de la contrainte de Peierls entre 30 et 40 GPa réalisée dans des conditions très proches, en augmentant la pression par pas de 1 GPa, montre qu'il n'existe pas de systématique entre la contrainte de Peierls estimée et le sens de glissement. On rappelle qu'en dessous de 40 GPa, comme il a été décrit dans l'étude de la structure de dislocation vis $[010]$ à 30 GPa, il existe une structure métastable de la dislocation $[010]$ le long de son chemin de glissement (figure 3.13). Dans les calculs de cisaillement entre $P=30$ et $P=40$ GPa qui mènent à de faibles contraintes de Peierls, on observe l'apparition de la configuration metastable décrite figure 3.13 parmi les configurations non relaxées générées par l'algorithme de gradient conjugué. L'apparition de la structure métastable lors du "glissement" est proposée comme explication du glissement à faible

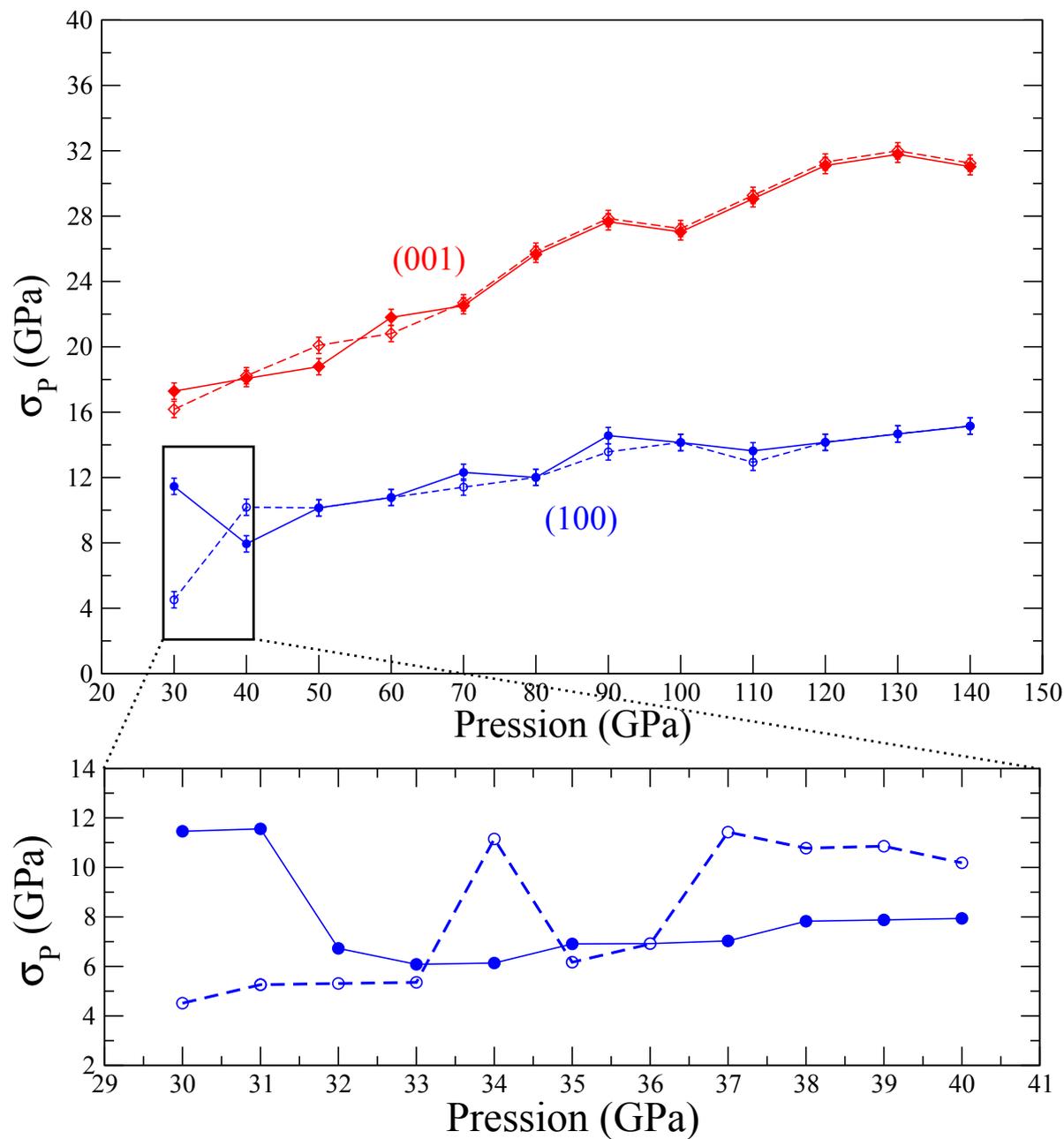


FIGURE 3.21 – Contraintes de Peierls de la dislocation $[010]$ calculées dans les plans (100) et (001) , en fonction de la pression. Les symboles pleins réunis par des traits pleins représentent un sens de glissement, les symboles vides réunis par des traits en pointillé représentent le sens de glissement opposé.

contrainte dans le plan (100), entre 30 et 40 GPa.

Au delà de 40 GPa, il n'existe plus qu'une seule configuration d'équilibre, et le glissement est plus simple. À $P \geq 50$ GPa, de même que le cœur de dislocation devient symétrique (figure 3.18), et que la structure métastable disparaît, la contrainte de Peierls devient indépendante du sens de glissement.

3.3 Dislocation vis $[001]$

3.3.1 Dissociation

Tout comme pour les dislocations $[100]$ et $[010]$, la dislocation est insérée à partir du champ isotrope d'une dislocation simple. Les dislocations $[001]$ obtenues après minimisation de l'énergie du système dépendent fortement du centrage initial du champ de déplacement élastique. La figure 3.22 représente trois cartes de déplacement différentiel de la dislocation $[001]$, calculées à partir des couples premiers voisins Si-Si et Mg-Mg. Ces dislocations sont obtenues à partir de conditions initiales différentes. Les trois cas sélectionnés sont représentatifs des résultats obtenus : les dislocations obtenues sont systématiquement dissociées, comme on peut le voir à partir des composantes de déplacements différentiels constantes au cœur de la dislocation. La dislocation $[001]$ peut s'étaler dans trois plans : les plans (010) , (100) et $\langle 110 \rangle$. Parmi les configurations obtenues figure 3.22, on observe que les dislocations ne sont pas contraintes à s'étaler dans un seul plan à la fois.

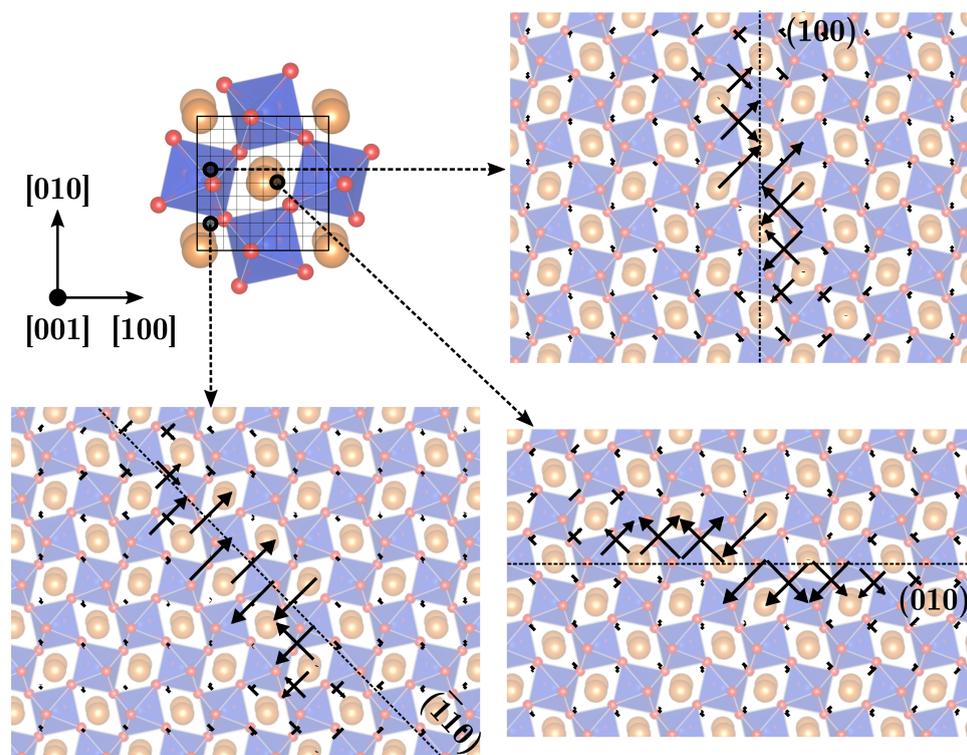


FIGURE 3.22 – Cartes de déplacements différentiels pour différentes configurations obtenues après relaxation du champ de déplacement élastique isotrope d'une dislocation vis de vecteur de Burgers $[001]$. La position initiale du champ de déplacement élastique est représenté dans chaque cas.

La dissociation de la dislocation $[001]$ observée dans les calculs atomistiques est confirmée par les énergies de défaut d'empilement généralisé selon l'axe $[001]$, représentées dans les plans (100), (010) et (110) figure 3.23 (où γ -lignes - une description de la méthode de calcul des énergies de défaut d'empilement peut être trouvée dans [Gouriet *et al.* 2014]). Les γ -lignes présentent un défaut d'empilement métastable en $\frac{1}{2}[001]$ dans les trois plans. Ce résultat indique qu'il existe une structure cristalline métastable. Le cisaillement induit par la dislocation est susceptible de stabiliser localement cette structure cristalline métastable. Les γ -lignes sont relativement proches dans les trois plans, en particulier pour les plans (110) et (010). La γ -ligne dans le plan (110) présente l'énergie la plus basse à toutes les pressions, et celle dans le plan (100) l'énergie la plus élevée.

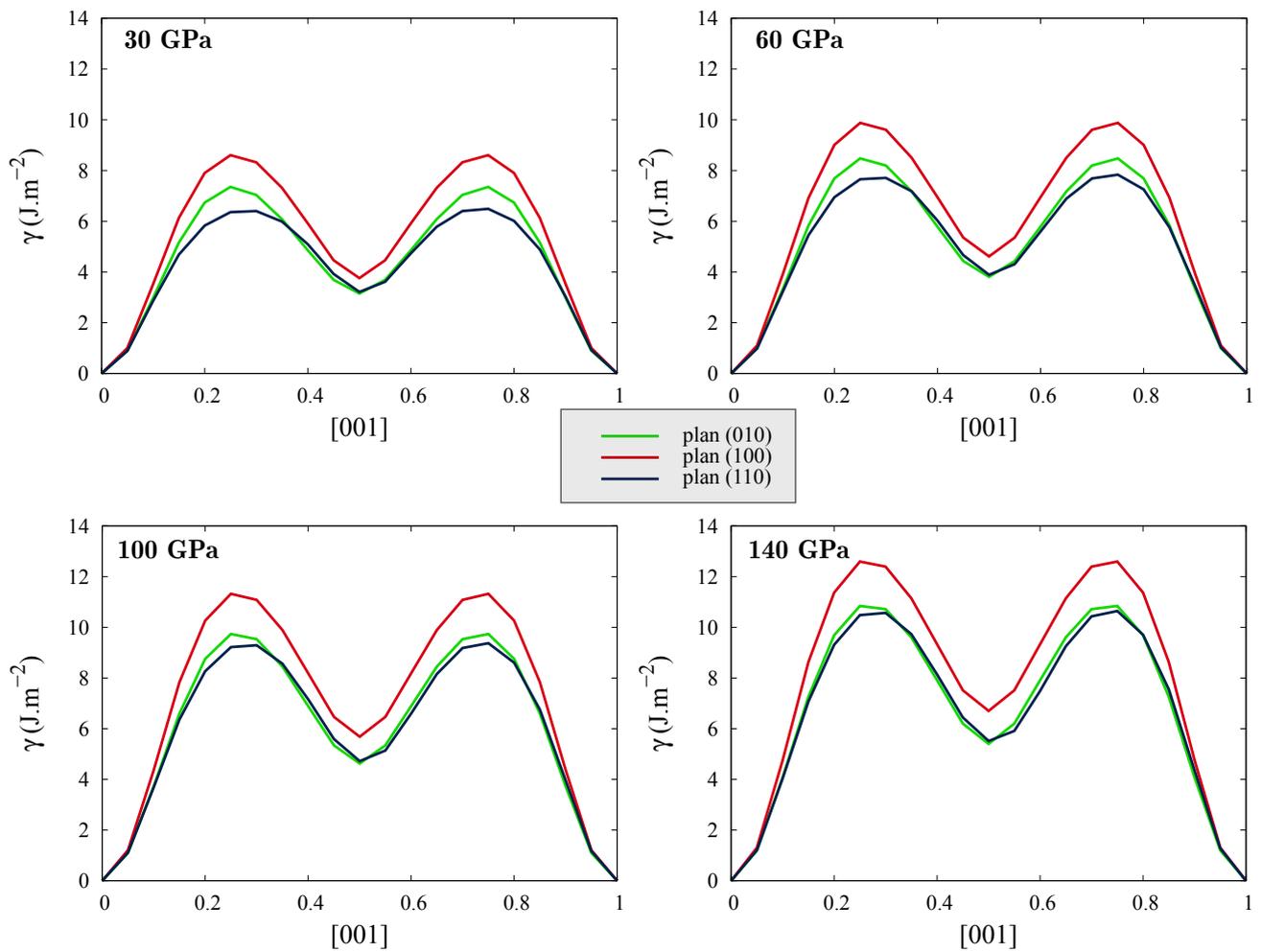


FIGURE 3.23 – Énergie de défaut d'empilement généralisé selon l'axe $[001]$, calculée à 30, 60, 100 et 140 GPa dans les plans (010), (100) et (110).

3.3.2 Caractérisation de la structure dans les plans (100) , (010) et (110)

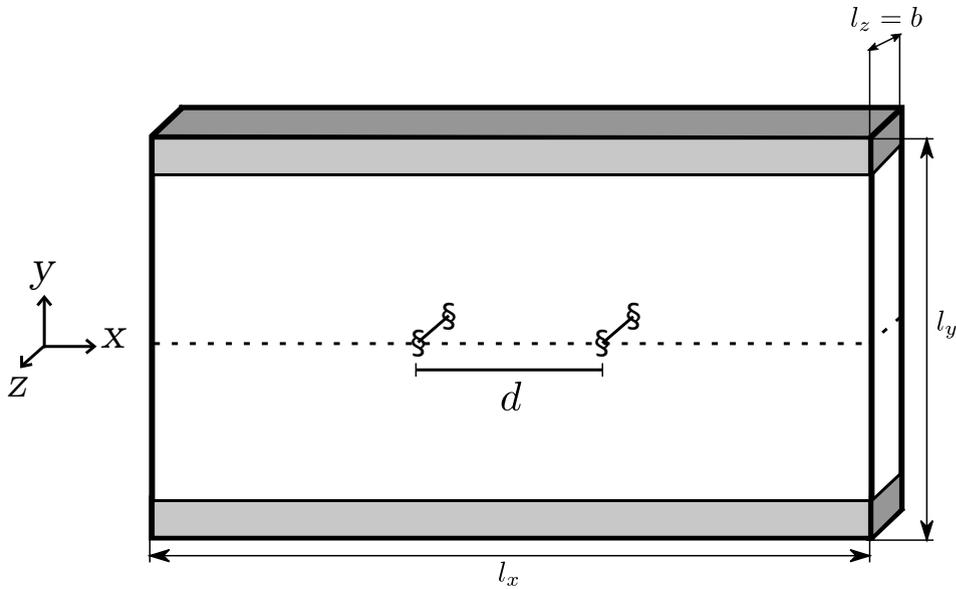


FIGURE 3.24 – Géométrie employée pour l'étude des structures de dislocation vis $[001]$. La dislocation est au centre de la boîte, son défaut d'empilement, de longueur d , est dans le plan y . La zone grisée correspond à une zone "gelée", contenant des atomes aux coordonnées fixées lors du calcul de relaxation.

La dissociation de la dislocation $[001]$ étant avérée, la dislocation est initialement insérée dans les cellules de calcul à partir du déplacement élastique isotrope de deux dislocations partielles, espacées d'une distance d (figure 3.24). La dislocation $[001]$ est modélisée dans les trois plans (010) , (100) et (110) .

Le choix de la valeur de d est basé sur un calcul élastique. L'énergie par unité de ligne W d'une dislocation infiniment droite dissociée peut être exprimée en fonction de d comme la somme de l'énergie de son défaut d'empilement, et de l'énergie due à l'interaction entre les dislocations partielles. Dans le cas d'une dislocation dissociée en deux partielles, on peut écrire [Hirth & Lothe 1982] :

$$W = -\frac{\mu b_1 b_2}{2\pi} \ln \left(\frac{d}{R_a} \right) + \langle \gamma \rangle d \quad (3.2)$$

où b_1 et b_2 sont les vecteurs de Burgers des deux dislocations partielles, R_a une constante d'intégration indéterminée et $\langle \gamma \rangle$ l'énergie moyenne du défaut d'empilement. L'énergie W par unité de ligne est représentée figure 3.25, afin d'illustrer les deux régimes possibles décrits par l'élasticité. Les deux régimes se situent autour du cas où W est minimal, pour $d = d_{eq}$. Dans le régime où $d < d_{eq}$, le terme 1 de l'équation (3.2) correspondant à la répulsion des deux dislocations domine. Dans le régime où $d > d_{eq}$, le terme 2 de l'équation (3.2) correspondant à la minimisation de l'énergie du défaut d'empilement domine. La distance d'équilibre entre partielle

d_{eq} , définie pour $dW/dd = 0$, correspond à :

$$d_{eq} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi \langle \gamma \rangle} \quad (3.3)$$

Un calcul basé sur la valeur des modules de cisaillement (*cf* table 2.2, $\mu_{[001]} = 212$ GPa), et en considérant $\langle \gamma \rangle$ équivalent aux énergie de défaut d'empilement γ_{GSF} (figure 3.23, en $\frac{1}{2}[001]$ $\gamma_{GSF} = 3,15$ J.m⁻² dans (010) et (110), et $\gamma_{GSF} = 3,8$ J.m⁻² dans (100)), permet d'estimer des valeurs de d_{eq} comprises entre 10 et 12 Å pour la dislocation $[001]$ dans les plans (100), (010) et (110).

Dans les calculs atomistiques, les dislocations sont insérées avec $d = 16$ Å, valeur proche des résultats du calcul élastique. Les dislocations obtenues après minimisation des cellules de calcul, visualisées dans leur plan de dissociation, sont représentées figure 3.26. On peut observer la structure des défauts d'empilement dans les plans (010), (100) et (110). Dans ces défauts d'empilement, les atomes de magnésium sont alignés selon la normale au plan de dissociation. La présence des dislocations partielles est marquée par un défaut de coordinence des octaèdres SiO₆ dans les trois plans. Les déplacements différentiels de la dislocation $[001]$ peuvent être

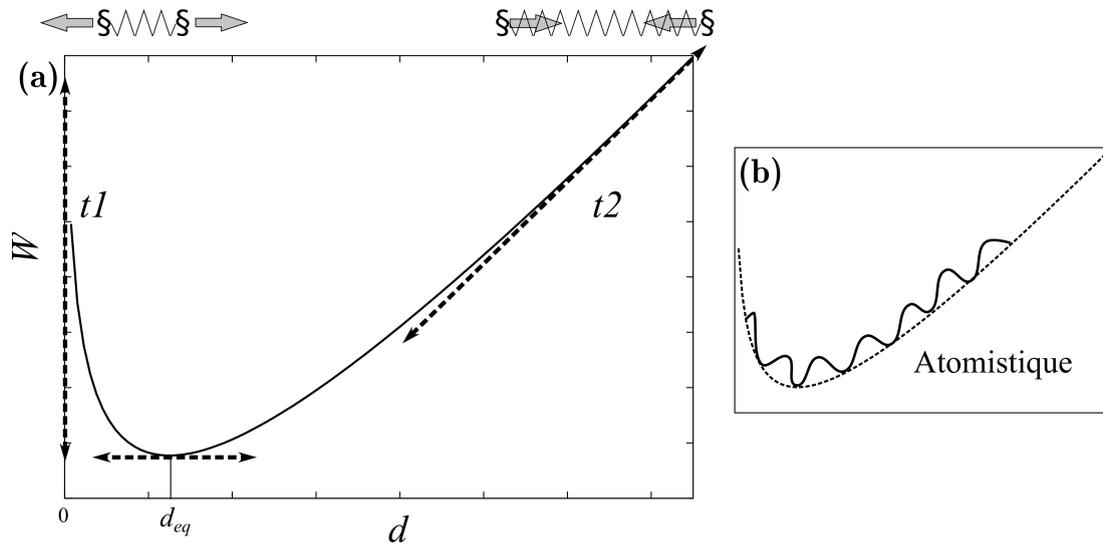


FIGURE 3.25 – Représentation de l'énergie de ligne d'une dislocation infiniment droite dissociée en deux partielles en fonction de la distance entre partielles, basée sur l'expression (3.2). (a) Comportement purement élastique (b) Comportement supposé dans un système atomistique, superposé au comportement élastique en pointillé.

décrits par les couples Mg-Mg situés de part et d'autre des plans de dissociation des dislocations (figure 3.26). Le résultat est représenté sur les cartes de déplacement différentiel figure 3.27. On y observe que l'essentiel des déplacements différentiels sont confinés aux plans dans lesquels les dislocations sont initialement insérées.

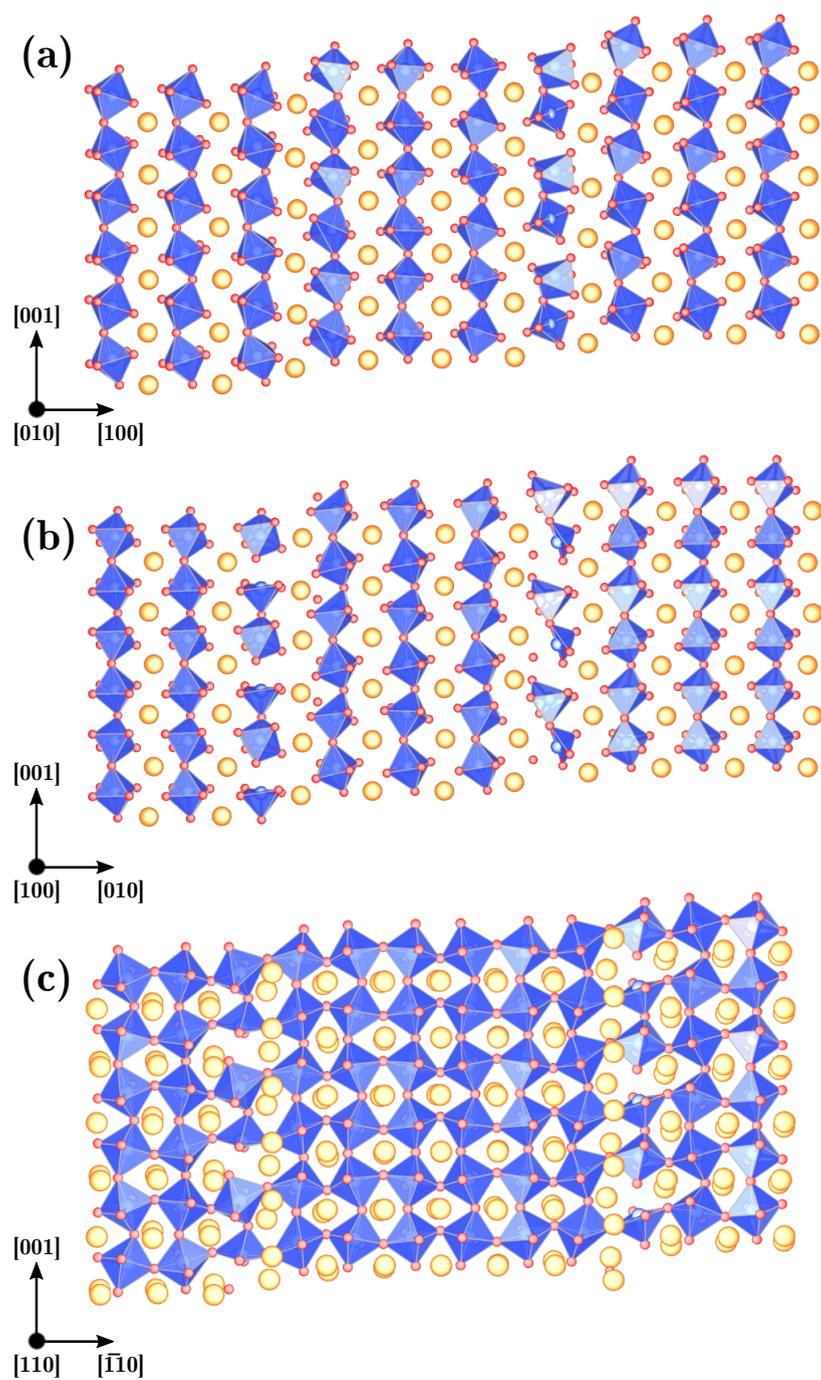


FIGURE 3.26 – Dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (a) (010) , (b) (100) , (c) (110) . La dislocation est dans chaque cas observée dans son plan de dissociation. Les atomes de Mg sont représentés en jaune, les Si en bleu et les oxygènes en rouge.

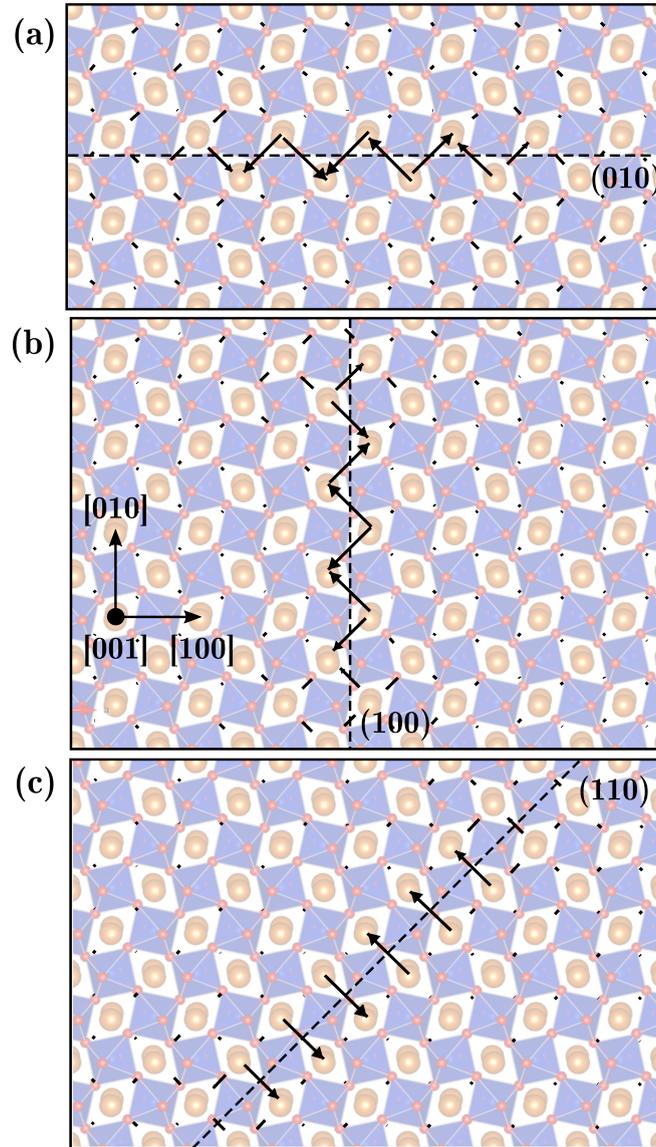


FIGURE 3.27 – Carte de déplacement différentiel de couples Mg-Mg de la dislocation vis $[001]$ à 30 GPa vue selon l'axe $[001]$. La dislocation $[001]$ peut s'étaler (a) dans le plan (010) (b) dans le plan (100) et (c) dans le plan (110) . Les déplacements différentiels sont superposés à la structure du cristal parfait. Les atomes de Mg sont représentés en jaune, les Si en bleu et les oxygènes en rouge.

Les désaccords atomiques de la dislocation $[001]$ sont représentés figure 3.28 dans les plans (010) , (100) et (110) . Les désaccords atomiques mettent en évidence la dissociation de la dislocation dans les trois plans. Les désaccords atomiques sont ajustés par une fonction de désaccord (expression (2.4.1)), avec $N=2$. Les dérivées de fonction de désaccord obtenues sont constituées dans chaque cas de deux fonctions lorentziennes entre lesquelles la densité de vecteur de Burgers est nulle, ce qui correspond au défaut d'empilement. L'étalement des partielles (paramètre e_i de l'équation (2.4.1)) correspond à environ $1,5 \text{ \AA}$ pour les trois plans. La distance entre partielles, notée d , se situe entre 16 et 20 \AA pour les trois cas représentés figure 3.23. Cette valeur est proche

de la valeur initialement choisie pour espacer le champ isotrope des dislocations partielles lors de la construction des cellules de calcul.

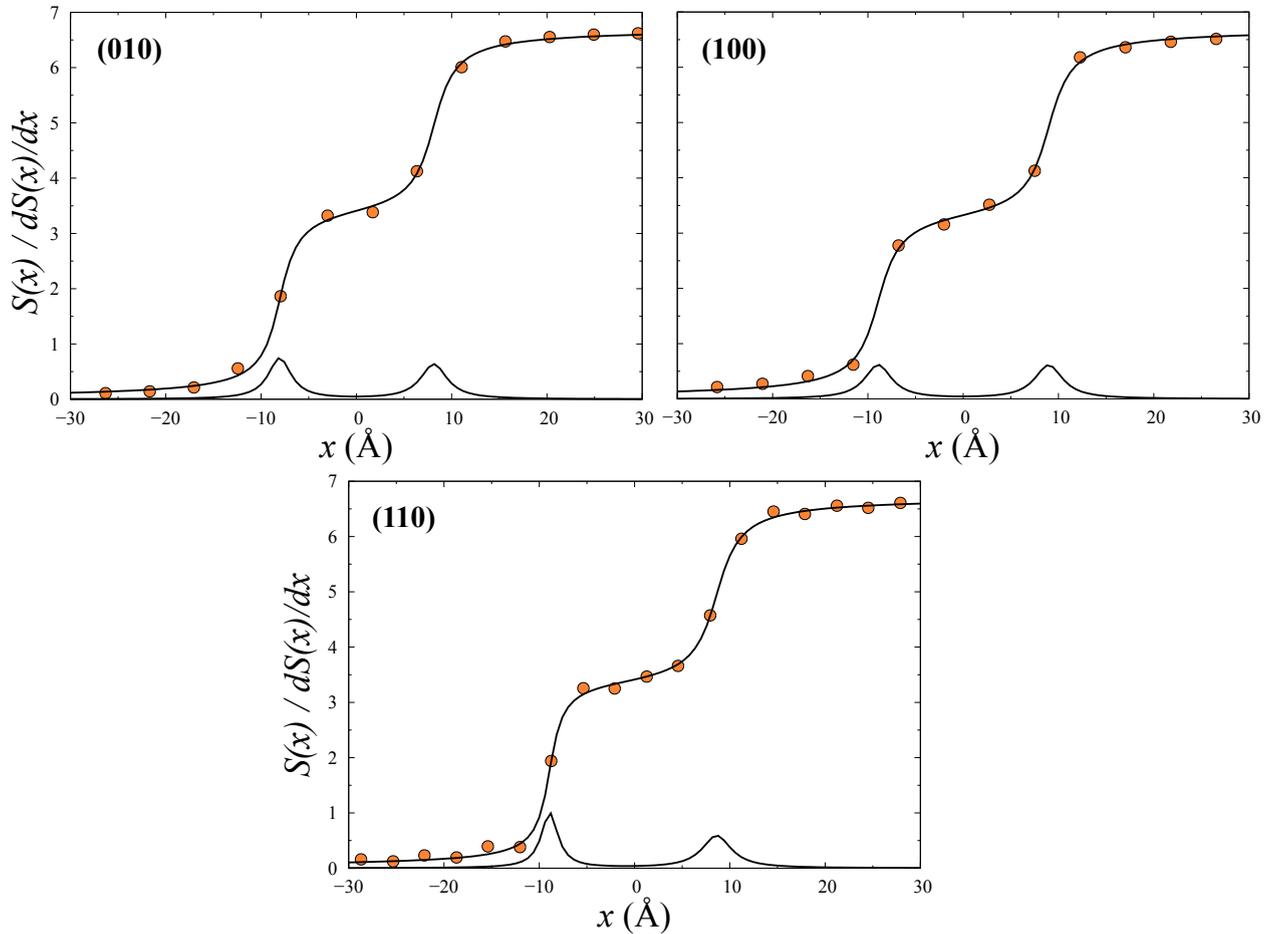


FIGURE 3.28 – Structure de la dislocation vis $[001]$ à 30 GPa prélevée sur les couples Mg-Mg. Dislocation étalée dans (a) (010) (b) (100) (c) (100). Les points correspondent au désaccord atomique. La fonction continue ajustée sur les points est une fonction de désaccord $S(x)$. Sa dérivée $dS(x)/dx$ est aussi représentée.

La figure 3.25(b) illustre l'énergie du système en atomistique. Cette figure illustre les barrières d'énergie que doit franchir une dislocation partielle pour faire varier d . Cette figure représente le fait qu'il est possible de stabiliser des dislocations dissociées pour des valeurs de d qui ne correspondent pas à la distance d'équilibre entre partielle pour laquelle l'énergie de la dislocation est minimale. Rien n'indique que les dislocations présentées jusqu'à présent (figures 3.26, 3.27 et 3.28) correspondent aux configurations d'énergies minimales.

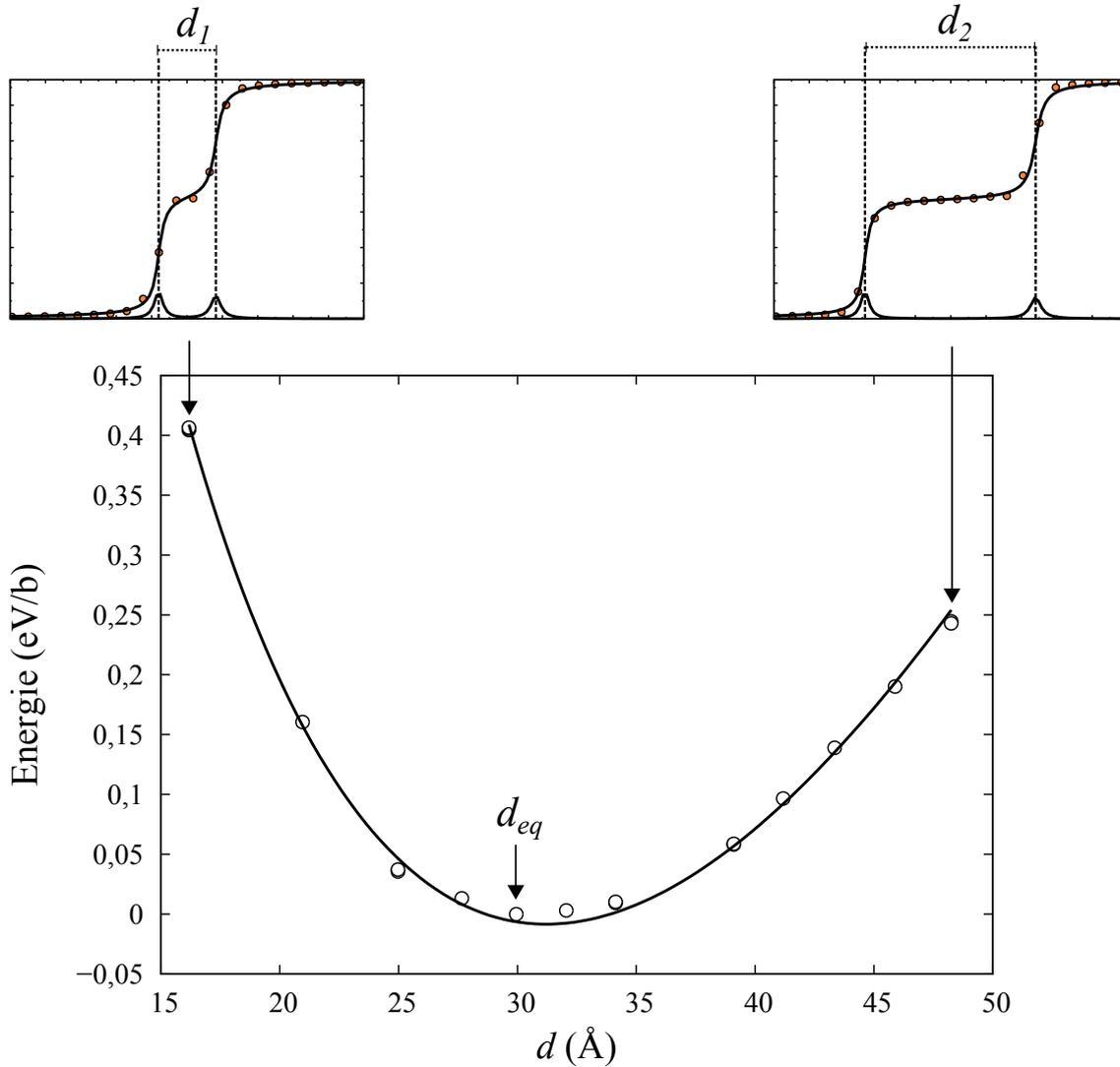
Détermination de d_{eq} dans le plan (010)

FIGURE 3.29 – Énergie de la dislocation $[001]$ dans (010) à 30 GPa, en fonction de la distance entre dislocations partielles (le 0 en ordonnée correspond à l'énergie de la dislocation de plus basse énergie). Les points correspondent aux résultats des calculs atomistiques, la courbe correspond à l'équation (3.2) ajustée.

La structure de la dislocation $[001]$ étalée dans le plan (010) est ici étudiée. Les hypothèses sur lesquelles reposent le calcul de d_{eq} en élasticité peuvent être remises en cause, en particulier l'assimilation de $\langle \gamma \rangle$ (expression (3.3)) à l'énergie obtenue par le calcul de défaut d'empilement généralisé γ_{GSF} (figure 3.23). Afin de déterminer d_{eq} , différentes configurations de la dislocation vis $[001]$ dans (010) sont modélisées en faisant varier d . Après relaxation de la cellule de calcul, les valeurs de d de la dislocation relaxée et les énergies correspondantes sont reportées. La figure 3.29 représente les énergies de dislocations dissociées pour différentes valeurs de d . L'énergie

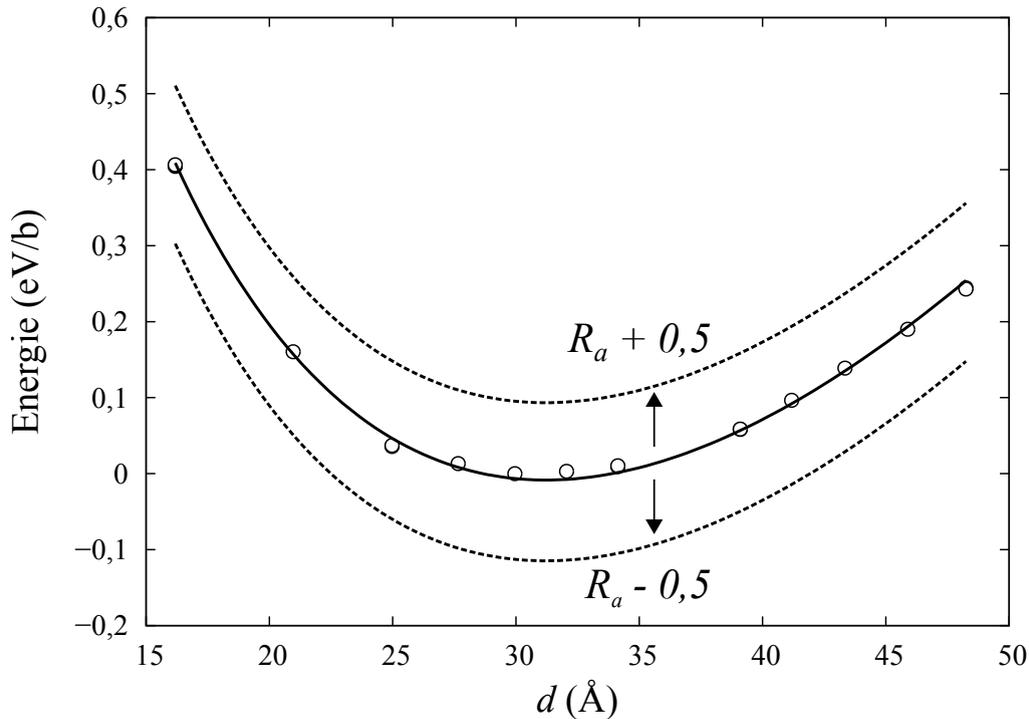


FIGURE 3.30 – Influence du paramètre R_a sur l'ajustement de l'expression (3.2) sur les résultats atomistiques. La valeur de $\langle \gamma \rangle$ est gardée constante sur les trois courbes.

de la dislocation est minimale pour une distance entre partielles $d_{eq} = 30 \text{ \AA}$, qui correspond pratiquement au triple de la valeur obtenue par le calcul élastique.

Pour comprendre l'écart des valeurs de d_{eq} obtenues en élasticité et par calcul atomistique, les valeurs obtenues par calcul atomistiques sont ajustées à l'aide de l'expression (3.2), figure 3.29. Les valeurs obtenues pour les paramètres d'ajustement sont $R_a = 11,4 \text{ \AA}$, et $\langle \gamma \rangle = 1,22 \text{ J.m}^{-2}$. La valeur de $\langle \gamma \rangle = 1,22 \text{ J.m}^{-2}$ obtenue est inférieure à l'énergie de défaut d'empilement métastable en $\frac{1}{2}[001]$ dans le plan (010) (figure 3.23), qui équivaut à environ $3,15 \text{ J.m}^{-2}$. Cette différence de valeur s'explique par deux raisons. Premièrement, l'énergie de défaut d'empilement généralisé est calculée en relaxant les atomes selon une seule direction de l'espace (direction normale au plan du défaut d'empilement, i.e. [Gouriet *et al.* 2014]). Il est donc logique qu'un défaut d'empilement généralisé calculé sans autoriser le système à relaxer complètement ait une énergie plus importante. Deuxièmement, la définition de la distance de défaut d'empilement utilisée ici dans le cas d'une dislocation dissociée ne prend pas en compte l'étalement des dislocations partielles. En prenant en compte cet étalement, d_{eq} aurait tendance à diminuer et se rapprocher de la valeur élastique.

La variation du paramètre R_a n'a pas d'influence sur la valeur de $\langle \gamma \rangle$ obtenue en se servant d'un ajustement de l'expression (3.2) sur les valeurs atomistiques, comme on peut le voir sur la

figure 3.30. La valeur de R_a influence plutôt l'origine en y de la fonction $W(d)$. La sensibilité au module de cisaillement peut aussi être testée. En augmentant la valeur de μ de 10%, on obtient $\langle\gamma\rangle=1,35 \text{ J.m}^{-2}$. En diminuant la valeur de μ de 10 %, on obtient $\langle\gamma\rangle=1,08 \text{ J.m}^{-2}$. Les valeurs obtenues pour $\langle\gamma\rangle$ restent d'environ $\frac{1}{3}\gamma_{GSF}$.

Indépendamment des paramètres R_a et μ , la valeur obtenue pour $\langle\gamma\rangle$ quantifie donc bien l'énergie de défaut d'empilement moyenne de la dislocation partielle.

3.3.3 Structures de la dislocation [001] à différentes pressions

La méthode de calcul de d_{eq} et $\langle\gamma\rangle$ décrite pour la dislocation [001] dissociée dans le plan (010) à 30 GPa a été appliquée sur la dislocation [001] dans le plan (110) à 30 GPa, et à d'autres valeurs de pression dans le plan (010). L'ensemble des résultats est représenté table 3.2. À 30 GPa, la dislocation [001] est plus étendue dans le plan (110) que dans le plan (010) ($d_{eq(110)} > d_{eq(010)}$). Cette observation est cohérente avec les énergies de défaut d'empilement $\langle\gamma\rangle$ obtenues, respectivement de 1,22 et 1,08 J.m^{-2} dans les plans (010) et (110).

Pression (GPa)	Plan	d_{eq} (Å)	e_1 (Å)	e_2 (Å)	$\langle\gamma\rangle$ (J.m^{-2})
30	(010)	30	1,6	1,5	1,22
	(110)	33,37	1,83	1,66	1,08
60	(010)	29,9	0,9	1,3	1,50
	(110)	-	-	-	-
100	(010)	20,7	0,8	1,0	2,03
	(110)	-	-	-	-
140	(010)	15,45	0,68	0,71	2,39
	(110)	-	-	-	-

TABLE 3.2 – Caractéristiques de la dislocation [001] aux différentes pression

L'effet de la pression sur la structure orthorhombique est d'augmenter les distorsions des octaèdres, et de s'éloigner d'autant plus de la structure d'une perovskite cubique. Bien que préservé aux pressions plus importantes, l'état métastable observé sur les énergies de défauts d'empilement selon [001] dans les plans (010), (100) et (110) augmente avec la pression (figure 3.23). La dislocation [001] reste dissociée à toutes les pressions. Dans le plan (010), on observe une diminution de la distance d'équilibre entre partielle d_{eq} avec l'augmentation de la pression. Cette diminution de d_{eq} s'accompagne d'une augmentation de la valeur de $\langle\gamma\rangle$, qui augmente de 1,08

$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ à $P=30$ GPa jusqu'à une valeur de $2,39 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ à $P=140$ GPa. L'étalement des dislocations partielles quant à lui diminue avec la pression. Cet étalement à 30 GPa correspond à $0,35 \cdot a$ et $0,15 \cdot a$ à 140 GPa.

Enfin, de façon générale, les valeurs de $\langle \gamma \rangle$ restent de l'ordre de $\frac{1}{3}\gamma_{GSF}$ pour tous les systèmes de glissement calculés.

3.3.4 Contrainte critique de glissement dans le plan (010)

Dans le cas de dislocations non dissociées, tel que les dislocations vis $[100]$ et $[010]$ traitées précédemment, le glissement de la dislocation à $T = 0$ K a pu être simplement décrit par la contrainte de Peierls. Le glissement d'une dislocation dissociée peut s'avérer plus complexe. Pour illustrer cela, une contrainte a été appliquée à la dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (010). La cellule de départ contient une dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (010) avec une distance entre partielles égale à d_{eq} , soit 30 \AA pour ce système de glissement à 30 GPa.

Un cisaillement est appliqué à la cellule de calcul, de façon à appliquer une contrainte projetée dans le plan de glissement de la dislocation (méthode similaire à celle appliquée à la dislocation $[100]$, partie 3.1.2). La contrainte appliquée en fonction du cisaillement est représentée figure 3.31. On peut remarquer des variations brusques de la courbe de contrainte (figure 3.31(a)). Ces variations sont accompagnées d'une modification de la structure de la dislocation $[001]$ dans le plan (010). La figure 3.31(b) représente la distance entre partielles normalisée. Initialement à d_{eq} , cette distance diminue puis augmente avec l'augmentation du cisaillement. La distance d entre partielles est initialement égale à $6,5 \cdot a_{30}$, et diminue faiblement avant de croître. On rappelle que ce système de glissement correspond à celui représenté figure 3.29, sur laquelle on observe que pour $d \sim d_{eq}$, les dislocations sont très proches en énergie.

Cinq structures différentes sont observées, selon la valeur de d (figure 3.31). La figure 3.32 représente la fonction de désaccord de la dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (010) et sa dérivée, pour les différentes valeurs de d figure 3.31(b). On peut séparer le glissement de la dislocation en deux étapes. Premièrement (figure 3.32(a)) la partielle de queue avance, et la taille du défaut d'empilement diminue. Deuxièmement (figure 3.32(b)) la partielle de tête avance et la taille de défaut d'empilement augmente. Le glissement de la dislocation, qui correspond à plusieurs phases, est enclenché à une contrainte située entre 4 et 5 GPa. Bien que cette contrainte ne puisse être considérée comme une contrainte de Peierls, elle est proche des contraintes de Peierls de 4,5 GPa relevées pour les dislocations $[100]$ et $[010]$ dans leurs plans de glissements préférentiels.

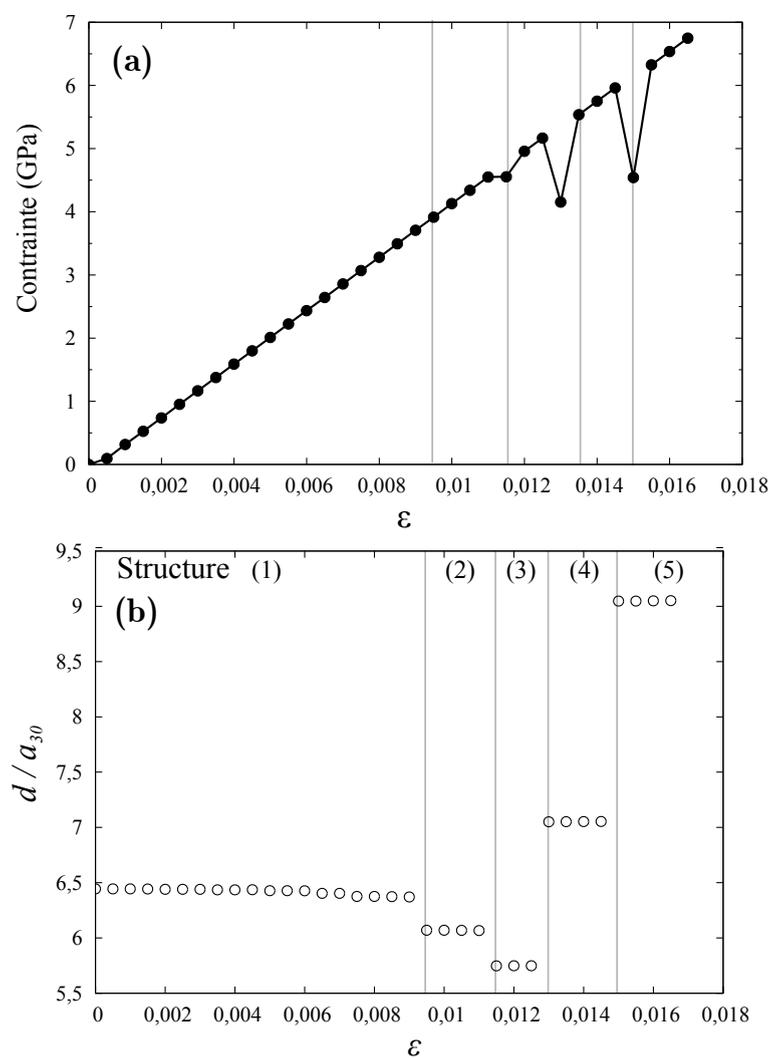


FIGURE 3.31 – (a) Variation de la contrainte, en fonction de la déformation appliquée, dans une cellule de calcul contenant une dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (010) . (b) Évolution de la distance entre partiels selon la déformation.

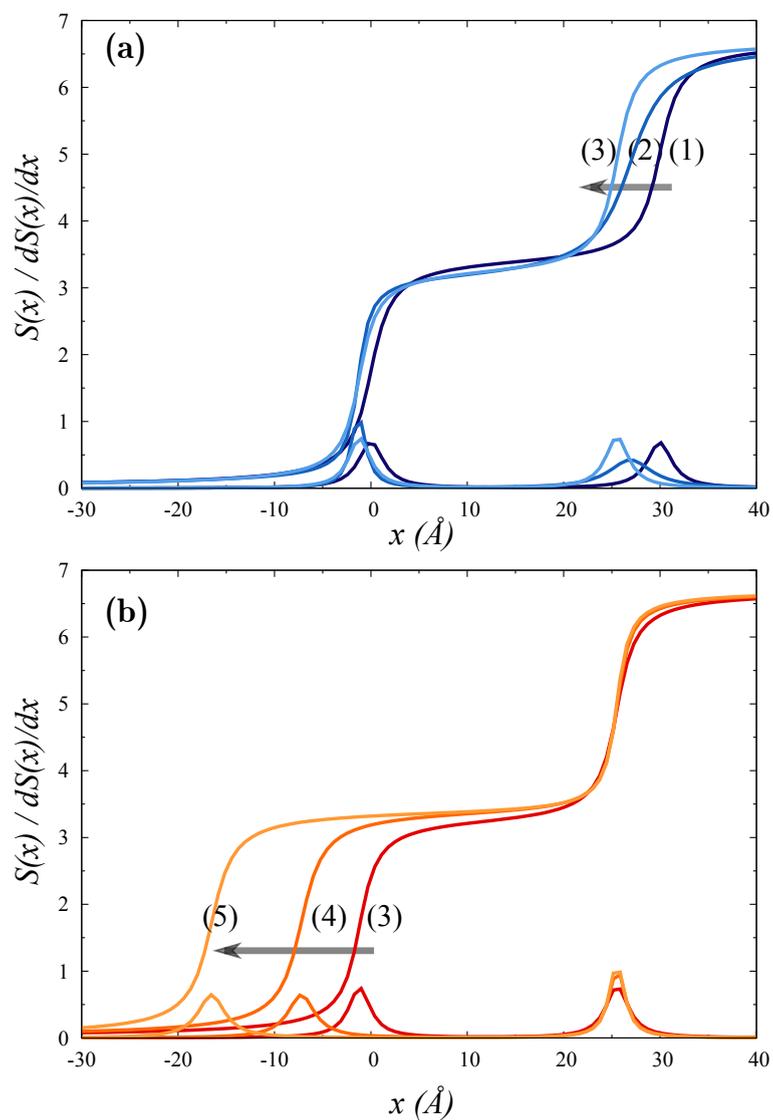


FIGURE 3.32 – Variation de la structure de dislocation $[001]$ dissociée dans le plan (010) , sous l'application d'un cisaillement. (a) Phase de diminution du défaut d'empilement (b) Phase d'extension du défaut d'empilement.

3.4 Discussion

3.4.1 Comparaison aux résultats du modèle PN

Les structures de dislocations obtenues en atomistique sont comparées aux structures obtenues par méthode PN pour les mêmes systèmes de glissement. Dans les travaux de [Ferré *et al.* 2007, Gouriet *et al.* 2014], les énergies de défauts d'empilements généralisés sont utilisées pour obtenir la fonction de désaccord des dislocation vis [100] dans le plan (010) et [010] dans (100). La structure de dislocation correspond à l'équilibre entre (i) les forces dérivant des énergies de défaut d'empilement et (ii) les forces élastiques :

$$\frac{\mu}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x-x'} \left[\frac{dS(x')}{dx'} \right] dx' = -\vec{grad}(\gamma(S)) \quad (3.4)$$

$S(x)$ est la fonction de désaccord de la dislocation, $\gamma(S)$ l'énergie de défaut d'empilement correspondant à un désaccord S . Dans les travaux de [Gouriet *et al.* 2014], les propriétés de dislocations sont déterminées en utilisant les énergies de défaut d'empilement de plusieurs plans. Ces énergies de défauts d'empilement sont calculées en statique moléculaire, avec le potentiel inter-atomique utilisé dans cette thèse. Les fonctions de désaccord de la dislocation [100] dans (010), et de la dislocation [010] dans (100), calculées à partir des méthodes PNG et atomistiques, sont représentées figure 3.33. Dans l'ensemble, les résultats atomistiques sont en bon accord avec les résultats obtenus par le modèle PNG. Les distances entre fractionnelles (distances entre pics de $dS(x)/dx$) obtenues sont similaires. Les variations apportées par le calcul atomistique concernent principalement l'étalement des fractionnelles.

Dans les travaux de [Ferré *et al.* 2007], les énergies de défauts d'empilement généralisés sont obtenues par calcul *ab initio*. Les fonctions de désaccord des dislocations restent déterminées à partir de l'expression (3.4), mais à partir des énergies de défaut d'empilement d'un seul plan. La table 3.3 présente une comparaison des résultats obtenus dans cette thèse à 30 GPa et des résultats de [Ferré *et al.* 2007]. Les résultats sur les structures de dislocations [100] dans (010) et [010] dans (100) sont en excellent accord. En revanche, pour les cœurs de dislocation étroits, les résultats de [Ferré *et al.* 2007] surestiment les largeurs de cœur.

Pour la dislocation [001] dissociée, les résultats sont proches. L'étalement des dislocations partielles est très proche entre les deux modèles. La distance d'équilibre trouvée en atomistique est plus importante que celle obtenue en PN. Tout comme pour le calcul élastique de d_{eq} , les

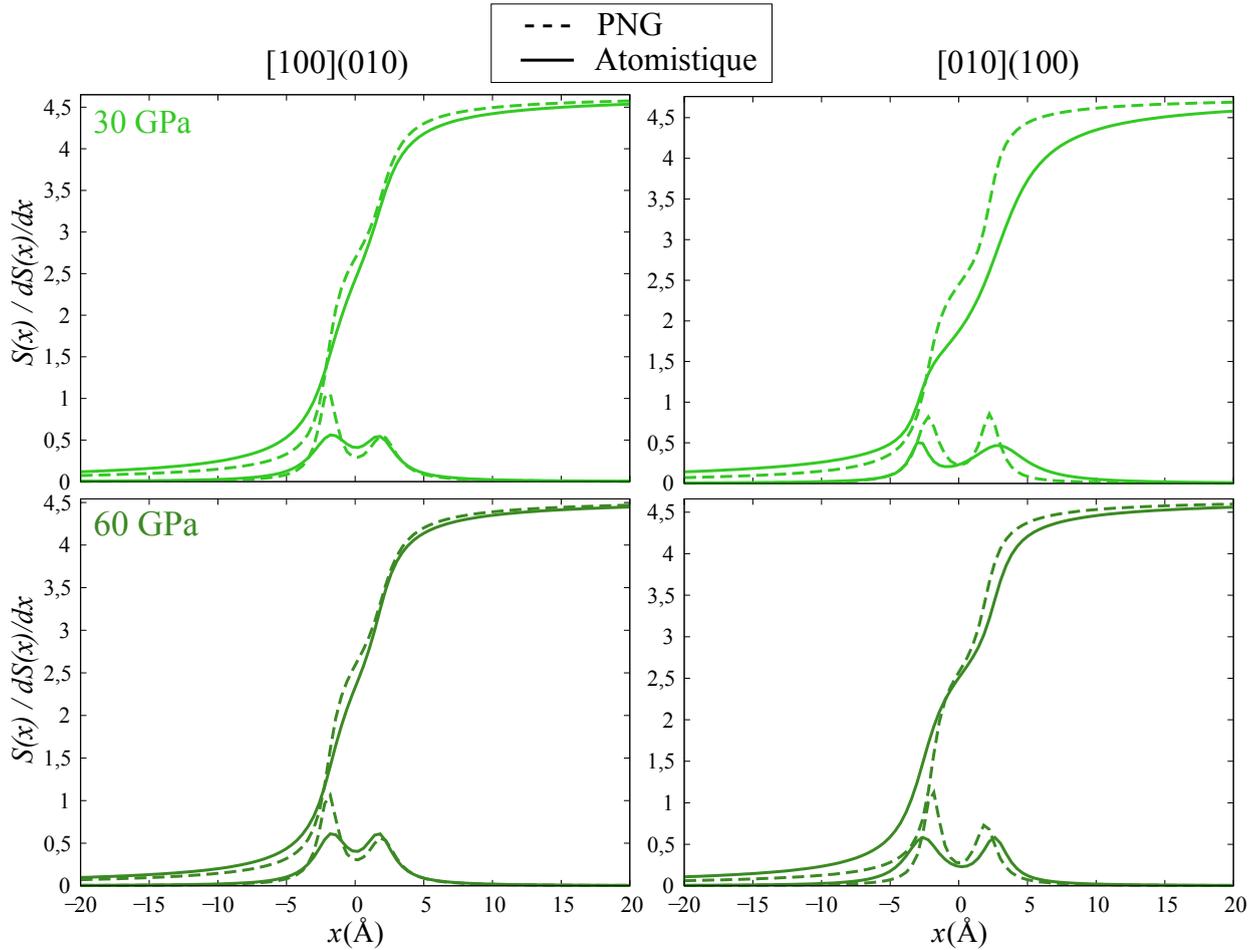


FIGURE 3.33 – Comparaison des fonctions de désaccords et leur dérivées des dislocations vis $[100]$ et $[010]$ dans les plans respectifs (010) et (100) à 30 et 60 GPa, obtenues par calcul atomistique dans cette étude (courbes pleines), et par méthode PNG (courbes pointillées) [Gouriet *et al.* 2014].

énergies de défaut d'empilement de la dislocation dissociée ont tendance à être surestimées dans les calculs PN.

Les contraintes de Peierls obtenues dans [Ferré *et al.* 2007] sont résumées table 3.3, comparées à celles obtenues dans cette étude. Les contraintes obtenues par méthode PN sont systématiquement plus importantes que celles obtenues en atomistique. Cependant, les systèmes de glissement faciles sont dans les deux cas les dislocations vis $[100]$ et $[010]$ dans les plans respectifs (010) et (100) .

	[Ferré <i>et al.</i> 2007]			Cette étude			
Système de glissement	ξ (Å)	d_{eq} (Å)	τ_P (GPa)	ξ (Å)	d_{eq} (Å)	τ_P (GPa)	
Dislocation $[100]$	(010)	6	-	15,5	6,64	-	4,5
	(001)	3,6	-	39	0,78	-	21,7
Dislocation $[010]$	(100)	8	-	8	8,9	-	4,5
	(001)	4,6	-	22,5	0,57	-	16,2
Dislocation $[001]$	(010)	2	15,3	23	1,5 - 1,6	30	$>4,5$
	(100)	2,9	13,1	44	<i>nc</i>	<i>nc</i>	<i>nc</i>
	(110)	2,6	19,3	39,5	1,7 - 1,8	33,4	<i>nc</i>

TABLE 3.3 – Comparaison des propriétés de dislocations vis obtenues dans cette thèse aux résultats obtenus par méthode PN dans [Ferré *et al.* 2007], à $P = 30$ GPa (*nc* pour non calculé). Dans le cas des dislocations $[001]$, ξ correspond à e_1 et e_2 .

3.4.2 Dislocations coins $[100](010)$ et $[010](100)$

En parallèle à cette thèse, les propriétés de dislocations coins ont été calculées dans la bridgmanite, en se basant sur les mêmes méthodes de simulation (potentiel inter-atomique identique, calculs de statique moléculaire, tailles de cellule de calcul voisines). Les dislocations coins $[100]$ et $[010]$, dans les plans respectifs (010) et (100), ont été modélisées afin d'obtenir leurs désaccords atomiques et d'estimer leur contrainte de Peierls. Ces résultats, ainsi que les résultats de cette

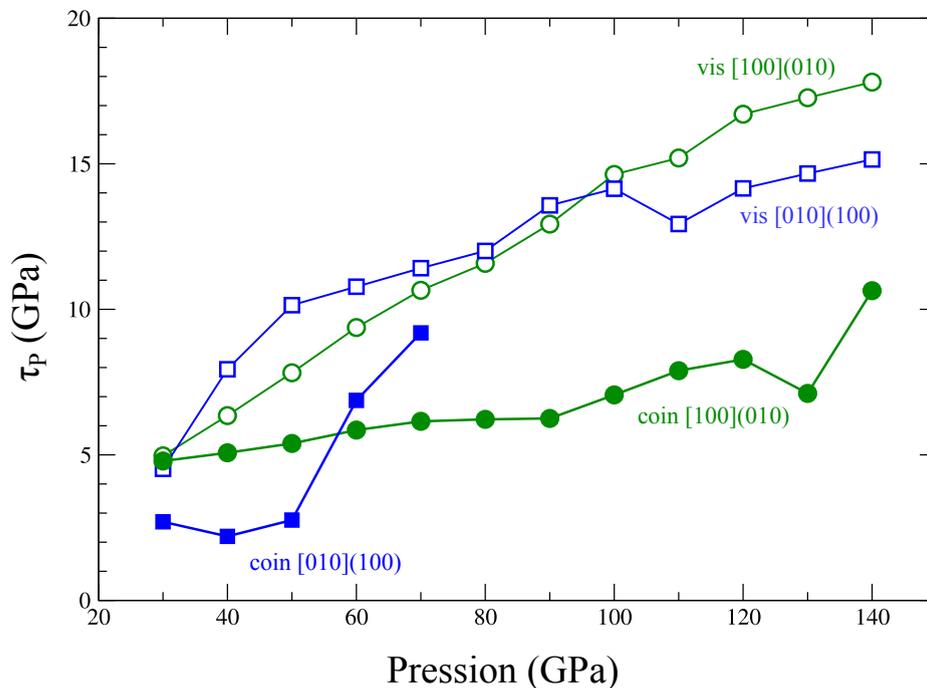


FIGURE 3.34 – Contraintes de Peierls en fonction de la pression pour les dislocations vis $[100]$ dans (010) et $[010]$ dans (100), représentées avec les contraintes de Peierls obtenues pour les dislocations coins correspondantes [Hirel *et al.* 2014].

thèse présentés jusqu'ici pour les dislocations vis $[100]$ et $[010]$, ont fait l'objet d'une publication [Hirel *et al.* 2014].

Pour la dislocation coin $[100](010)$ à 30 GPa, on mesure un étalement $\xi = 13 \text{ \AA}$ à 30 GPa, soit $2,8 \cdot a$. L'étalement de la dislocation coin obtenu est en bon accord avec l'élasticité, avec $\xi_{coin} \sim \frac{\xi_{vis}}{(1-\nu)}$. Cela reste vrai à $P \geq 30 \text{ GPa}$: l'effet de la pression sur le cœur de la dislocation coin $[100](010)$ est purement élastique, $\xi_{coin} = 2,8 \cdot a$ reste valide. Les contraintes de Peierls de la dislocation coin $[100](010)$ obtenues de 30 à 140 GPa sont inférieures aux contraintes de Peierls de la dislocation vis correspondante (figure 3.34). On observe que pour les dislocations $[100]$ et $[010]$, aussi bien pour les vis que pour les coins, plus la dislocation est étalée dans son plan de glissement, plus la valeur de contrainte de Peierls estimée est faible.

Pour la dislocation coin $[010](100)$ à 30 GPa, l'étalement mesuré est $\xi = 17,5 \text{ \AA}$ à 30 GPa, soit $2,8 \cdot b$. L'étalement $2,8 \cdot b$ reste valide jusqu'à 50 GPa. Au delà de cette pression, la dislocation est dissociée en montée (figure 3.35). On peut observer que le cœur de dislocation est composé de deux demi-plans ne terminant pas au même niveau. Cette caractéristique du cœur de dislocation a pour conséquence d'augmenter drastiquement les contraintes de Peierls. Les contraintes de Peierls de la dislocation coin $[010](100)$ dépassent celles de la dislocation vis à partir de $P = 70 \text{ GPa}$. Ce changement de structure de la dislocation coin, contrôlé par la pression, est susceptible d'apparaître avec l'effet de la température [Hirel *et al.* 2016]. Ce changement de structure des dislocations coins est particulier à la structure perovskite [Poirier *et al.* 1989]. Dans la bridgmanite, il est susceptible d'apparaître à des températures plus faibles que pour d'autres perovskites tel que le titanate de strontium [Hirel *et al.* 2016].

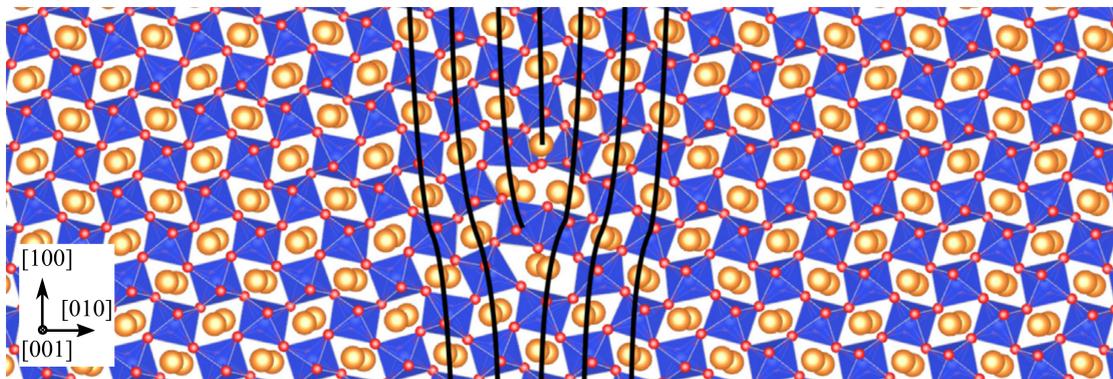


FIGURE 3.35 – Dislocation coin $[010](100)$ dissociée en montée à $P = 80 \text{ GPa}$, issue de [Hirel *et al.* 2014]. Les plans atomiques proches du cœur de la dislocation sont mis en évidence par des traits noirs.

3.4.3 Équivalence des systèmes de glissement dans une perovskite cubique

Les résultats obtenus sur les dislocations dans la bridgmanite, perovskite orthorhombique, peuvent être enrichis d'une comparaison avec des résultats obtenus dans une perovskite cubique, telle que le titanate de strontium SrTiO_3 . Les correspondances des systèmes de glissement entre une structure cubique et orthorhombique sont résumées table 3.4. Dans cette partie, les indices "o" et "c" désignent les structures orthorhombique et cubiques.

Orthorhombique	Cubique
$[100]_o(010)_o$	$[1\bar{1}0]_c(110)_c$
$[100]_o(001)_o$	$[1\bar{1}0]_c(001)_c$
$[010]_o(100)_o$	$[110]_c(1\bar{1}0)_c$
$[010]_o(001)_o$	$[110]_c(001)_c$
$[001]_o(010)_o$	$2[001]_c(110)_c$
$[001]_o(100)_o$	$2[001]_c(1\bar{1}0)_c$
$[001]_o(110)_o$	$2[001]_c(100)_c$

TABLE 3.4 – Systèmes de glissements orthorhombiques étudiés dans cette thèse, mis en correspondance avec leur équivalents dans une perovskite cubique

Dislocations vis $[100]_o$ et $[010]_o$

Les systèmes de glissement $[100]_o(010)_o$ et $[010]_o(100)_o$ ne sont pas strictement équivalents dans une perovskite orthorhombique. Cependant, ces systèmes de glissement présentent des similarités, aussi bien au niveau de leur structure que de leur contrainte d'activation. Ces deux systèmes correspondent à deux systèmes de glissement identiques $[1\bar{1}0]_c(110)_c$ et $[110]_c(1\bar{1}0)_c$ dans une perovskite cubique. Comme on peut le voir figure 3.36(a), la dislocation $[110]_c(110)_c$ dans le titanate de strontium est dissociée, et son défaut d'empilement correspond à un joint d'anti-phase. Bien que les dislocations $[100]_o$ et $[010]_o$ dans la bridgmanite ne sont pas dissociées, leur cœur correspond lui aussi à un joint d'anti-phase observable dans les plans respectifs $(010)_o$ et $(100)_o$ (figure 3.36(b) et (c)). Par ailleurs, le cœur des dislocations $[100]_o$ et $[010]_o$ dans la bridgmanite correspond dans les plans respectifs $(010)_o$ et $(100)_o$ à des dislocations fractionnées fortement corrélées (voir figure 3.33). Une telle structure rappelle fortement la dissociation du système $\langle 110 \rangle_c \{ 110 \}_c$ dans le titanate de strontium.

Les énergies de défaut d'empilement obtenues dans la bridgmanite avec un cisaillement selon $[100]_o$ et $[010]_o$ dans les plans respectifs $(010)_o$ et $(100)_o$ ne présentent pas d'état métastable (figure 2.4, chapitre 2). On observe cependant un point d'inflexion au sommet des γ -lignes. On

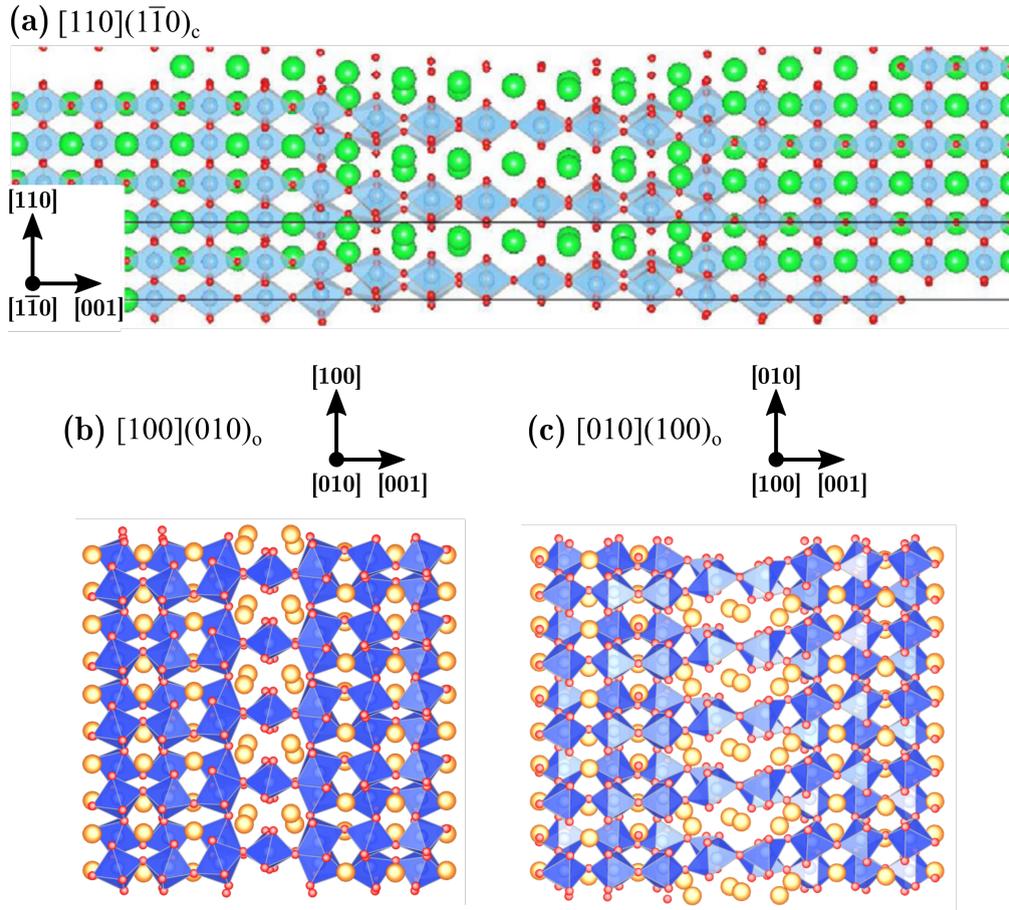


FIGURE 3.36 – (a) Dislocation vis $[110]_c$ modélisée dans $(\bar{1}\bar{1}0)_c$ dans le titanate de strontium SrTiO_3 à $P=0$ GPa. (b) Dislocation vis $[100]_o$ dans le plan $(010)_o$, dans la bridgmanite à $P = 30$ GPa. (c) Dislocation vis $[010]_o$ dans le plan $(100)_o$, dans la bridgmanite à $P = 30$ GPa.

peut supposer que les distorsions des octaèdres de la structure orthorhombique dans le cas des dislocations vis $[100]_o$ dans $(010)_o$ et $[010]$ dans ${}_o(100)_o$, augmentent l'énergie de défaut d'empilement et resserrent les cœurs de dislocation.

Enfin, la figure 3.37 présente les contraintes de Peierls des dislocations vis $[100]_o$ dans $(010)_o$ et $[010]_o$ dans $(100)_o$ normalisées par les modules de cisaillement respectifs. Les contraintes normalisées obtenues et leur évolution en pression sont proches. Ces deux dislocations, qui seraient strictement équivalentes dans une perovskite cubique, gardent des propriétés proches dans une perovskite orthorhombique.

Dislocation vis $[001]_o$

Les résultats obtenus sur la dislocations vis $[001]_o$ montrent que cette dislocation est dissociée dans la bridgmanite. On observe un défaut d'empilement généralisé métastable selon $[001]_o$ dans

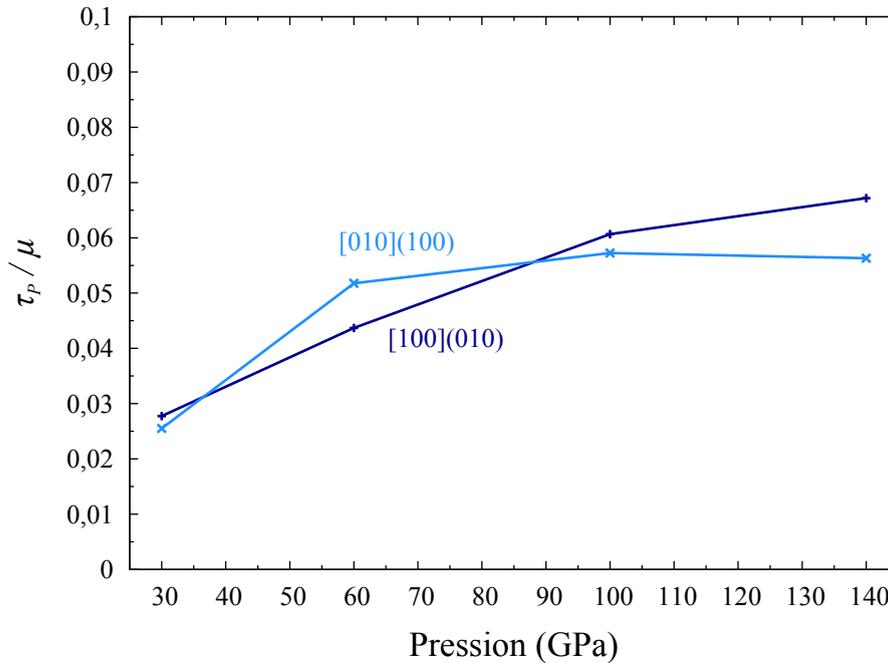


FIGURE 3.37 – Contraintes de Peierls des systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$, normalisées par les modules de cisaillement respectifs, $\nu_{[100]}$ et $\nu_{[010]}$, en fonction de la pression (les contraintes les plus faibles obtenues sont choisies).

les plans $(010)_o$, $(100)_o$ et $(110)_o$ (voir figure 3.23). Ce défaut d'empilement métastable correspondrait, dans une structure cubique, à la structure parfaite. En effet, l'axe $\frac{1}{2}[001]_o$ correspond à $[100]_c$, $[010]_c$ où $[001]_c$ dans une perovskite cubique.

Le vecteur $[001]_o$ équivaut, dans une perovskite cubique, à un vecteur $2[001]_c$. Dans les matériaux de structure perovskite en général, l'étude des analogues a montré que le glissement des dislocations $\langle 001 \rangle_c$ est généralement activé à haute température, tandis que le glissement des dislocations $\langle 110 \rangle_c$ (correspondant à $[100]_o$ et $[010]_o$) est activé à basse température [Poirier *et al.* 1989]. On peut citer une fois de plus le cas du titanate de strontium, pour lequel le glissement des dislocations $\langle 110 \rangle_c$ est responsable de la déformation plastique à basse température. Au delà de $T \sim 1000$ K, les dislocations $\langle 110 \rangle_c$ deviennent sessiles. Le matériau devient alors fragile, puis à nouveau ductile à haute température, lorsque les dislocations $\langle 110 \rangle_c$ sont devenues suffisamment mobiles par activation thermique [Sigle *et al.* 2006].

Dans la bridgmanite à 30 GPa, nous avons évalué la contrainte critique de mise en mouvement d'une partielle de dislocation vis $[001]_o$ dans le plan $(010)_o$ à 5 GPa. Cette contrainte est proche de la contrainte des dislocations vis $[010]_o$ dans $(100)_o$ et $[100]_o$ dans $(010)_o$. Malgré des structures de défauts différentes, une faible anisotropie plastique est obtenue.

3.4.4 Systèmes de glissement favorables dans la bridgmanite

Les résultats obtenus dans ce chapitre sur les dislocations vis $[010]$, $[100]$ et $[001]$ dans la bridgmanite, ainsi que les résultats obtenus par [Ferré *et al.* 2007], indiquent que les systèmes de glissement $[010](100)$ et $[100](010)$ sont les plus favorables dans la bridgmanite.

Si les dislocations coins $[100](010)$ et $[010](100)$ deviennent sessiles, comme les travaux de [Hirel *et al.* 2016] le suggèrent, d'autres dislocations activables à des contraintes du même ordre de grandeur, tel que les dislocations $[001]_o$, sont susceptibles d'accommoder la déformation. Dans la suite, nous nous intéresserons à la mobilité thermiquement activée des dislocations $[100]$ et $[010]$

Chapitre 4

Mobilité de la dislocation [100] dans le plan (010) à 30 GPa par mécanisme de double décrochement

Ce chapitre est une étude de la mobilité de la dislocation [100] dans le plan (010) à 30 GPa, par mécanisme de double décrochement. La mobilité de la dislocation est obtenue en trois étapes. Premièrement, le potentiel de Peierls de la dislocation est calculé par méthode NEB. Deuxièmement, un double décrochement est modélisé en statique moléculaire, afin d'estimer son enthalpie et sa structure. Troisièmement, ces résultats obtenus par modélisation numérique sont intégrés à un modèle d'interaction élastique afin d'obtenir l'enthalpie de nucléation critique d'un double décrochement, $\Delta H^(\tau)$. Nous verrons qu'il est possible d'évaluer la vitesse de la dislocation [100] dans (010) dans la bridgmanite à partir de cette enthalpie de nucléation critique. Cette vitesse s'exprime en fonction de la température et de la contrainte appliquée à la dislocation.*

4.1 Potentiels de Peierls

4.1.1 Calcul NEB

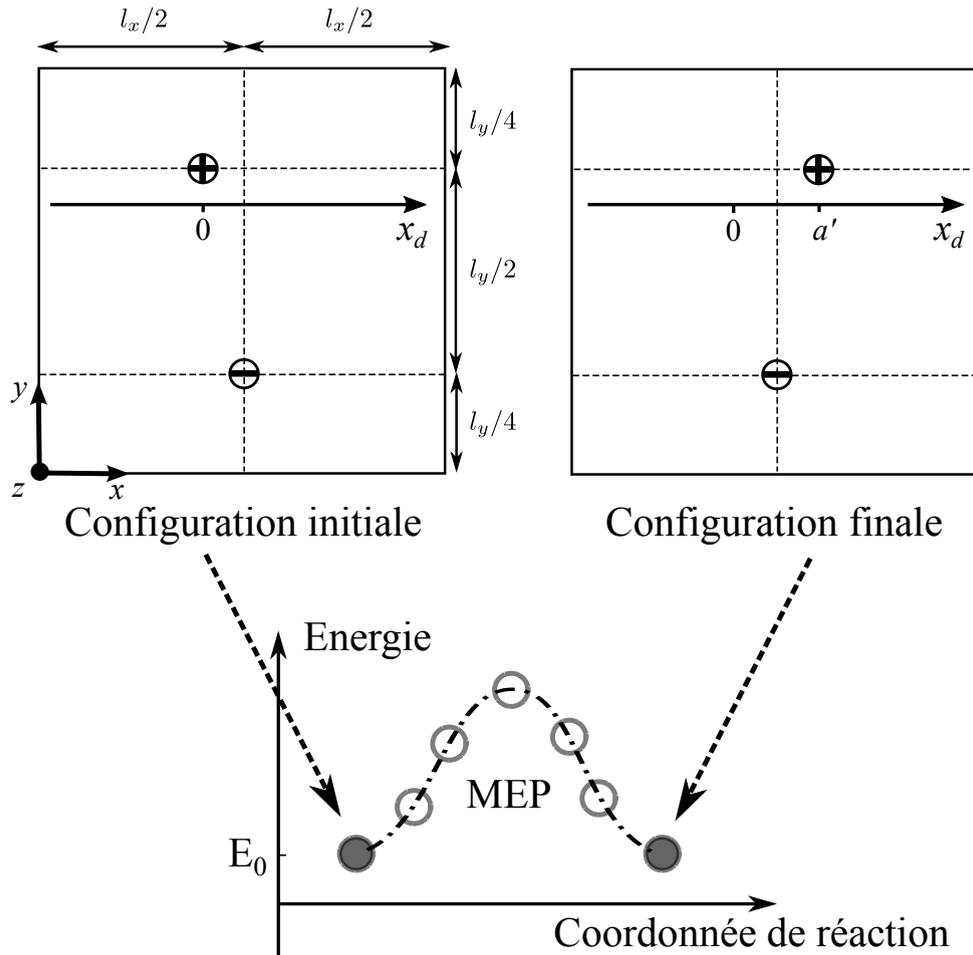


FIGURE 4.1 – Représentation du calcul de potentiel de Peierls dans une cellule contenant un dipôle de dislocations. Les symboles \oplus et \ominus représentent des dislocations vis de vecteur de Burgers $\pm b$. Les axes horizontaux en pointillé représentent les plans de glissement des dislocations. Le calcul NEB est réalisé à partir des configurations initiales et finales (cercles pleins sur le MEP). Les configurations transitoires interpolées à partir des configurations initiales et finales sont représentées sur le MEP par des cercles vides.

Le calcul des potentiels de Peierls est réalisé avec des dipôles de dislocations à deux dimension, cellule de calcul dont la description est l'objet de la partie 2.3.2. Ce type de cellule contient un dipôle de dislocation et présente des conditions périodiques dans les trois dimensions. Un calcul NEB, (*cf* partie 2.2.3 pour une description de la méthode) est utilisé pour déterminer le potentiel de Peierls d'une des deux dislocations du dipôle, tandis que l'autre dislocation reste immobile.

Le dispositif employé est représenté figure 4.1, les configurations initiales et finales utilisées dans

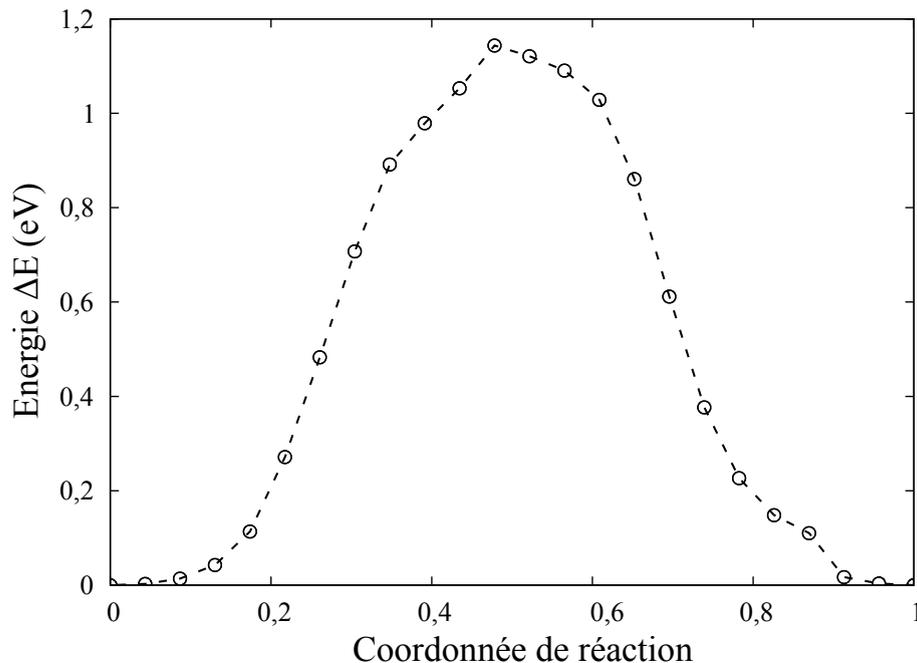


FIGURE 4.2 – Résultat d'un calcul NEB pour le glissement d'une dislocation vis [100] dans le plan (010) à 30 GPa, dans une cellule contenant un dipôle de dislocation (figure 4.1), de dimension $l_x = 32 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$ et $l_z = b$.

le calcul NEB y sont représentées. Les configurations initiales et finales correspondent à deux cellules de calcul symétriques. Les positions atomiques des deux cellules sont modifiées selon le champ de déplacement élastique isotrope de deux dislocations vis de signes opposés, représentées par les symboles \ominus et \oplus figure 4.1. Les positions des deux dislocations sont identiques entre les deux cellules de calcul selon l'axe y ($y_{\ominus} = 0,25 \cdot l_y$, $y_{\oplus} = 0,75 \cdot l_y$). En revanche, si la position de la dislocation \ominus selon x est identique entre les cellules initiales et finales, la position de la dislocation \oplus selon x varie d'une distance a' entre les cellules initiales et finales ($x_{\oplus} = 0,5 \cdot l_x - a'/2$ dans la configuration initiale, et $x_{\oplus} = 0,5 \cdot l_x + a'/2$ dans la configuration finale). Un axe x_d est ajouté pour suivre la coordonnée de la dislocation \oplus . Dans la configuration initiale, la coordonnée de la dislocation est $x_d = 0$, et $x_d = a'$ dans la configuration finale. Si l'on prend en compte les conditions périodiques, les dislocations du dipôle sont équidistantes selon les axes y et x (figure 4.1). En suivant cette construction des cellules, les répliques générées par interpolation linéaire entre les configurations initiales et finales correspondent au glissement de la dislocation \oplus entre deux positions d'équilibres.

Le MEP obtenu après convergence du calcul NEB, sur une dislocation vis [100] à 30 GPa dans le plan (010), est représenté figure 4.2 pour une cellule de dimension $l_x = 32 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$ et $l_z = b$. Le MEP représenté figure 4.2 correspond aux énergies de 24 configurations, composées des deux configurations initiales et finales et de 22 configurations intermédiaires initialement

interpolées. L'abscisse de la figure 4.2 est une coordonnée de réaction. Il s'agit d'une coordonnée arbitraire pour classer les différentes configurations, définie entre 0 et 1 (cette coordonnée peut tout aussi bien correspondre au numéro de réplique). L'ordonnée de la figure 4.2 est l'énergie des 24 répliques. Les configurations initiales et finales correspondent à deux dipôle symétriques de dislocations à l'équilibre, et sont donc d'énergie identique E_0 (on fixe $E_0 = 0$). Les énergies intermédiaires correspondent aux énergies du dipôle de dislocation dans lequel la coordonnée x_d de la dislocation \oplus (figure 4.1) varie entre 0 et a' .

L'énergie de chaque réplique correspond à l'énergie due au potentiel de Peierls, à laquelle s'ajoute une énergie d'interaction entre les dislocations du dipôle. Afin d'extraire le potentiel de Peierls du MEP représenté figure 4.2, les interactions élastiques dues au dipôle seront premièrement calculées. Deuxièmement, la coordonnée x_d de la dislocation qui explore le potentiel de Peierls est extraite des configurations atomiques correspondant à chaque réplique de calcul. Enfin, nous discuterons du calcul d'enthalpie dans le cadre d'un calcul réalisé à volume fixé.

4.1.2 Détermination du potentiel de Peierls

Calcul de l'énergie d'interaction du dipôle

Le MEP est constitué de 24 répliques, dans lesquelles l'énergie d'interaction entre dislocation varie à mesure que la coordonnée de la dislocation x_d varie. L'énergie d'une réplique i peut s'exprimer en fonction de la coordonnée x_d tel que :

$$E_i(x_d) = V_P(x_d) + E_{int}(x_d) \quad (4.1)$$

V_P est le potentiel de Peierls, E_{int} correspond à l'énergie d'interaction entre dislocations dans la cellule de calcul - ces deux quantités sont définies pour une portion de ligne b . Afin de calculer le potentiel de Peierls V_P , l'énergie $E_{int}(x_d)$ doit être calculée puis retranchée à $E_i(x_d)$.

Dans une cellule de calcul, pour une coordonnée x_d donnée, le terme E_{int} correspond à la somme de toutes les interactions entre dislocations. Parmi ces interactions, il y a l'interaction des dislocations de la cellule primaire, mais aussi l'interaction des dislocations de la cellule primaire avec leur répliques périodiques (figure 4.3). Les interactions élastiques sont calculées en prenant en compte l'anisotropie élastique [Clouet 2011a]. Leur somme est réalisée en considérant un nombre fini de cellules périodiques, mais suffisamment important pour que la somme converge.

Une telle somme est conditionnellement convergente [Cai *et al.* 2003], la procédure utilisée est celle développée dans le code BABEL [Clouet 2013], assurant la bonne convergence du calcul.

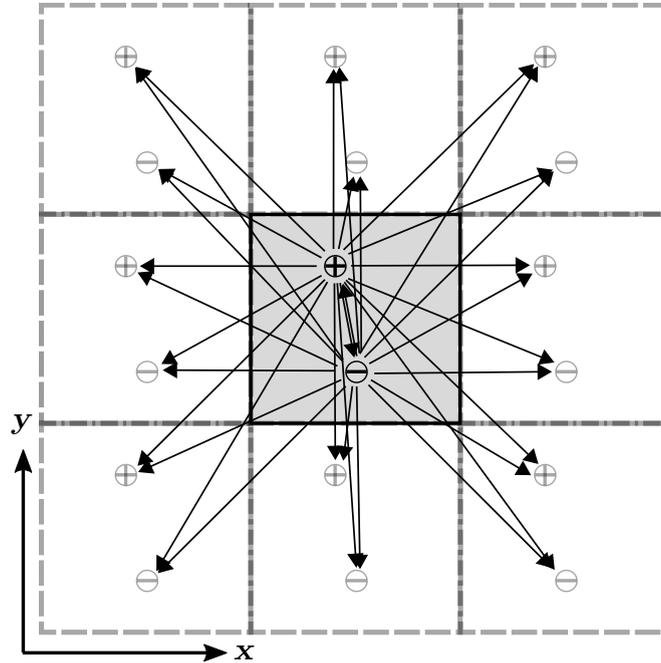


FIGURE 4.3 – Représentation d'une cellule de calcul et de ses répliques périodiques premières voisines. Les interactions entre dislocations sont matérialisées par des vecteurs.

Le calcul de $E_{int}(x_d)$ est représenté pour deux cellules de calcul, de taille $(l_x = 32 \cdot a, l_y = 32 \cdot n)$ et $(l_x = 16 \cdot a, l_y = 16 \cdot n)$ sur la figure 4.4. Ces deux calculs sont convergés et prennent en compte 100 répliques périodiques selon y , 100 répliques périodiques selon x (figure 4.3). L'énergie d'interaction est calculée en fonction de la coordonnée de la dislocation en mouvement x_d . On observe des valeurs d'énergie d'interaction 4 fois plus faibles dans le cas d'une cellule de calcul deux fois plus importante. L'énergie d'interaction peut être ajustée par une fonction parabolique, du type :

$$E_{int} = 4\Delta E \left(\frac{x_d - a'/2}{a'} \right)^2 \quad (4.2)$$

Dans le cas représenté figure 4.4, $\Delta E = 0,03$ eV/b pour une cellule de dimension $(l_x = 32 \cdot a, l_y = 32 \cdot n)$, et $\Delta E = 0,12$ eV/b pour une cellule de dimension $(l_x = 16 \cdot a, l_y = 16 \cdot n)$. Lorsque le dipôle est parfaitement aligné ($x_d = 0,5 \cdot a'$), l'énergie d'interaction est minimale (fixée à une référence $E=0$ dans la figure 4.4).

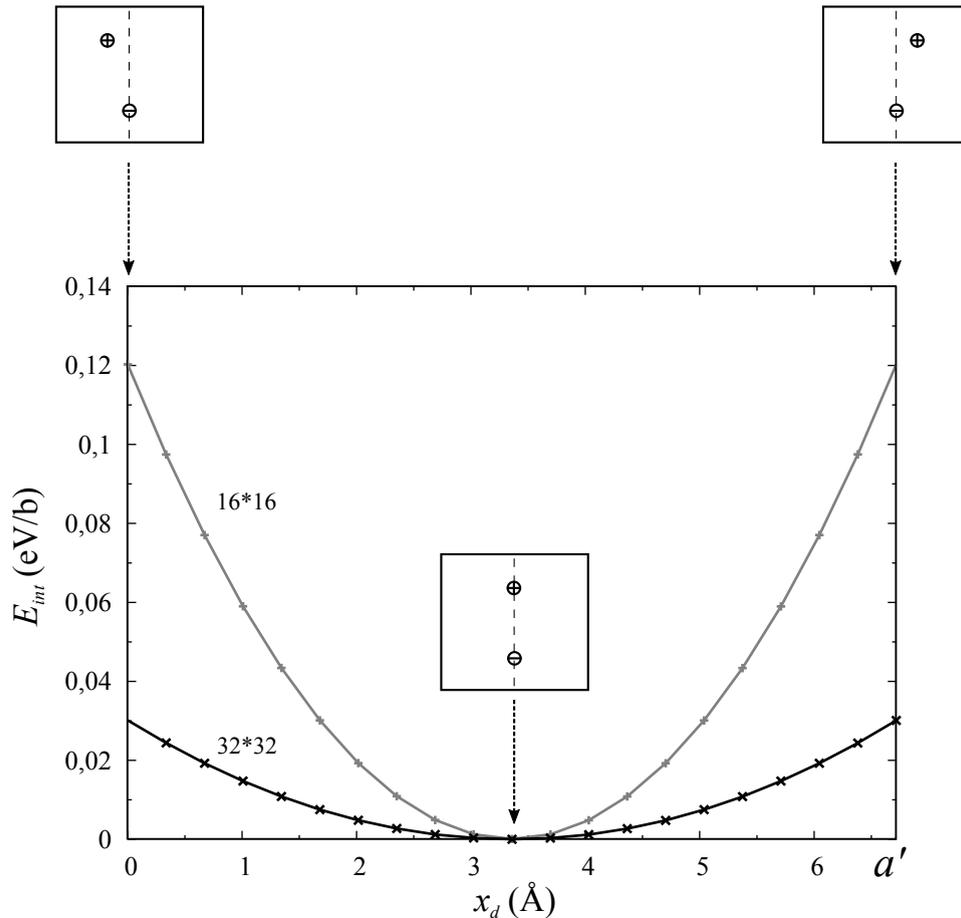


FIGURE 4.4 – Energie d’interaction élastique pour un dipôle de dislocations $[100]$ à 30 GPa, dans une cellule de calcul (figure 4.1) pour des dimensions de cellule ($l_x = 32 \cdot a, l_y = 32 \cdot n$) et ($l_x = 16 \cdot a, l_y = 16 \cdot n$).

La contrainte dérivant des interactions élastiques est représentée figure 4.5. Il s’agit d’une contrainte de rappel, qui attire les deux dislocations vers un dipôle parfaitement aligné. Sur la figure 4.5, la contrainte de rappel théorique obtenue à partir du code BABEL est représentée, ainsi que la contrainte de rappel mesurée dans les 24 répliques de calcul. Bien qu’il existe un facteur deux entre les contraintes, on retrouve figure 4.5 que les simulations pour laquelle la dislocation est en position initiale et en position finale présentent la même contrainte. Alors que la contrainte issue de BABEL est exprimée en fonction de la position de la dislocation, la contrainte mesurée est exprimée en fonction du numéro de réplique. Les deux contraintes ne se superposent pas sur la figure 4.5, car la position de la dislocation ne correspond pas à la coordonnée de réaction, *i.e.* le déplacement de la dislocation entre les différentes répliques n’est pas constant. Pour les images 1, 2, 3 ou 22, 23, 24 figure 4.5, on peut par exemple déduire que la dislocation a très peu progressé et se situe en fond de vallée de Peierls.

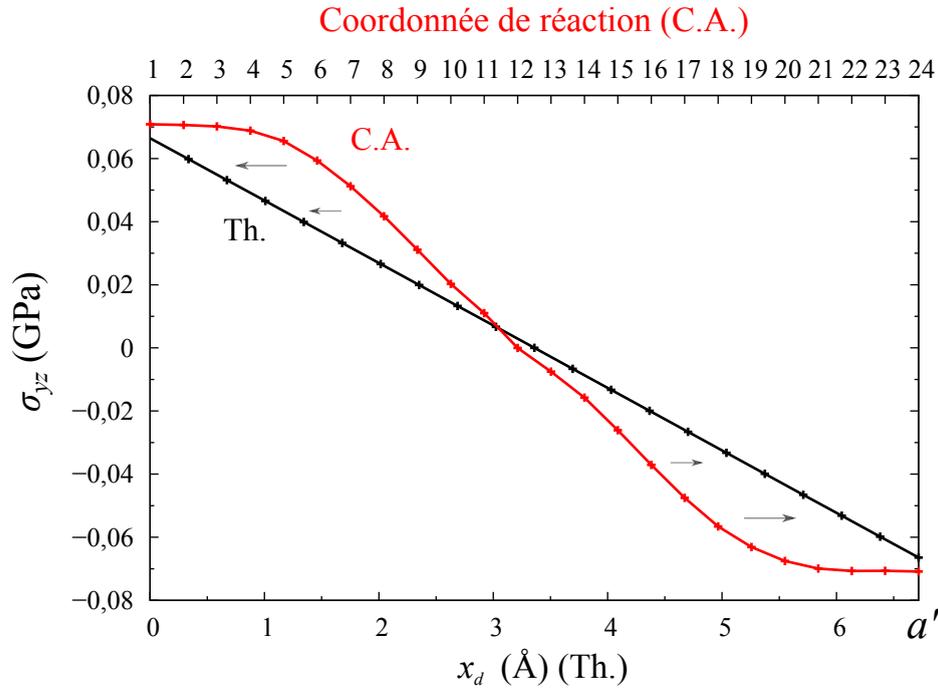


FIGURE 4.5 – Contrainte de rappel due aux interactions entre dislocations dans une cellule de dimension $l_x = 32 \cdot a, l_y = 32 \cdot n$ (figure 4.1). La contrainte théorique (Th.) définie à partir de Babel est divisée par deux, et est exprimée en fonction de la coordonnée de dislocation x (abscisse inférieure). La contrainte mesurée dans les calculs atomistiques (C.A.) est exprimée en fonction du numéro de réplique (abscisse supérieure).

Localisation de la dislocation

À partir de la figure 4.5, il est possible de définir une position de la dislocation en exploitant la composante σ_{yz} du tenseur de contrainte dans la cellule de calcul. La coordonnée x_d de la dislocation correspond à la position pour laquelle les différents $\sigma_{yz}(i)$ s'alignent en une droite (figure 4.5).

Il est aussi possible de suivre l'évolution de la structure de dislocation en calculant le désaccord atomique de la dislocation dans les différentes répliques du calcul. La figure 4.6 représente les désaccords atomiques de la dislocation en mouvement pour cinq répliques du calcul, auxquels sont ajustées des fonctions de désaccord $S(x)$ (eq. 2.17 pour $N=2$, soit deux fractionnelles). Le glissement de la dislocation se décompose en deux étapes. Dans une première étape, la fractionnelle de tête glisse jusqu'à la position d'équilibre suivante (états (1) à (3) figure 4.6). Dans une seconde étape, la fractionnelle de queue glisse à son tour vers la position d'équilibre (états (3) à (5)). On observe que dans l'état (3), la dislocation est pratiquement dissociée.

Les fonctions de désaccord permettent de calculer le centre de la dislocation (*cf* 2.4.1), afin de la positionner selon l'axe x_d dans les vingt-quatre répliques de calcul (figure 4.6(b)). Ainsi, à chaque configuration i est associée une position x_d de la dislocation, le résultat est représenté

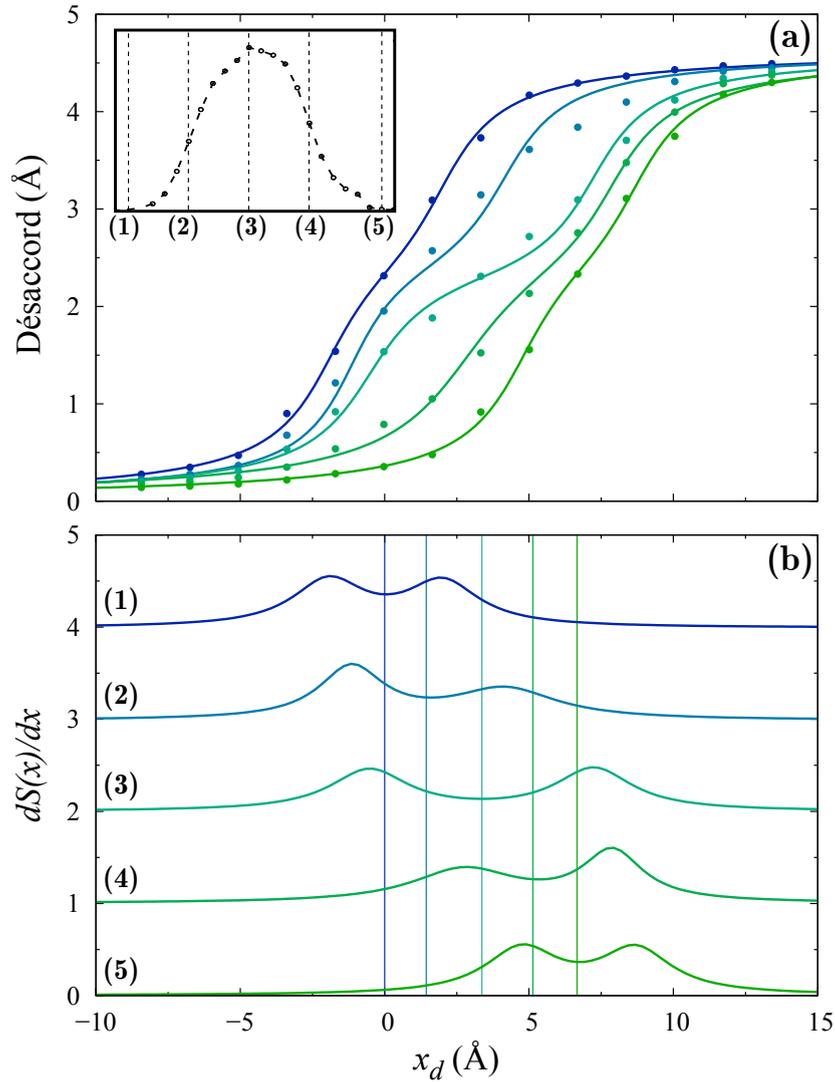


FIGURE 4.6 – Désaccord et densité de vecteur de Burgers de la dislocation $[100]$ le long du MEP, calculé pour une cellule de dimension $l_x = 32 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$ et $l_z = b$. Ces désaccords sont prélevés pour différentes configurations représentés le long du MEP dans l'insert en haut à gauche. **(a)** Désaccords atomiques auxquels sont ajustés des fonctions de désaccords fractionnées avec $N=2$ (eq. 2.17). **(b)** Dérivée des fonctions de désaccords, décalées en ordonnée pour plus de visibilité. Le centre de la dislocation calculé à partir des fonctions de désaccord est représenté.

figure 4.7. Pour la configuration initiale d'indice $i = 1$ cette position correspond à $x_d = 0$, jusqu'à $x_d = a'$ pour la configuration finale d'indice $i = 24$. La dislocation est à mi-chemin à la réplique $i = 12$, qui correspond au point d'énergie maximale du MEP.

Les coordonnées de la dislocation pour chaque réplique i sont représentées figure 4.7, déterminées à partir des deux méthodes : la contrainte de rappel dans la cellule de calcul, et le calcul de désaccord atomique. Les coordonnées obtenues à l'aide de ces deux méthodes sont très proches. Une superposition parfaite est obtenue au début et à la fin, et à mi-chemin du glissement. L'accord est moins bon autour de $x_d = (0,5 \pm 0,25) \cdot a'$. Cette zone correspond aux configurations (2) et (4) figure 4.6, où les désaccords atomiques sont moins bien ajustés par une fonction de

désaccord composée de deux fractionnelles. Dans la suite, les coordonnées de dislocation seront calculées à l'aide des fonctions de désaccord.

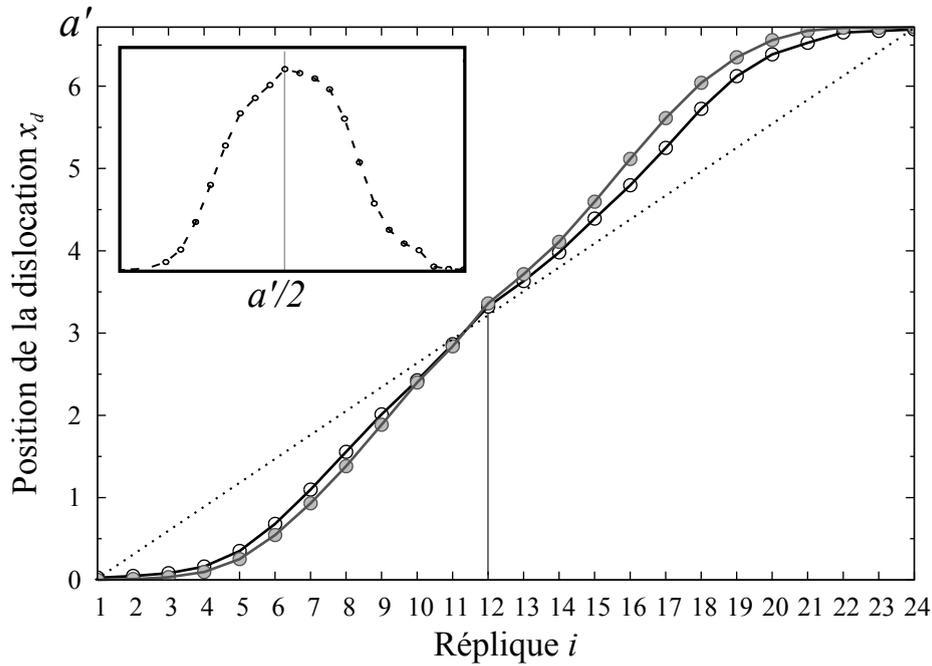


FIGURE 4.7 – Position de la dislocation calculée pour chaque réplique i . Les cercles vides correspondent aux coordonnées définies à partir des fonctions de désaccord. Les cercles pleins correspondent aux coordonnées définies à partir de la contrainte de rappel. La droite en pointillé correspond au cas d'une trajectoire de dislocation linéaire. Le MEP est représenté en insert, afin d'y faire correspondre le point où la dislocation est à mi-chemin lors du glissement.

Validation des corrections apportées au MEP pour obtenir V_P

Afin de vérifier la méthode de correction du MEP, basée sur un calcul des interactions élastiques et d'une détermination de la position de la dislocation dans la cellule, un calcul NEB est réalisé sur une cellule de taille $l_x = 16 \cdot a$ et $l_y = 16 \cdot n$, en désaxant le dipôle de façon à rompre la symétrie et observer l'énergie due à l'interaction élastique (figure 4.8). La figure 4.8(a) représente le résultat brut de la NEB, à côté duquel a été tracé l'interaction élastique calculé sur les cellules de bonne dimension. On observe une superposition parfaite des MEP et de l'interaction élastique calculée. Une fois l'interaction élastique retranchée aux MEP (figure 4.8(b)), on accède à la même barrière énergétique, avec deux calculs différents.

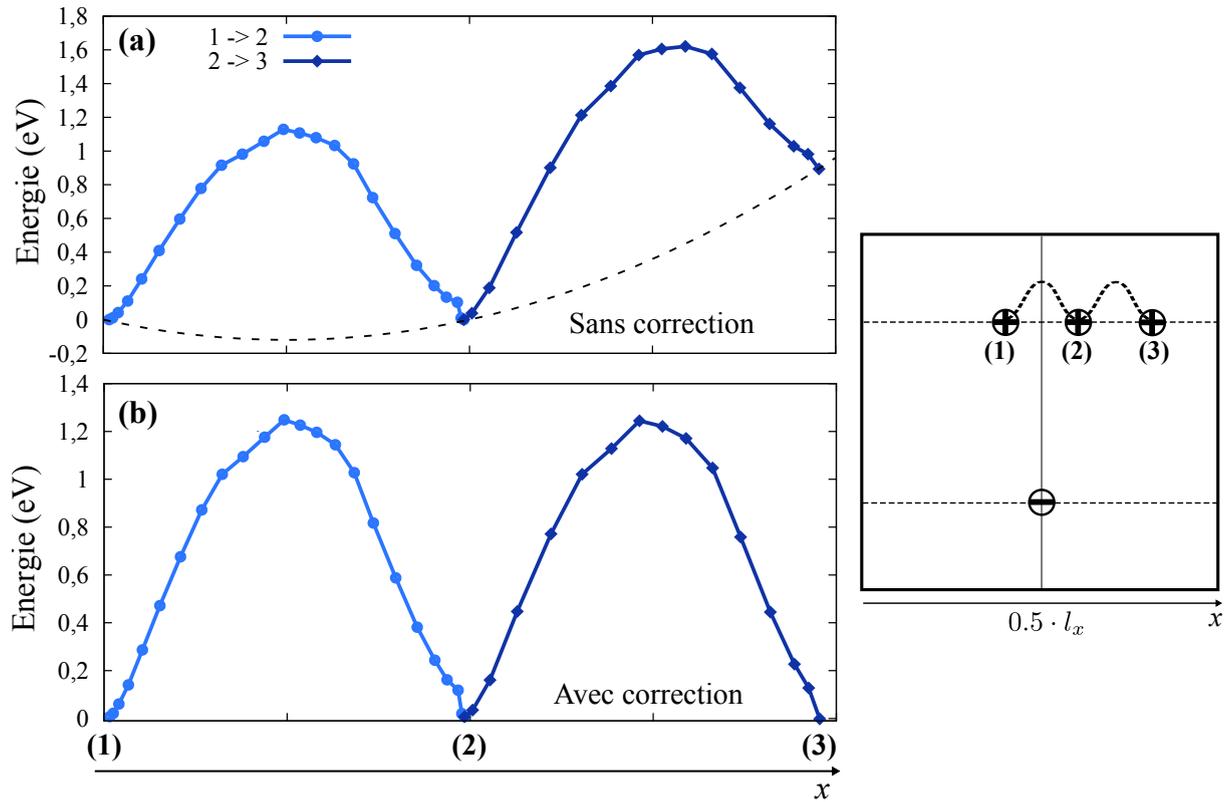


FIGURE 4.8 – MEP d'une dislocation vis $[100]$ à 30 GPa, pour une cellule de dimension $l_x = 16 \cdot a$, $l_y = 16 \cdot n$ et $l_z = b$. (a) Le MEP est calculé entre les configurations (1) à (2) (insert de droite), puis entre les configurations (2) à (3). Le MEP est tracé en fonction de la position de la dislocation. L'interaction élastique théorique est représentée par la courbe en pointillés. (b) L'énergie d'interaction élastique est retranchée au MEP pour obtenir le potentiel de Peierls.

Barrière d'enthalpie

Les calculs sont réalisés à volume fixé $V = V_0$. Dans les différentes répliques le long du MEP, on observe une variation de la pression dans la cellule de simulation, par rapport à la pression P_0 des configurations d'équilibre de la dislocation (figure 4.9). Cette variation de pression est due aux modifications de structure de la dislocation lors de son glissement, en particulier à la variation des termes diagonaux de son champ de contrainte ($P = \frac{1}{3}Tr(\bar{\sigma})$). La chaîne de configuration le long du MEP correspond à 24 cellules de calcul ayant un volume V_0 identique, mais des pressions différentes.

Les différentes répliques ont été amenées à la même pression P_0 , en modifiant le volume des cellules de calcul d'après l'équation d'état de la bridgmanite [Peng *et al.* 2014]. La chaîne de configuration correspond alors à une série de cellules de calcul à $P = P_0$, à différents volumes. En réalisant ce calcul, la barrière d'enthalpie calculée à pression constante est identique à la barrière d'énergie interne calculée à volume constant.

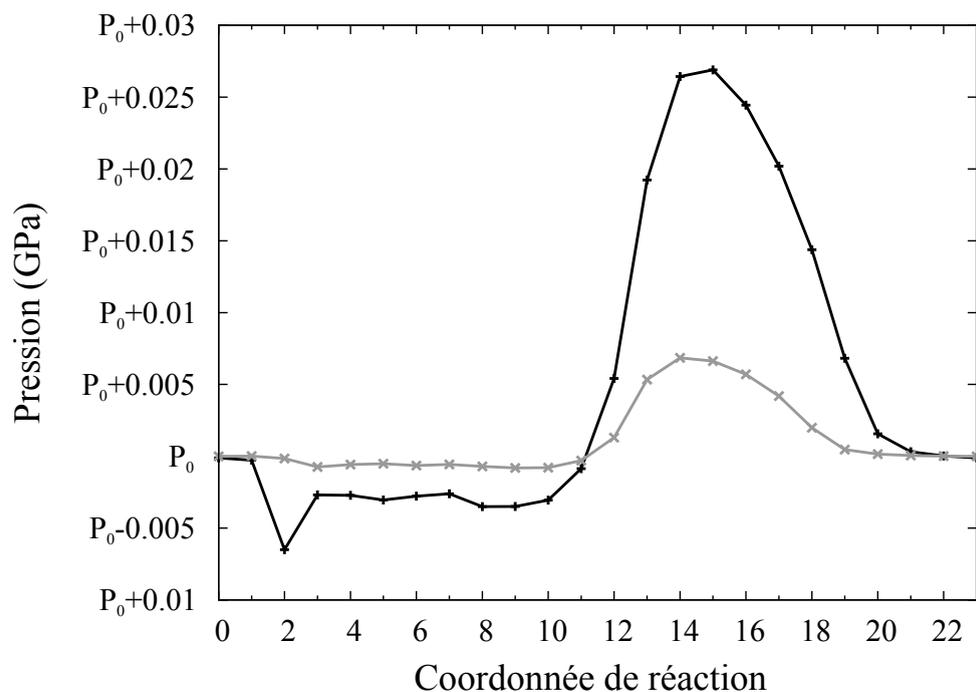


FIGURE 4.9 – Variation de pression dans des calculs NEB sur un dipôle de dislocation (figure 4.1) pour deux différentes tailles de boîtes. La courbe en noire correspond à une petite boîte de taille $l_x = 16 \cdot a$, $l_y = 16 \cdot n$, la courbe en gris correspond à une grande boîte de taille $l_x = 32 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$.

4.1.3 Potentiel de Peierls

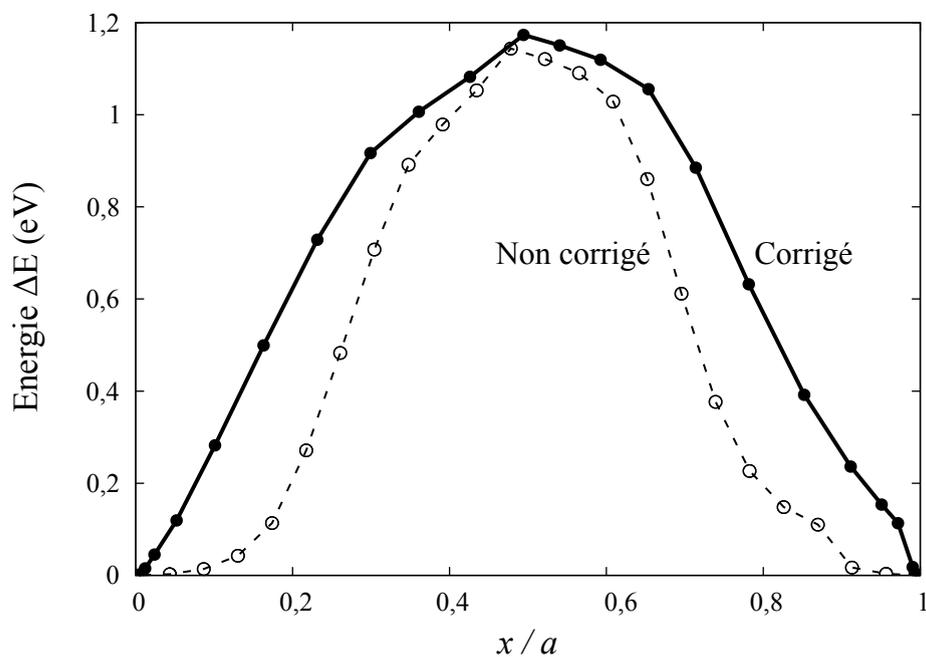


FIGURE 4.10 – MEP et potentiel de Peierls de la dislocation $[100]$ glissant dans le plan (010) à 30 GPa. Les cercles vides représentent le MEP, résultat brut du calcul NEB. Les cercles pleins correspondent au potentiel de Peierls.

Maintenant que les positions de dislocations, les corrections élastiques et les éventuels effets de pression sont pris en compte, le potentiel de Peierls peut être extrait du MEP. La figure 4.10 représente le potentiel de Peierls par vecteur de Burgers de la dislocation [100] dans le plan (010) à 30 GPa, ainsi que le MEP obtenu par NEB. Ce potentiel est asymétrique, avec une énergie de col de 1,17 eV.

Généralement, la contrainte nécessaire à la dislocation pour franchir le potentiel de Peierls peut se déduire du potentiel à partir de la formule $\tau = \frac{1}{b} \frac{dV_P}{dx}$. Cependant, à partir du potentiel figure 4.10, on notera la présence de deux contraintes différentes compte tenu de l'asymétrie du potentiel. De plus, une contrainte déterminée à partir de la dérivée du potentiel ne tiendra pas compte des éventuels effets de contrainte appliquée [Rodney & Proville 2009]. Pour palier à ces deux remarques nous avons réalisé une succession de calculs NEB à différentes contraintes, en soumettant la cellule de calcul à un cisaillement ε_{yz} . Une fois les interactions élastiques retranchées et les positions de dislocations déterminées, ce calcul permet d'obtenir $\Delta E(x, \tau)$, qui correspond à la barrière d'énergie de la dislocation sous contrainte. Le résultat est représenté (figure 4.11). Un cisaillement $\varepsilon_{yz} > 0$ induit un glissement de (1) vers (5), $\varepsilon_{yz} < 0$ induit un glissement de (5) vers (1) (voir figure 4.6 pour les positions). Pour les deux sens de cisaillement appliqués, la dislocation passe par des états transitoire identiques pour glisser, et escalade toujours le même côté du potentiel (côté gauche sur la figure 4.10). Cette particularité du potentiel de Peierls sera par la suite désignée par le terme d' « asymétrie dynamique », et sera discutée à la fin de cette partie.

Les barrières d'énergie sous contrainte, $(\Delta E(x, \tau))$, peuvent être décomposées de la façon suivante :

$$\Delta E(x, \tau) = V_p(x, \tau) - \tau b x \quad (4.3)$$

Dans cette expression, le premier terme est le potentiel de Peierls à une contrainte τ , le second terme correspond au travail de la contrainte. Cette décomposition permet d'établir une éventuelle dépendance du potentiel de Peierls à la contrainte. En effet, comme cela a été observé dans les travaux de [Rodney & Proville 2009] dans l'aluminium, le potentiel de Peierls est susceptible d'être modifié en présence d'une contrainte. Une fois le travail de la contrainte retranché à $\Delta E(x, \tau)$, on obtient le potentiel $V_p(x, \tau)$ (figure 4.12). Sur cette figure, on observe en effet une dépendance de la contrainte du potentiel de Peierls. La valeur maximale de V_p décroît de 0,2 eV/b entre $0 \leq \tau \leq 4,2$ GPa. Cependant, la valeur de la pente maximale du côté d'attaque du potentiel reste constante.

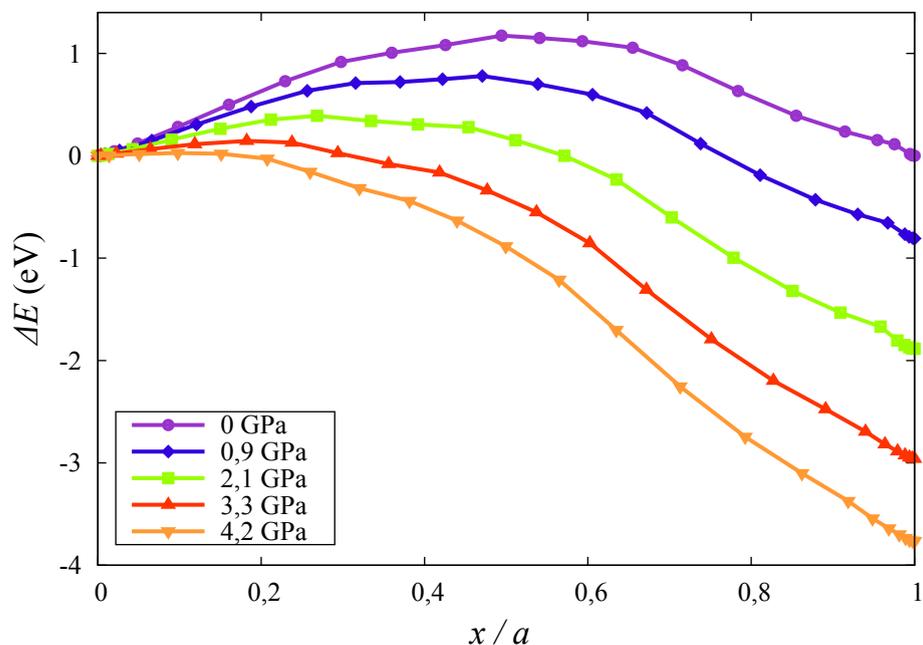


FIGURE 4.11 – MEP corrigé correspondant au glissement de la dislocation $[100]$ dans le plan (010) à différents états de contraintes projetées dans le plan (010) .

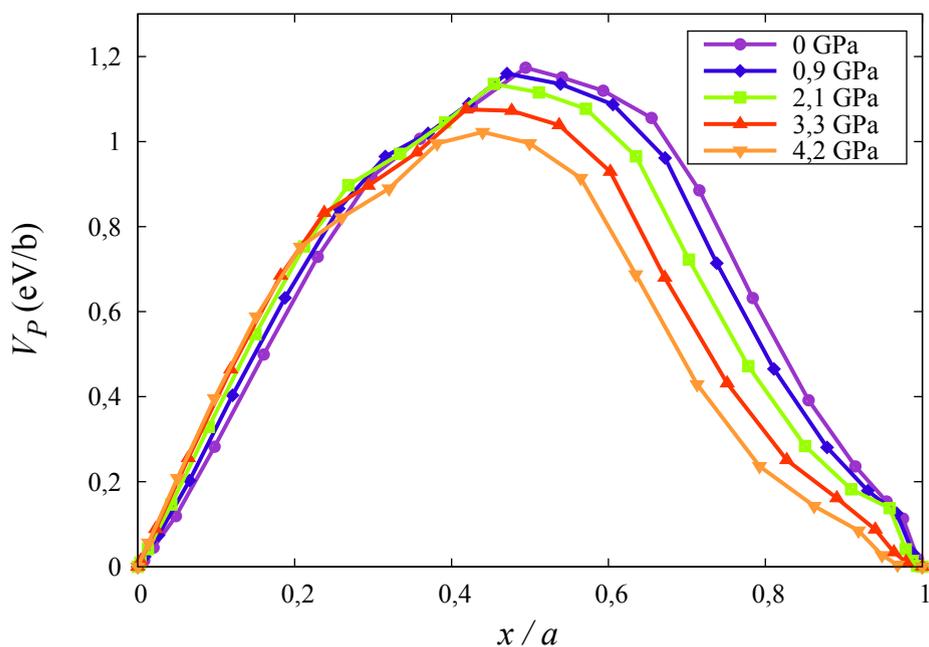


FIGURE 4.12 – Potentiels de Peierls V_P issus des MEP calculés sous contrainte $\Delta E(x, \tau)$ (figure 4.11), obtenus en retranchant le travail de la contrainte.

4.1.4 Contrainte de Peierls

Un calcul de contrainte maximale est réalisé sur les potentiels de Peierls sous contrainte. La pente maximale des potentiels $V_p(\tau)$ (figure 4.11) dimensionnée à une contrainte ($\frac{1}{b^2} \max \left(\frac{d\Delta E(\tau)}{dx} \right)$) est représentée figure 4.13. Une droite de pente -1 est tracée avec les résultats. Le bon accord entre cette droite et les contraintes obtenues à partir des potentiels de Peierls confirme la faible dépendance du côté d'attaque du potentiel de Peierls à la contrainte appliquée. La tendance tracée à partir des pentes maximales permet d'estimer une contrainte de Peierls $\tau_P = 4,9$ GPa.

Nous disposons donc de deux méthodes pour établir la contrainte de Peierls. La première méthode, utilisée lors du chapitre précédent, calcule la contrainte de Peierls en cisillant directement des cellules de calcul jusqu'à provoquer le glissement de la dislocation. Cette méthode présente une sensibilité aux incréments de cisaillements utilisés. En revanche, l'effet de la contrainte sur la structure de la dislocation, et par extension sur la contrainte de Peierls estimée, est pris en compte dans cette méthode. La deuxième méthode consiste à calculer les potentiels de Peierls sous contrainte. Cette méthode est plus lourde à mettre en œuvre. Les contraintes calculées à partir des deux méthodes restent cependant en bon accord ($\tau_P = 4,9$ GPa à partir des potentiels, $\tau_P = 4,5 \pm 0,5$ GPa en cisillant les cellules de calcul).

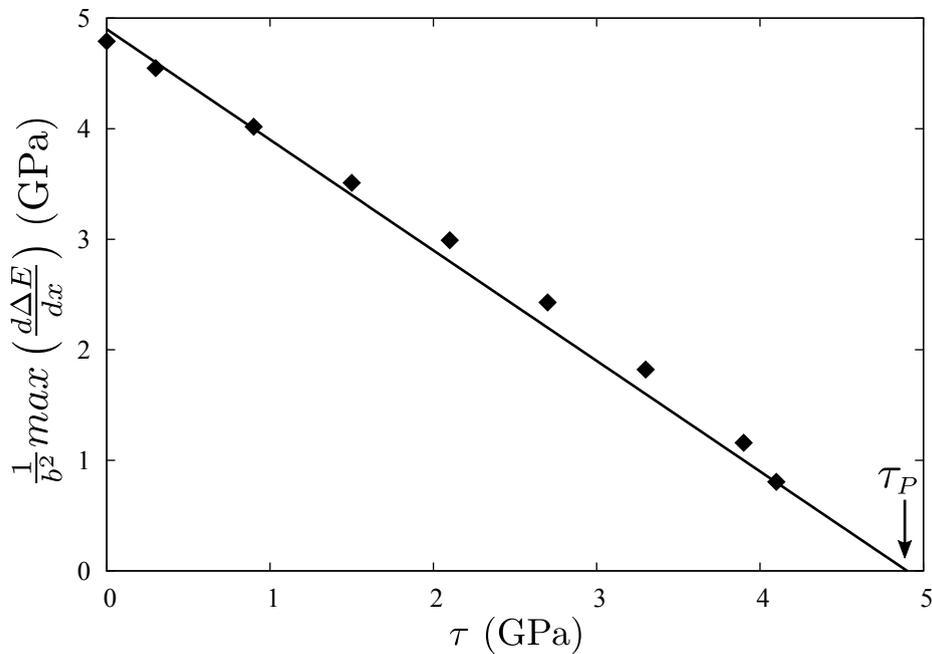


FIGURE 4.13 – Pente maximale des potentiels de Peierls, dimensionnées à une contrainte, calculés sous contrainte (figure 4.12).

4.1.5 Analyse du potentiel de Peierls

Asymétrie dynamique

Le potentiel de Peierls de la dislocation vis [100] dans le plan (010) est asymétrique. Une telle asymétrie des potentiels de Peierls existe par exemple dans les métaux bcc, qui sont des cristaux à haute symétrie [Gröger *et al.* 2008, Edagawa *et al.* 1997, Queyreau *et al.* 2011]. En outre, les énergies de défaut d'empilement généralisé obtenues en cisailant selon [100] dans le plan (010) sont elles aussi asymétriques (*cf* figure 2.4).

Pour l'ensemble des matériaux dont le potentiel de Peierls a été déterminé jusqu'à présent, une telle asymétrie est directement reliée à deux mécanismes de glissement différents, associés à des contraintes de Peierls différentes. C'est par exemple le cas dans les métaux bcc, avec les directions dites de maclage et d'anti-maclage [Gröger *et al.* 2008, Edagawa *et al.* 1997, Queyreau *et al.* 2011]. Dans ce type de matériau, l'asymétrie est qualifiée de géométrique. Dans le cas présent, une asymétrie du potentiel de Peierls est observée sans qu'on ait deux mécanismes de glissement différents.

Pour prouver cette singularité du potentiel de Peierls, un calcul NEB est réalisé en générant la configuration finale du calcul à partir de la configuration initiale. Premièrement, un dipôle de dislocation, tel que celui représenté figure 4.14(b), est utilisé. Dans ce dipôle de dislocation, la dislocation (+) est en position (1). Un cisaillement $\varepsilon_{yz} > 0$ est appliqué au dipôle de manière à faire glisser la dislocation (+) de la position (1) à la position (2) (figure 4.14(b)). Le potentiel de Peierls est calculé entre les positions (1) et (2), en utilisant les configurations obtenues lors du calcul de cisaillement comme répliques initiales et finales. Le potentiel de Peierls obtenu est représenté figure 4.14(a) en ligne pleine, il s'agit du potentiel décrit précédemment figure 4.10. Deuxièmement, un calcul de cisaillement est réalisé sur le dipôle ayant la dislocation en position (2). Un cisaillement $\varepsilon_{yz} < 0$ est appliqué au dipôle de manière à faire glisser la dislocation (+) de la position (2) à la position (1). Le potentiel de Peierls est calculé entre les positions (2) et (1), là encore à partir des configurations obtenues lors du calcul de cisaillement. Le potentiel de Peierls obtenu est représenté figure 4.14(a) en pointillé. Il s'agit du même potentiel, mais inversé. Le glissement de la dislocation entraîne le même enchaînement d'états transitoires dans les deux sens de glissement. L'asymétrie du potentiel de Peierls associée au glissement de la dislocation [100] dans (010) est dynamique.

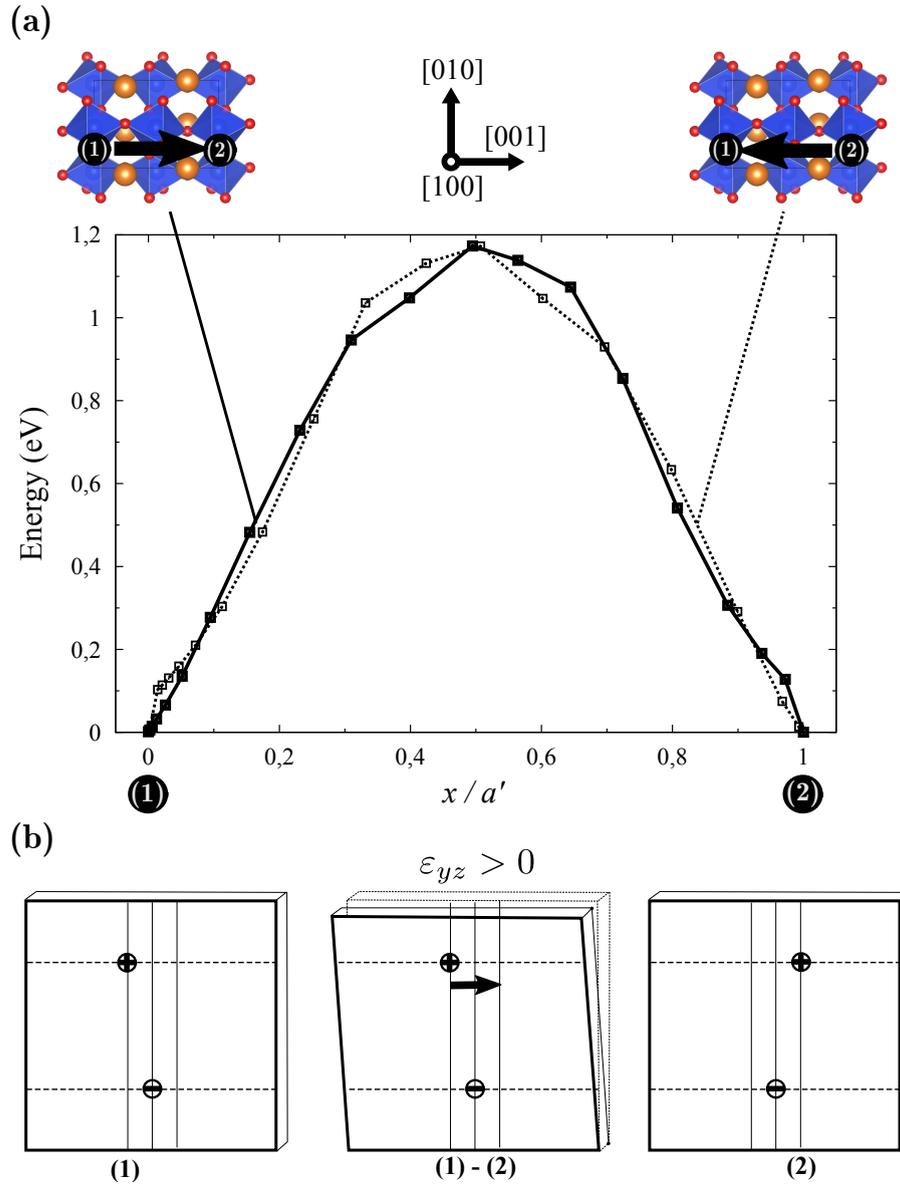


FIGURE 4.14

Potentiel de Peierls obtenu par modèle PN

Il est possible de calculer le potentiel de Peierls à partir des énergies du défaut d'empilement, et d'en extraire la contrainte de Peierls. Dans le modèle de Peierls-Nabarro, le potentiel est exprimé de la façon suivante [Joós & Duesbery 1997, Wang 2006, Ritterbex *et al.* 2015] :

$$\begin{aligned}
 V_p = & \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \gamma(S(x-m))a' \\
 & + \frac{a'}{2} \left\{ \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\delta\gamma}{\delta S(x-m)}(S(x-m)) \right]^a S(x-m)^a + \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\delta\gamma}{\delta S(x-m)}(S(x-m)) \right]^b S(x-m)^b \right\}
 \end{aligned}
 \tag{4.4}$$

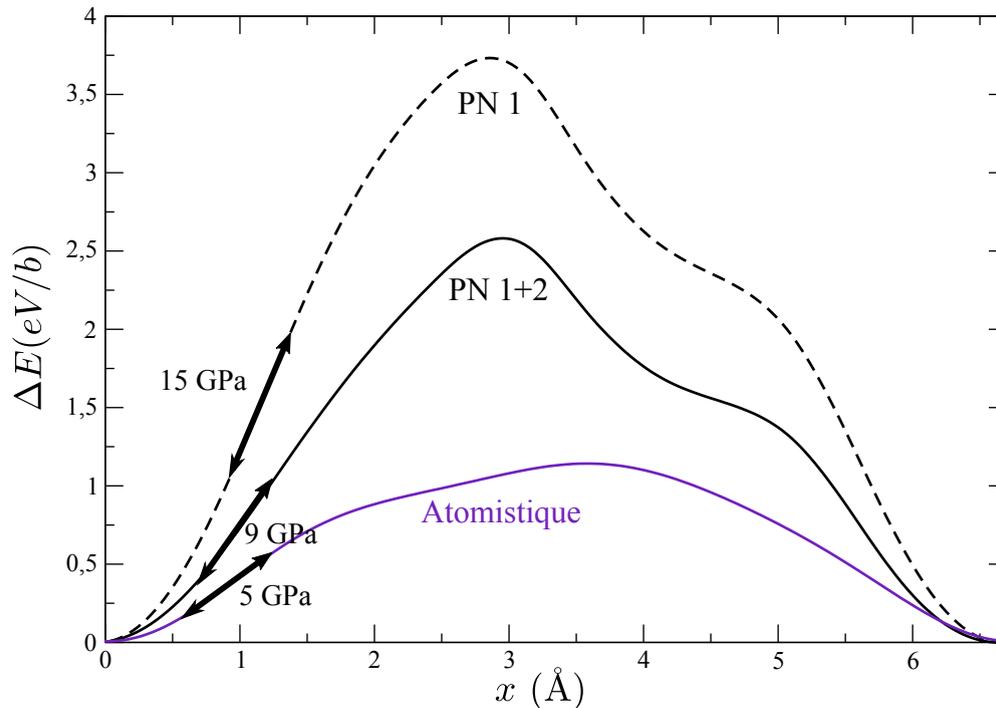


FIGURE 4.15 – Potentiels de Peierls de la dislocation $[100](010)$ à 30 GPa déterminés à l'aide de la méthode Peierls Nabarro, comparé aux résultats atomistiques. Dans le modèle de Peierls Nabarro, le potentiel est déterminé selon l'équation (4.4), en utilisant uniquement le premier terme de cette équation (PN 1), et les deux termes de l'équation (4.4) (PN 1+2).

La fonction $S(x - m)$ correspond à la fonction de désaccord de la dislocation pour un plan atomique m , et $\gamma(S)$ correspond à l'énergie de défaut d'empilement associée à un désaccord S . Dans l'expression (4.4), le premier terme correspond à l'énergie associée au désaccord des plans atomiques, le second terme est une correction élastique. Dans les travaux de [Ferré *et al.* 2007], les contraintes de Peierls sont calculées en ignorant le second terme de (4.4). Dans le cas de la dislocation $[100]$ dans le plan (010) à 30 GPa, la contrainte de Peierls qui est obtenue par [Ferré *et al.* 2007] est de 15 GPa, celle obtenue dans cette thèse est de 5 GPa. Un calcul est réalisé en prenant en compte la correction élastique, pour la dislocation $[100]$ dans (010) à 30 GPa. L'énergie de défaut d'empilement et la fonction de désaccord utilisées sont celles des travaux de [Ferré *et al.* 2007] (*cf* partie 3.4.1). Le potentiel de Peierls déduit de ces résultats est représenté figure 4.15. À partir du modèle PN, et en ne prenant en compte que le premier terme de l'équation (4.4) pour déterminer le potentiel de Peierls, cette barrière atteint une hauteur de 3,8 eV, et sa pente maximale correspond à une contrainte de 15 GPa. La prise en compte d'effets élastiques, à travers le second terme de l'équation (4.4), permet d'améliorer l'estimation du potentiel de Peierls puisque celui-ci a une hauteur maximale de 2,5 eV et une pente maximale correspondant à 9 GPa, plus proche de la barrière obtenue en atomistique, dont la valeur

maximale est 1,2 eV et la pente maximale correspond à 5 GPa.

L'utilisation du modèle de Peierls Nabarro permet d'estimer un potentiel de Peierls assymétrique, mais qui ne rend pas compte des particularités du glissement de la dislocation (assymétrie dynamique). En outre, les propriétés du potentiel de Peierls (contrainte de Peierls, hauteur de barrière) sont surestimées par le modèle PN.

Dans les résultats atomistiques, on a pu observer que le déplacement de la dislocation avait lieu par glissement successif des deux fractionnelles qui composent la dislocation (figure 4.6). La particularité de ce mécanisme de glissement, accessible en atomistique et non par méthode PN, peut expliquer l'asymétrie dynamique du potentiel de Peierls. Lorsque la première fractionnelle glisse vers la position d'équilibre suivante, une certaine quantité d'énergie correspondant à l'ouverture du défaut d'empilement entre les fractionnelles est dépensée. On observe qu'à mi-chemin, le cœur de dislocation est pratiquement dissocié (figure 4.6). Dans la suite du glissement, lorsque la fractionnelle de queue rejoint la partielle de tête, la fermeture du défaut d'empilement a un coût énergétique différent de son énergie d'ouverture. Ce mécanisme, identique dans les deux sens de glissement, est proposé pour expliquer le fait que des barrières asymétriques soient orientées selon le sens de glissement.

4.2 Modélisation de doubles décrochements

L'objectif de cette partie est de modéliser le double décrochement d'une dislocation vis $[100]$ dans le plan (010) par calculs atomistiques, afin d'estimer la structure d'un décrochement, et d'obtenir l'énergie correspondant à un décrochement isolé. Les cellules de calcul utilisées pour modéliser les doubles décrochements sont représentées figure 4.16(a), il s'agit de dipôles à trois dimensions (ce type de cellule de calcul est décrit partie 2.3.3). Les décrochements sont espacés, le long de la ligne de dislocation, d'une distance $l_z/2$, afin d'être équidistants le long de la ligne de dislocation. Les dimensions de la cellule l_x , l_y et l_z sont un paramètre du calcul et seront décrites plus loin.

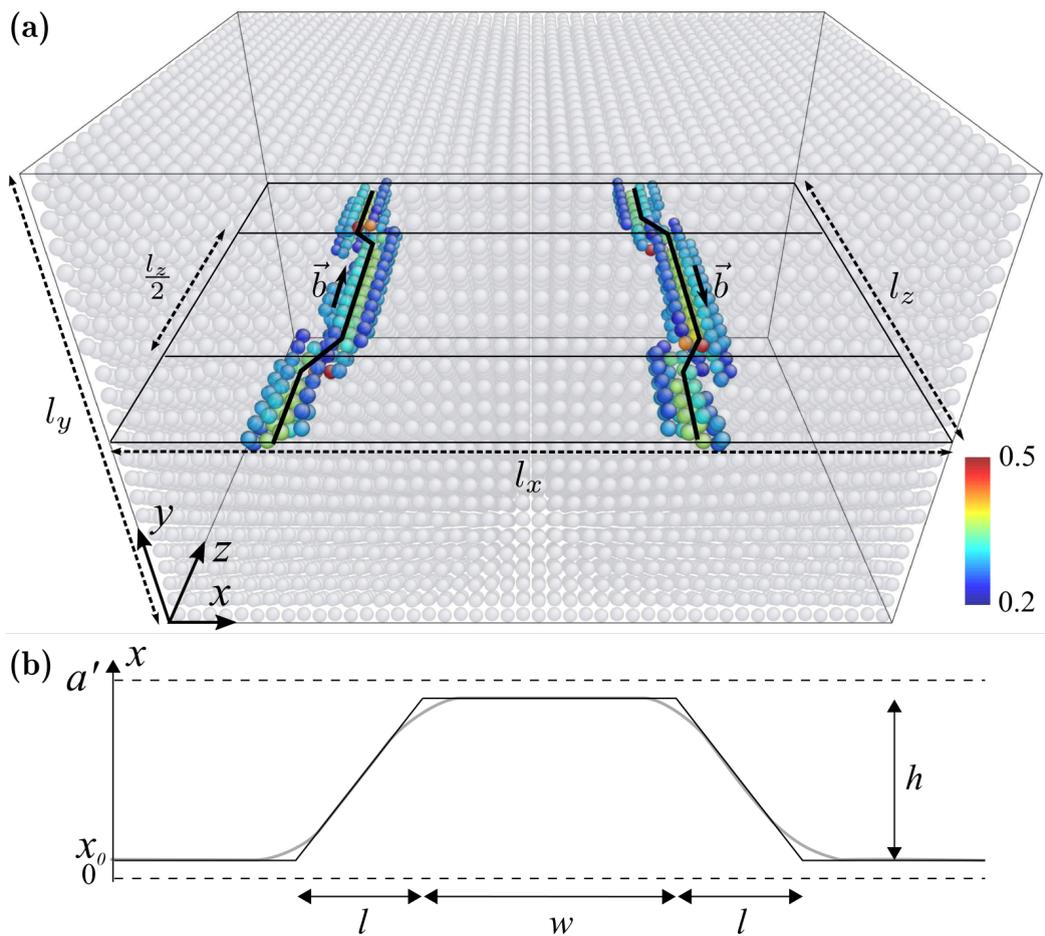


FIGURE 4.16 – (a) Dipôle de dislocations présentant un double décrochement, dans une cellule de dipôle à trois dimensions de dimensions ($l_x = 23 \cdot c$, $l_y = 22 \cdot b$, $l_z = 24 \cdot a$). Les décrochements sont espacés d'une distance $l_z/2$, ce qui rend les décrochements équidistants le long de la ligne de dislocation (selon z). La coloration des atomes proches de la ligne de dislocation correspond à un critère de centro-symétrie. (b) Représentation d'un double décrochement et des variables utilisées pour caractériser sa géométrie : l est la largeur d'un décrochement, w la longueur de portion de ligne qui a traversé le potentiel de Peierls, et h la hauteur du double décrochement.

4.2.1 Calcul de H_k

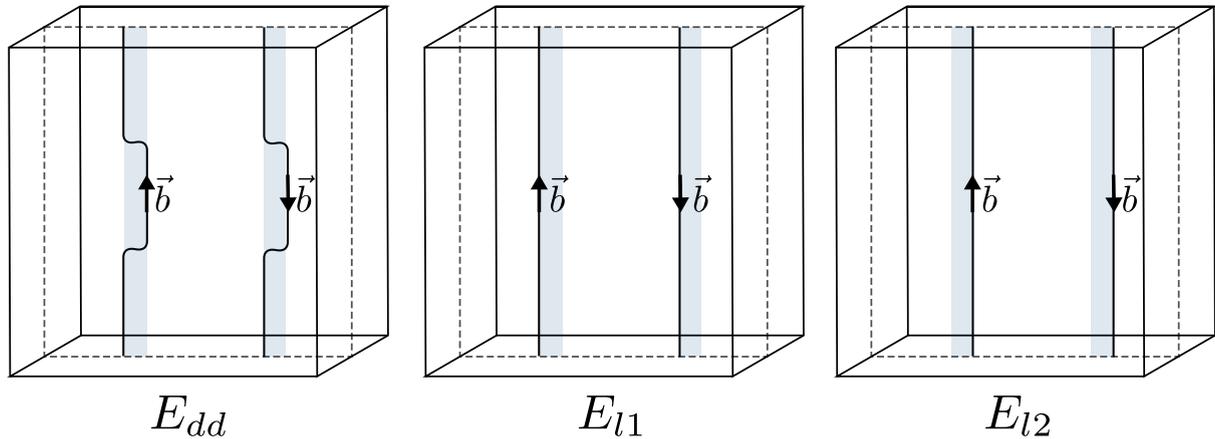


FIGURE 4.17 – Représentations des différentes cellules de calcul utilisées pour déterminer H_k . Les cellules contiennent un dipôle de dislocation. Dans le cas de la cellule de gauche, les dislocations du dipôle présentent un double décrochement.

À partir des notations introduites dans le chapitre 2 partie 2.1.4 (assimilation de la structure d'un double décrochement à un trapézoïde, figure 4.16(b)), à $\tau = 0$ et $w \rightarrow \infty$, l'enthalpie d'un double décrochement critique $\Delta H^*(\tau = 0, w \rightarrow \infty, h = a, l^*)$ tend vers une valeur asymptotique $2H_k$, qui correspond au double de l'énergie d'un décrochement isolé [Caillard & Martin 2003]. Bien que la condition $w \rightarrow \infty$ ne soit jamais atteinte en modélisation, il reste possible de modéliser des décrochements dans un isolement relatif, de calculer leur énergie, et de la corriger la valeur d'énergie des interactions du décrochement avec son environnement.

Le calcul de $2H_k$ est réalisé en combinant l'énergie de trois cellules de calcul : E_{dd} , E_{l1} et E_{l2} figure 4.17 [Pizzagalli *et al.* 2008b]. À partir de E_{dd} , l'énergie d'un dipôle de dislocations présentant un double décrochement, et de E_{l1} et E_{l2} , les énergies correspondent aux énergies de dipôles de dislocations droites (figure 4.17), il est possible d'estimer $2H_k$:

$$2H_k = \frac{1}{2} \left[E_{dd} - \frac{1}{2} (E_{l1} + E_{l2}) - E_{int}^{(kk)} - E_{int}^{(d)} \right] \quad (4.5)$$

Les deux derniers termes correspondent aux énergies d'interaction dans la cellule de calcul, dues à l'interaction élastique du dipôle de doubles décrochements dans la cellule de calcul (figure 4.16), dans laquelle des conditions périodiques selon les trois directions de l'espace sont appliquées. La première énergie d'interaction $E_{int}^{(kk)}$ représente l'interaction des dislocations le long de l'axe z , due à la présence de décrochements le long des lignes de dislocations. Cette énergie résiduelle est ce qui nous sépare du cas $w \rightarrow \infty$ qui correspond à un décrochement isolé, et devra être

calculée. La seconde énergie d'interaction, $E_{int}^{(d)}$, correspond à l'interaction entre les doubles décrochements du dipôle. Le décrochement constitue une perturbation de la ligne de dislocation. Si la portée entre les lignes de dislocations est importante ($l_x > l_z$ figure 4.16), la perturbation n'est plus distinguable. Nous verrons que le terme $E_{int}^{(d)}$ devient négligeable lorsque les cellules atteignent des dimensions suffisamment importantes selon les axes x et y (figure 4.16).

La valeur de $2H_k$ sera donc estimée en utilisant des tailles de boîtes aux dimensions (l_x, l_y) suffisamment importantes pour avoir $E_{int}^{(d)} \rightarrow 0$, et en déterminant analytiquement la valeur de $E_{int}^{(kk)}$.

Calcul de $E_{int}^{(kk)}$

Dans le modèle d'interaction élastique (modèle complet décrit partie 2.1.4), l'enthalpie d'un double décrochement peut être exprimée en fonction de ses dimensions w, l , et h (figure 4.16(b)). L'interaction de deux décrochements $W_{int}(w)$ le long de la ligne de dislocation est calculée en réalisant un développement limité du premier ordre en ($\frac{1}{w} \rightarrow 0$) de l'énergie élastique d'un double décrochement, ΔE_{elas} (expressions (2.8) et (2.9)) :

$$W_{int}(w, h, l) = \frac{\mu b^2}{4\pi w} \left(\frac{h^2}{2} + l^2 + \frac{(l^2 + \frac{h^2}{1-\nu}) (\frac{h^2}{\sqrt{l^2 + h^2} + l} - 2\sqrt{l^2 + h^2} + l)}{\sqrt{l^2 + h^2}} \right) \quad (4.6)$$

$W_{int}(w, h, l)$ présente une forte dépendance à la hauteur de décrochement h et à l'écart entre décrochements w , mais est insensible aux variations de l^1 . Dans les cellules de calcul utilisées, où la valeur de w correspond à $l_z/2$, l'énergie d'interaction doit être calculée entre les décrochement en prenant en compte leurs répliques périodiques :

$$\begin{aligned} E_{int}^{(kk)}(w = \frac{l_z}{2}, h) &= W_{int}(\frac{l_z}{2}, h) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} W_{int}(nl_z, h) - \sum_{n=1}^{\infty} W_{int}(nl_z + \frac{l_z}{2}, h) - \sum_{n=1}^{\infty} W_{int}(nl_z - \frac{l_z}{2}, h) \\ &\simeq W_{int}(\frac{l_z}{2}, h) \cdot \ln(4) \end{aligned} \quad (4.7)$$

1. $W_{int}(w, a, 10 \cdot b) = W_{int}(w, a, 1000 \cdot b)$ à 10^{-14} eV près, dans le cas d'un double décrochement [100](010) à 30 GPa.

Dans l'expression de $E_{int}^{(kk)}(l_z/2, h)$, le premier terme correspond à l'interaction élastique dans la cellule primaire, l'interaction avec les répliques périodiques est comprise dans les trois sommes qui suivent. La première somme correspond aux interactions des décrochements avec leur répliques périodiques de même signe, les deuxièmes et troisièmes sommes correspondent aux interactions entre décrochement avec leur répliques périodiques de signes différents.

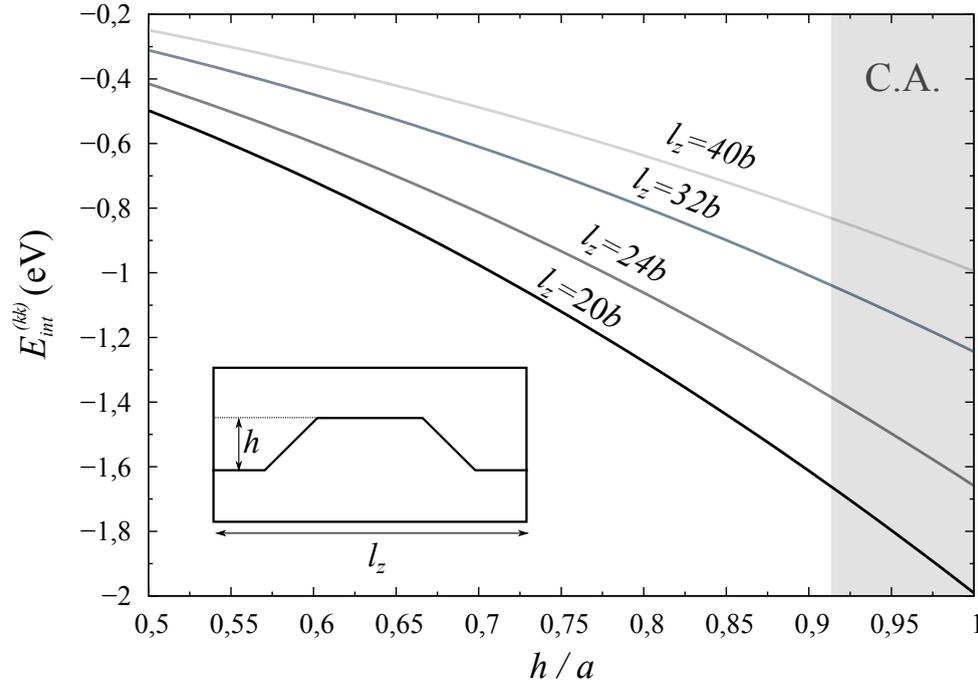


FIGURE 4.18 – Valeur des interactions entre décrochement le long de z , $E_{int}^{(kk)}(w, h)$, pour différentes cellules de calcul (l_z), et différentes géométries des double décrochement ($h, w = l_z/2$). La zone grisée correspond au domaine de valeur de h dans les calculs atomistiques (C.A.) pour lesquelles ce type de correction est utilisé dans la suite.

Les énergies d'interaction $E_{int}^{(kk)}(l_z/2, h)$ ont été calculées pour différentes valeurs de l_z , figure 4.18. Les dimensions l_z présentées correspondent aux tailles de systèmes utilisés dans la suite pour les calculs atomistiques. Pour ces tailles de système, les corrections élastiques à prendre en compte sont comprises entre 1 et 2 eV par double décrochement.

Calcul de H_k

L'énergie H_k a été calculée dans des cellules de calcul de différentes tailles. La procédure de calcul décrite précédemment est ainsi mise à l'épreuve en essayant d'obtenir un résultat affranchi des distances entre dislocations/décrochements. Le résultat est représenté figure 4.19. Sur cette figure, la valeur des énergies de décrochement corrigées et non corrigées sont représentées, pour deux jeux de dimensions transverses à la ligne de dislocation ($l_x = 47 \cdot a, l_y = 46 \cdot n$ et

$l_x = 63 \cdot a, l_y = 62 \cdot n$), en faisant varier la dimension l_z de $20 \cdot b$ à $40 \cdot b$ (figure 4.16).

Une forte dépendance en l_z est observée sur les résultats non corrigés. Cependant, une fois ôtés de l'énergie d'interaction E_{int}^{kk} , les résultats convergent vers la même valeur de $2H_k$. L'influence des paramètres l_x et l_y est quasi-nulle sur les énergies non-corrigées, ce qui rend l'approximation $E_{int}^{(d)} \rightarrow 0$ valable pour les tailles de cellules choisies.

Les paramètres l_x, l_y et l_z influent tous les trois sur les résultats corrigés, à travers le paramètre h qui correspond à la hauteur des double décrochements. Lorsque l_x, l_y ainsi que l_z augmentent, la hauteur h augmente aussi. Entre les systèmes de plus petite taille et ceux de plus grande taille, le paramètre h varie entre $0,92 \cdot a$ et $0,99 \cdot a$. L'effet d'une telle variation de h sur les énergies d'interaction E_{int}^{kk} est représentée en zone grisée figure 4.18. Cet effet des tailles de cellule de calcul sur h peut donc induire une différence de 0,3 eV sur les corrections élastiques. Sa prise en compte permet une meilleure convergence des résultats.

La valeur d'enthalpie de décrochement isolé H_k sur une dislocation vis [100] dans le plan (010) est

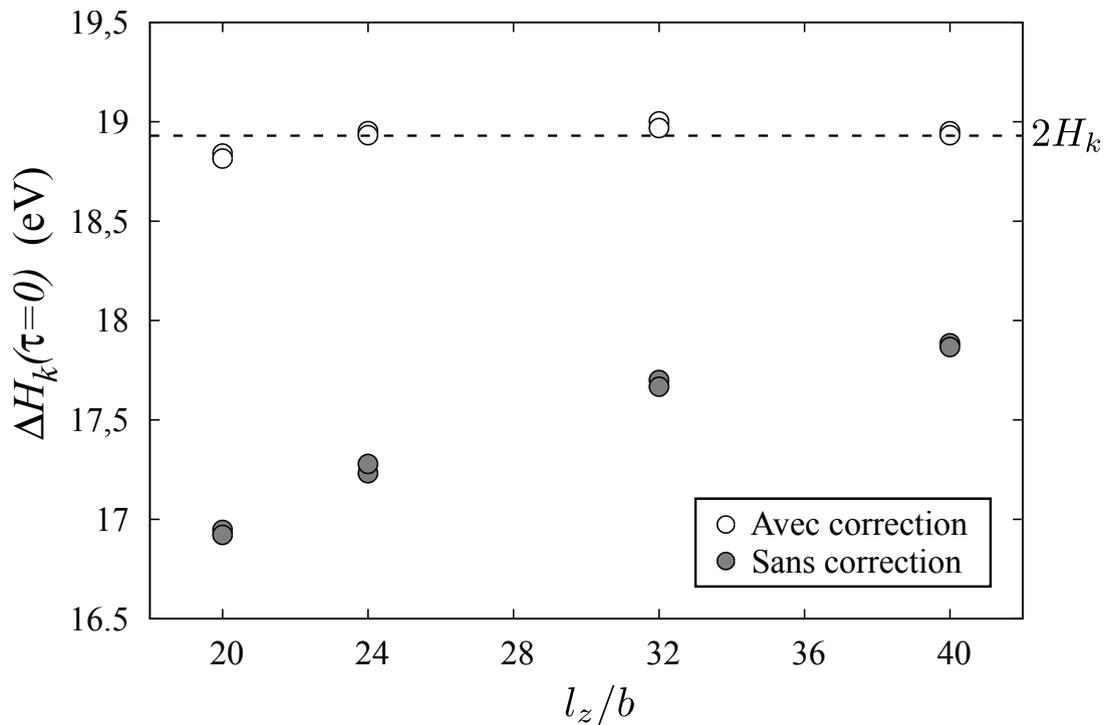


FIGURE 4.19 – Calcul de H_k pour une dislocation [100] présentant un double décrochement dans le plan (010) à 30 GPa, réalisé sur des cellules de calcul de type "dipôle 3D". Les énergies ont été calculées dans des cellules de deux tailles différentes selon l_x et l_y ($l_x = 47 \cdot a; l_y = 46 \cdot n$) et ($l_x = 63 \cdot a; l_y = 62 \cdot n$). Les énergies sont représentées selon les dimensions normalisées de l'axe l_z . Les cercles pleins correspondent aux résultats brutes du calcul (équation (4.5)), les cercles vides correspondent aux valeurs corrigées de E_{int}^{kk} .

de 9,45 eV. Cette valeur peut paraître importante devant l'enthalpie de nucléation d'un décrochement isolé de dislocation vis $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle (110)$ calculé dans MgO à 30 GPa [Amodeo *et al.* 2012],

où H_k est estimé à 2 eV. Cette valeur importante de H_k dans la bridgmanite peut être reliée à la friction de réseau du matériau, avec $\tau_P/\mu \sim 2,5 \cdot 10^{-2}$, alors que pour MgO $\tau_P/\mu \sim 0,16 \cdot 10^{-2}$. Outre cette considération qualitative, une estimation de H_k selon τ_P/μ peut être obtenue à partir d'une simplification du modèle IE [Koizumi *et al.* 1994]. Cette valeur est notée H_k^{approx} , elle s'exprime :

$$H_k^{approx} = \frac{\mu b^3}{2} \sqrt{\tau_P/\mu} \quad (4.8)$$

En prenant la valeur de $\tau_P = 4.9$, et la valeur de $\mu_{[100]}$ calculée en élasticité anisotrope (table 2.2), on obtient $H_k^{approx} = 9,32$ eV, une valeur étonnamment proche du résultat des simulations atomistiques $H_k = 9,45$ eV.

4.2.2 Structure des doubles décrochements

Bien qu'il soit impossible de modéliser de double décrochement isolé, on peut se servir de la structure des doubles décrochements modélisés pour estimer un étalement minimal de décrochement isolé. La structure de deux double décrochement issue d'un dipôle de dislocation vis [100] à 30 GPa est représentée figure 4.20, pour une cellule de calcul de dimensions $l_x = 63 \cdot a$, $l_y = 62 \cdot n$ et $l_z = 40 \cdot b$. Les décrochements sont ajustés par une fonction $f_k(z)$ (cette fonction, décrite dans la méthode expression (2.19), est issue de [Joós & Zhou 2001]). Pour les quatre décrochements, la valeur moyenne du paramètre d'ajustement adimensionnel λ , caractérisant l'étalement des décrochements, est $\bar{\lambda} = 3,29 \text{ \AA}/b$ ($\lambda \cdot b$ équivaut à l'étalement de décrochement l). Les doubles décrochements sont composés de deux décrochements de dimensions individuelles pouvant être caractérisées par λ_1 et λ_2 . Ces étalements sont très proches (déviations maximales de λ_1 et λ_2 de 0,08 par rapport à $\bar{\lambda}$).

4.3 Enthalpies de nucléation critique de double décrochement

L'enthalpie de nucléation critique d'un double décrochement à τ , notée $\Delta H^*(\tau, h^*, w^*, l^*)$, est déterminée en couplant les résultats des calculs atomistiques au modèle élastique de double décrochements trapézoïdaux - le modèle d'interaction élastique complet est décrit partie 2.1.4. Les paramètres structuraux (a', b), élastiques (μ, ν), ainsi que le potentiel de Peierls V_P , s'intègrent directement aux équations du modèle d'interaction élastique. La valeur du paramètre ρ , qui

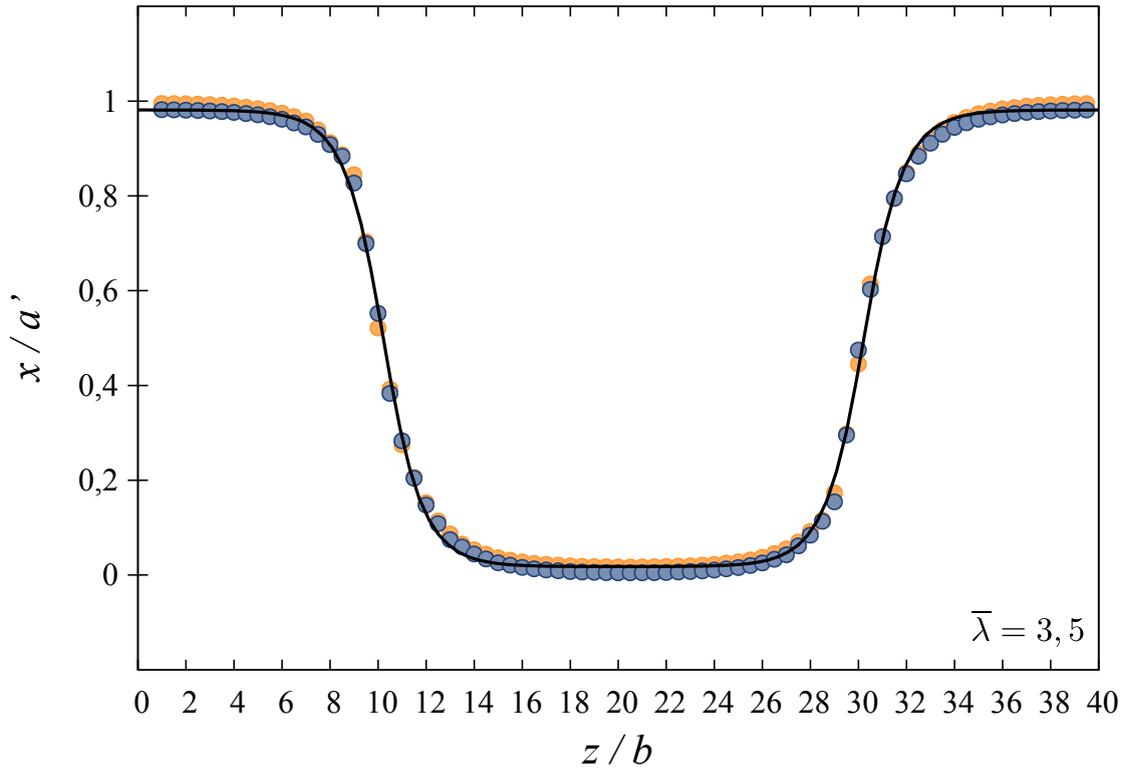


FIGURE 4.20 – Structure de doubles décrochements sur une dislocation $[100]$ dans (010) à 30 GPa. Les cercles pleins bleus et oranges correspondent aux deux dislocations de vecteur de Burgers de sens opposés qui composent le dipôle modélisé dans des cellules de calcul du type "dipôle 3D". Une fonction continue $f_k(z)$ est ajustée sur les points (expression (2.19)), représentée en noir.

apparaît dans le modèle lors du calcul de l'énergie intrinsèque de la dislocation (ΔE_{self} , expression (2.8)), est déterminée en appliquant les conditions d'un décrochement isolé aux équations du modèle IE.

4.3.1 Paramétrage du modèle IE à $\tau = 0$ par les résultats atomistiques

L'enthalpie d'un double décrochement $\Delta H(\tau, h, w, l)$ correspond à la somme des expressions (2.6), (2.7), (2.9), et (2.8). Dans le cas où le double décrochement correspond à deux décrochements isolés infiniment éloignés, soit $\tau = 0, w \rightarrow \infty$ et $h = a'$, l'enthalpie du double décrochement

devient :

$$\begin{aligned} \Delta H_k^*(\tau = 0) = 2H_k = \frac{\mu b^2}{2\pi} \times \\ \left[\frac{l^2 + a'^2/(1-\nu)}{\sqrt{l^2 + a'^2}} \cdot \ln\left(\frac{\sqrt{l^2 + a'^2}}{e\rho}\right) - l \cdot \ln(l/e\rho) + l \cdot \ln\left(\frac{2l}{l + \sqrt{l^2 + a'^2}}\right) + l - \sqrt{l^2 + a'^2} \right] \\ + 2 \frac{\sqrt{l^2 + a'^2}}{a} \int_0^{a'} V_P(x) dx \end{aligned} \quad (4.9)$$

Dans ces conditions, l'énergie d'un décrochement isolé est exprimée en fonction de deux inconnues, l'étalement du décrochement l , et le paramètre ρ , qui correspond au rayon de coupure au delà duquel on considère que deux fragments infinitésimaux d'une même dislocation n'interagissent plus ensemble [Hirth & Lothe 1982]. La figure 4.21 illustre l'influence du paramètre ρ sur la valeur $H_k(l)$ issue de l'expression (4.9), calculée dans le cas d'un décrochement [100](010) à 30 GPa. La valeur de l doit satisfaire la condition d'un décrochement stable, soit $\frac{dH_k}{dl} = 0, l = l^*$. Pour chaque valeur de ρ , il n'existe donc qu'une valeur d'enthalpie de décrochement isolé H_k , associée à un étalement de décrochement l^* (figure 4.21).

Le résultat atomistique obtenu pour H_k est utilisé pour déterminer le jeu de valeur ρ et l^* pour lequel la valeur de H_k prédite par le modèle d'interaction élastique est identique à la valeur atomistique. On peut observer sur la figure 4.21 que pour $\rho = 0,2 \cdot b$, il existe un décrochement isolé stable d'énergie de $H_k = 9,45$ eV, identique à celle obtenue en atomistique.

La valeur de l^* correspondant à $\rho = 0,2$ est égale à $4,11 \cdot b$. Cette valeur prédite par le modèle IE est comparée aux résultats atomistiques figure 4.19. Sur cette figure, on observe un bon accord entre les résultats atomistiques et les prédictions du modèle élastique obtenus avec $\rho = 0,2$. L'étalement observé pour les décrochements est bien reproduit par le modèle. Cette adéquation renforce le choix d'un modèle d'interaction élastique basé sur une géométrie trapézoïdale des doubles décrochements.

4.3.2 Résultats du modèle à $\tau \geq 0$

L'expression de l'enthalpie de nucléation d'un double décrochement $\Delta H(\tau, h, w, l)$ peut désormais être exprimée par le modèle d'interaction élastique. À une valeur de τ donnée, la détermination du point selle de la fonction à trois variables qu'est $\Delta H^*(h^*, w^*, l^*)$ a lieu en plusieurs étapes. Premièrement, une valeur de $h = h_{test}$ est choisie pour réduire la fonction à deux variables. Deuxièmement, le point selle de la fonction $H^*(h_{test}, w^*, l^*)$ est déterminé. La figure 4.23

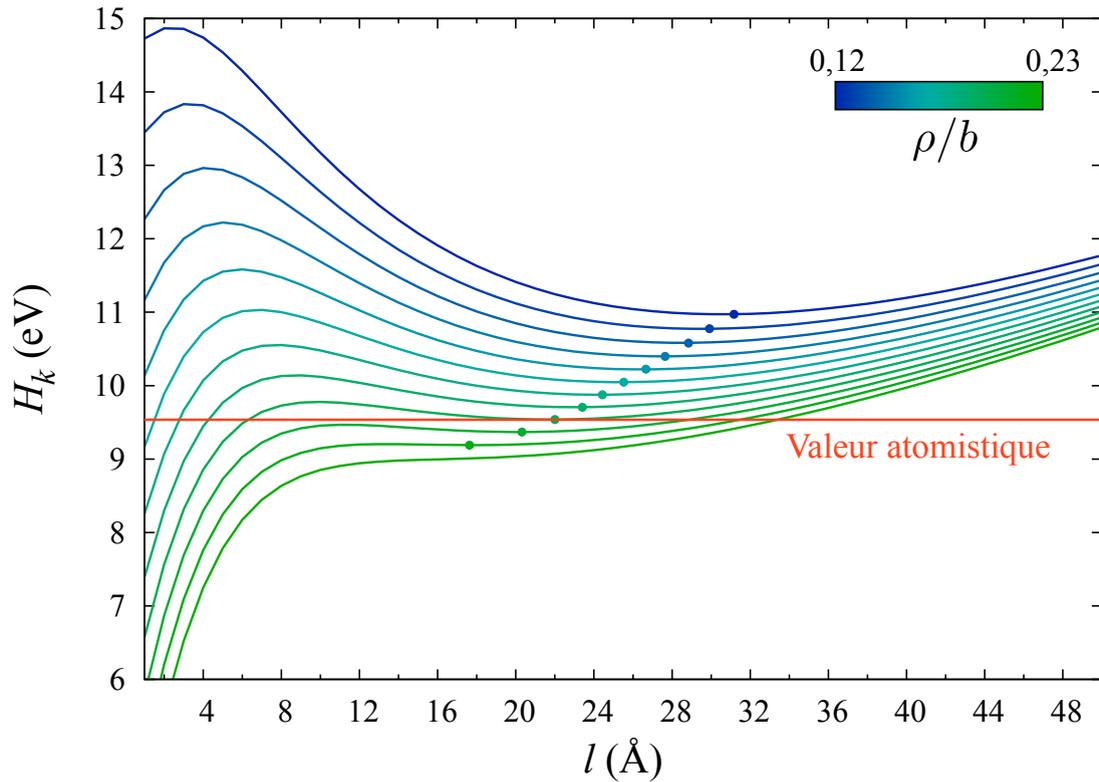


FIGURE 4.21 – Enthalpie de décrochement isolé en fonction de l'étalement du décrochement l (expression (4.9)), calculée pour différentes valeurs du paramètre ρ . Pour chaque courbe, excepté la courbe tracée pour $\rho = 0.23 \cdot b$, il existe une valeur l^* tel que $\frac{dH_k}{dl} = 0$. Cette condition est représentée par un cercle plein. La valeur de l'énergie de décrochement isolée H_k obtenue en atomistique est représentée par un trait rouge.

représente $\Delta H(\tau, h, w, l)$ à une valeur de contrainte $\tau = 3300$ MPa, et une valeur $h_{test} = 2,5$ Å. La configuration critique du double décrochement pour τ et h_{test} correspond au point selle de la surface d'énergie représentée figure 4.23, point selle associé aux dimensions de double décrochement w^* et l^* . Les valeurs de $\Delta H(\tau, h, w, l)$ sont calculées pour d'autres valeurs de h_{test} , la configuration critique du double décrochement est celle pour laquelle l'enthalpie $H(\tau, h^*, w^*, l^*)$ est la plus faible. Les résultats du modèle élastique sont obtenus en prenant en compte la variation des potentiels de Peierls avec la contrainte (figure 4.13). Cependant, on peut noter pour la suite que cette variation des potentiels de Peierls est négligeable sur les résultats du modèle d'interaction élastique.

L'enthalpie de nucléation critique $\Delta H^*(\tau, h^*, w^*, l^*)$ est représentée figure 4.24. À $\tau = 0$, l'enthalpie de nucléation critique est égale au double de l'enthalpie d'un décrochement isolé calculée en atomistique. L'enthalpie décroît jusqu'à devenir nulle pour une contrainte égale à la contrainte de Peierls.

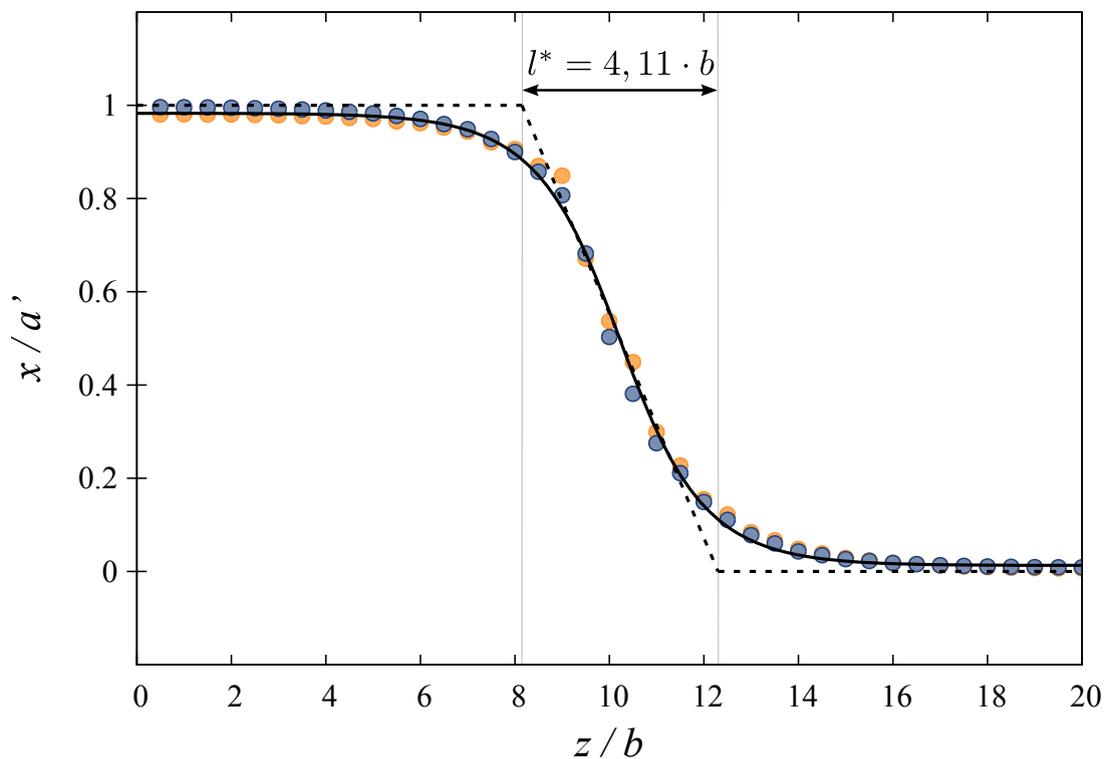


FIGURE 4.22 – Comparaison de la structure de double décrochement obtenue par calcul atomistique, à la structure de double décrochement prédite par le modèle atomistique pour $\rho = 0, 2 \cdot b$.

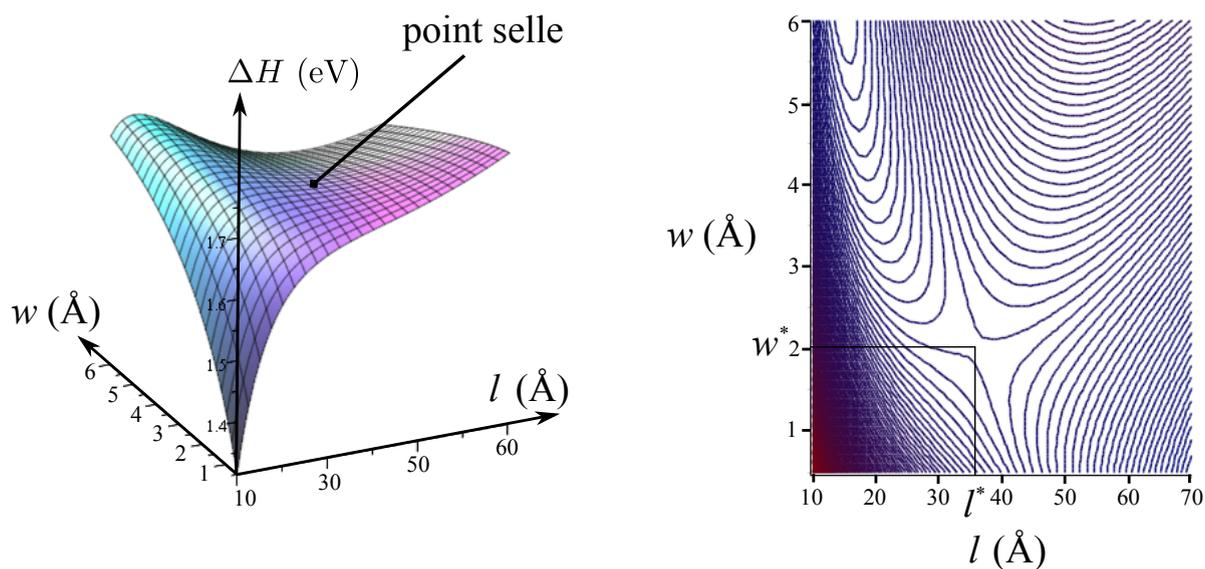


FIGURE 4.23 – Enthalpie de nucléation critique d'un double décrochement $\Delta H(\tau, h, w, l)$ à τ et h fixés, et observation du point selle auquel correspond la configuration critique pour le paramètre h correspondant.

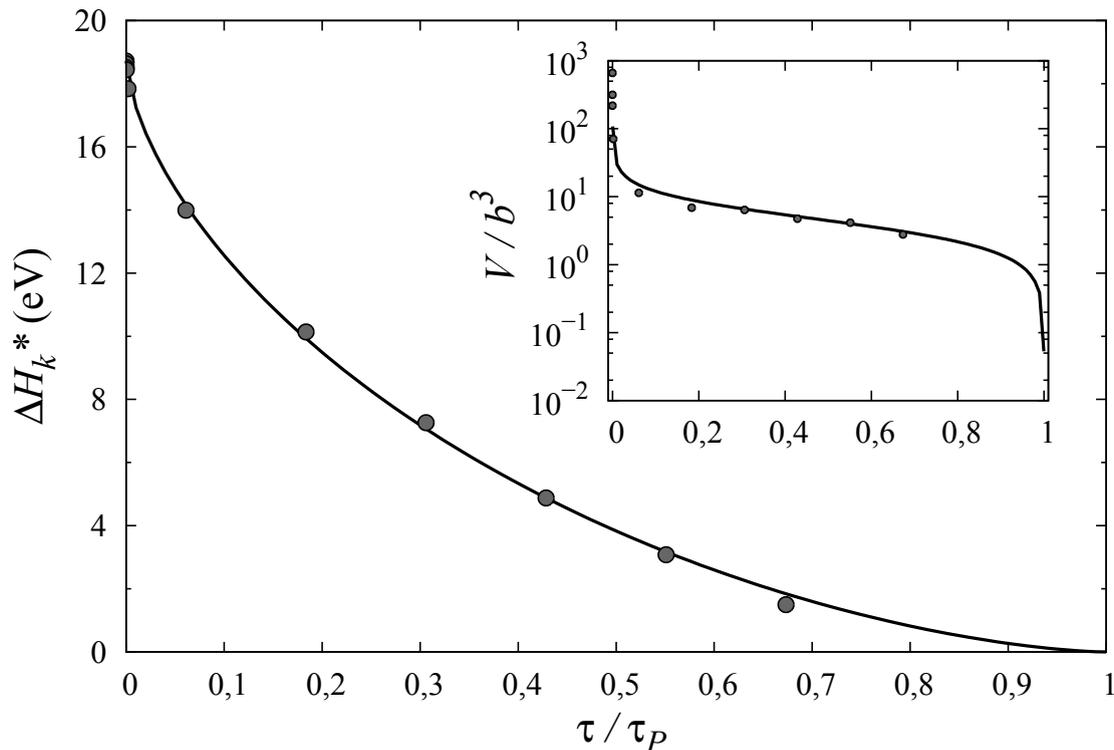


FIGURE 4.24 – Enthalpie de nucléation de double décrochement critique $\Delta H^*(\tau, h^*, w^*, l^*)$ en fonction de la contrainte τ . Les valeurs sont ajustées par une loi de Kocks (expression (4.10)), avec $p = 0,65$ et $q = 1,56$. Le volume d'activation normalisé V/b^3 est représenté dans l'insert.

Le volume d'activation correspondant est aussi représenté figure 4.24. Ce volume est calculé à partir des paramètres géométriques du double décrochement critiques : $h^*(\tau)$, $w^*(\tau)$ et $l^*(\tau)$. À $\tau \rightarrow 0$, le volume d'activation diverge. Cette divergence provient du comportement du paramètre $w^*(\tau)$, représenté figure 4.25, correspondant à la distance entre décrochements. La fonction $w^*(\tau)$ décroît rapidement, et est relativement constante à partir de $\tau = 0,1 \cdot \tau_P$, d'une valeur de l'ordre de 10^1 \AA . La divergence du volume d'activation à basse contrainte est physiquement cohérente, il s'agit de la limite $\tau \rightarrow 0$ et $w \rightarrow \infty$ pour laquelle le double décrochement critique correspond à deux doubles décrochements isolés. Si la divergence du volume d'activation à $\tau \rightarrow 0$ est reproduite par le modèle IE, il n'est en revanche pas décrit par un modèle de tension de ligne [Caillard & Martin 2003], ce qui justifie l'emploi d'un modèle IE pour décrire au mieux le mécanisme de double-décrochement à faible contrainte.

À partir de $\tau > 0,1 \cdot \tau_P$, la distance varie faiblement. Le volume d'activation (figure 4.22) déduit des paramètres géométriques de la configuration critique continue lentement à décroître. L'évolution du double décrochement critique à partir de $\tau = 300 \text{ MPa}$ est représentée figure 4.26. L'évolution indépendante des paramètres $h^*(\tau)$ et $l^*(\tau)$ n'est pas monotone, bien que la surface constituée par le double décrochement décroisse continûment. Comme on peut le voir sur la figure 4.25, l'évolution de la géométrie du double décrochement est bien rendue, même à haute contrainte.

Cette caractéristique du modèle trapézoïdal constitue une amélioration par rapport au modèle de double décrochements droits [Koizumi *et al.* 1993, Mitchell *et al.* 1999, Amodeo *et al.* 2012], qui au delà d'une contrainte $\tau > 0,2 \cdot \tau_P$ ne permet plus de caractériser la nucléation d'un double décrochement critique.

Les valeurs d'enthalpie de nucléation critique figure 4.24 sont ajustées par une loi empirique,

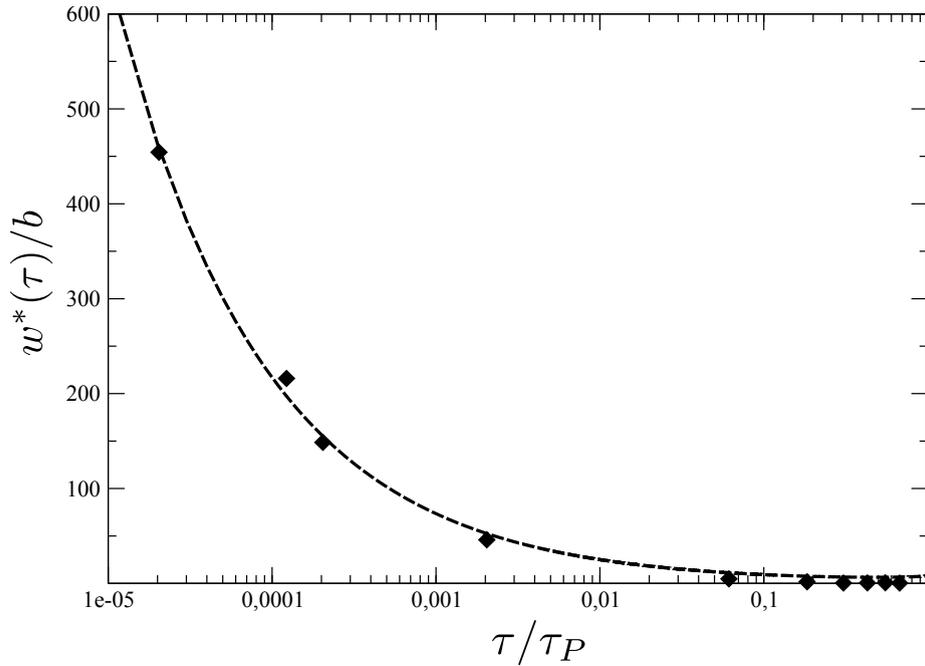


FIGURE 4.25 – Évolution de la distance entre double décrochement dans les configurations critique en fonction de la contrainte, calculée par le modèle élastique et ajustée par une fonction continue (expression (4.11)), avec $\delta = 9.2$ et $n = 0.47$.

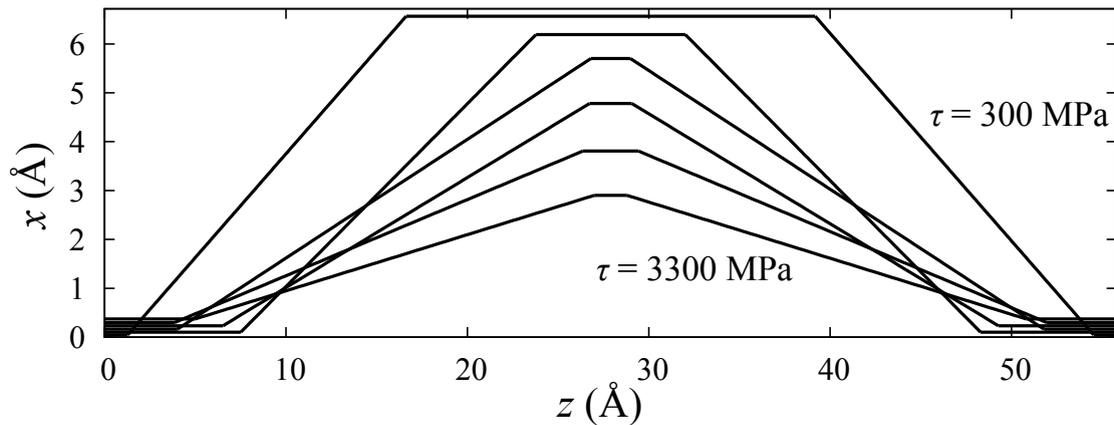


FIGURE 4.26 – Évolution de la géométrie d'un double décrochement critique à haute contrainte. Les doubles décrochements représentés correspondent aux 6 dernières configurations du graphe 4.22.

introduite dans [Kocks *et al.* 1975], du type :

$$H^*(\tau, h^*, w^*, l^*) = 2H_k \left(1 - \left(\frac{\tau}{\tau_P} \right)^p \right)^q \quad (4.10)$$

Les paramètres d'ajustement obtenus sont $p = 0,65$ et $q = 1,56$. Le volume d'activation est également ajusté par une fonction continue, dérivant de l'équation (4.10). Dans le régime basse contrainte, le paramètre $w^*(\tau)$ est bien représenté par une fonction continue tel que :

$$w^*(\tau/\tau_P) = \left(\frac{\delta}{\tau/\tau_P} \right)^n e^{\tau/\tau_P} \quad (4.11)$$

Cette fonction phénoménologique est proche de la fonction utilisée dans [Amodeo 2011]. Les paramètres qui permettent d'ajuster les valeurs de $w^*(\tau)$ obtenu par le modèle IE sont $\delta = 9.2$ et $n = 0.47$. À faible contrainte, la fonction (4.11) ajuste bien la divergence de $w^*(\tau)$. En revanche, pour $\tau > 0,1 \cdot \tau_P$, la fonction (4.11) ajuste mal le plateau de valeurs de $w^*(\tau)$, mais reste une bonne approximation au bon ordre de grandeur.

4.4 Vitesse de dislocation

La propagation de la dislocation par mécanisme de double décrochement qui a été décrite dans la partie 2.1.2 a lieu en deux étapes. Premièrement, la dislocation franchit localement la friction de réseau par nucléation d'un double décrochement. Ce processus ainsi que la barrière d'enthalpie qui lui est associée, l'enthalpie de nucléation critique de double décrochement, sont maintenant connus. Deuxièmement, le double décrochement nucléé subit une phase d'expansion sous l'effet de la contrainte, ce processus correspond à la migration des décrochements.

L'enthalpie de migration peut être estimée dans un modèle de Frenkel-Kontorova (FK) [Joós & Zhou 2001]. Dans l'équation (2.19), qui permet d'ajuster la structure des double décrochements, le paramètre λ correspond à la largeur des décrochements par unité de vecteur de Burgers. Pour un décrochement [100](010) à 30 GPa $\lambda = 3,29$ (figure 4.19). Le modèle de Frenkel-Kontorova permet de développer les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
 H_n^{(FK)} &= T_0 \frac{2}{\pi \lambda} \\
 H_m^{(FK)} &= 8T_0 \left(\cosh(r) + \frac{\sinh(r)}{r} \right) \exp(-\pi \lambda) \\
 T_0 &= \left(\frac{\Gamma_0 h^2}{a} \right)
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

$H_n^{(FK)}$ et $H_m^{(FK)}$ correspondent respectivement aux énergies de nucléation et de migration dans le modèle de Frenkel Kontorova. Γ_0 correspond à la tension de ligne, et $r = \frac{h}{a}$. Ces deux équations permettent d'établir que pour $\lambda > 2$, $H_n^{(FK)} \gg H_m^{(FK)}$ ². L'étalement des décrochements observé dans les modélisations atomistiques permet donc d'affirmer que l'enthalpie de nucléation de double décrochements est plusieurs ordres de grandeur supérieure à l'enthalpie de migration de décrochement. Cela reste vrai à contrainte non nulle, car la géométrie critique des doubles décrochements obtenue par le modèle IE à $\tau \geq 0$ reste supérieure à $3 \cdot b$ (figure 4.26).

Dans le cas d'une énergie de migration inférieure à l'énergie de nucléation, la nucléation est le processus limitant la progression de la dislocation, et la vitesse de la dislocation correspond à sa vitesse de nucléation [Caillard & Martin 2003, Dorn & Rajnak 1964], (expression 2.4) :

$$v = \frac{a\nu_D bL}{2d^2} \exp\left(-\frac{\Delta H^*(\tau)}{kT}\right) \tag{4.13}$$

Dans cette expression, d est la longueur moyenne d'un double décrochement, soit $d = w^*(\tau) + l^*(\tau)$ (expression(4.11))³. Le paramètre L correspond à la longueur moyenne des dislocations, et ν_D est la fréquence de Debye. La fréquence de Debye est définie par $\nu_D = \frac{1}{k_B^2} \left(\frac{6\pi}{V_{at}} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot v_s$, avec v_s la vitesse du son dans la bridgmanite et V_{at} le volume moyen par atome, v_s et V_{at} sont tous deux dépendant des conditions de pression et de température. La vitesse du son peut être estimée à partir des vitesse d'onde de compression v_l et vitesse d'onde de cisaillement v_t ($v_s = \left(\frac{1}{3v_l^3} + \frac{2}{3v_t^3} \right)^{-\frac{1}{3}}$), dont les valeurs selon P et T sont calculées en DFT dans [Wentzcovitch *et al.* 2004]. À pression donnée, les valeurs de fréquence de Debye présentent une faible dépendance à la température [Anderson 1998, Wentzcovitch *et al.* 2004]. Quant à la dépendance à la pression, elle est tout aussi faible⁴. De telles variations de ν_D avec P et T sont négligeable devant les variations du terme exponentiel dans (4.13). La fréquence de Debye est donc fixée à $\nu_D = 3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

2. Par exemple, pour $\lambda = 3, 29$ et $r = 1$, $H_n^{(FK)} = 0, 19 \cdot T_0$ et $H_m^{(FK)} = 0, 17 \cdot 10^{-3} \cdot T_0$.

3. Nous avons pu vérifier cependant que l'usage dans le modèle IE de $d = w^*(\tau) + l^*(\tau)$, ou de $d = 10 \cdot b$ n'apporte pas de changement significatif dans les valeurs de vitesses calculées.

4. À T=300 K $\nu_D = 2, 7 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ à P=0 GPa, et $\nu_D = 3 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ à P=30 GPa

La vitesse d'une dislocation d'une longueur $L = 1 \mu\text{m}$ est représentée figure 4.27 pour différentes

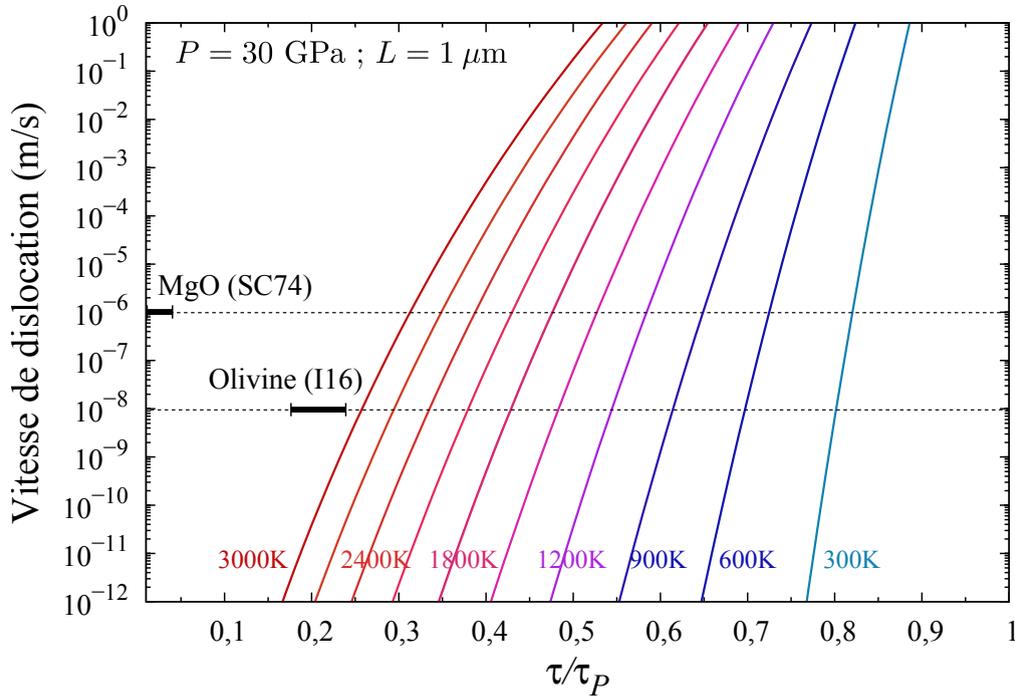


FIGURE 4.27 – Vitesse d'une ligne de dislocation vis [100] dans le plan (010), d'une longueur $L = 1 \mu\text{m}$, exprimée en fonction de la contrainte et de la température. Les vitesses de dislocations mesurées expérimentalement dans d'autres minéraux sont reportées : SC74 pour MgO à $T = 400 \text{ K}$ et pression ambiante [Singh & Coble 1974], et I16 pour l'olivine à température et pression ambiante [Idrissi *et al.* 2016].

conditions de contrainte et de température figure 4.27. Les vitesses obtenues s'étendent sur plusieurs ordres de grandeurs. Dans le périclase (MgO), des vitesses de l'ordre de 10^{-6} m/s ont été mesurées, mais à des conditions de pression et de température non équivalentes (pression ambiante, $T = 400 \text{ K}$) [Singh & Coble 1974]. Dans l'olivine, une vitesse de l'ordre de 10^{-8} m/s a été mesurée à pression et température ambiante [Idrissi *et al.* 2016]. On observe figure 4.27 que des vitesses de l'ordre de $10^{-6} - 10^{-8} \text{ m/s}$ sont atteignables dans la bridgmanite à des contraintes et des températures largement supérieures. Par exemple, pour obtenir les vitesses mesurées dans l'olivine à 300 K , une contrainte quatre fois supérieure est nécessaire. L'ordre de grandeur obtenu dans cette estimation de la vitesse de dislocation dans la bridgmanite est donc réaliste. Par ailleurs, cette estimation est en accord avec les résultats expérimentaux selon lesquels la bridgmanite supporte des niveaux de contraintes plus élevés que les autres minéraux du manteau terrestre [Weidner *et al.* 2001].

Chapitre 5

Glissement thermiquement activé

[100](010) et [010](100) à 30 et 60 GPa

Dans ce chapitre, le mécanisme de double décrochement est étudié pour la dislocation vis [100] dans (010) et la dislocation vis [010] dans (100) à 30 et 60 GPa. La première partie de ce chapitre présente les potentiels de Peierls et les enthalpies de décrochements isolés calculés en atomistique aux pressions du manteau. Les deux parties suivantes ont pour objectif de calculer les enthalpies de nucléation critique de doubles décrochements. Le modèle IE sera tout d'abord appliqué pour les dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) à 60 GPa. Puis nous montrerons que l'enthalpie de nucléation critique peut être déterminée à partir d'un modèle d'interaction de décrochement à longue portée paramétré sur les résultats du modèle IE.

5.1 Résultats atomistiques

Les méthodes utilisées dans cette partie sont celles appliquées précédemment au cas de la dislocation vis [100] dans (010) à 30 GPa, chapitre 4.

5.1.1 Dislocation vis [100] dans le plan (010)

Potentiel de Peierls

Des dipôles à deux dimensions (cellules de calcul décrites partie 2.3.2), de dimension ($l_x = 32 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$ et $l_z = b$), sont utilisés pour déterminer les potentiels de Peierls de la dislocation vis [100] dans (010). La correction énergétique à apporter au MEP pour obtenir V_P (ΔE , expression (4.2)) représente 0,038 ; 0,04 et 0,046 eV/b respectivement aux pressions de 60, 100 et 140 GPa. Les potentiels de Peierls à 30, 60, 100 et 140 GPa sont représentés figure 5.1. La pression exercée modifie trois caractéristiques des potentiels : la hauteur du point col, la forme, et enfin la valeur de la pente maximale. On retrouve l'ensemble de ces données table 5.1.

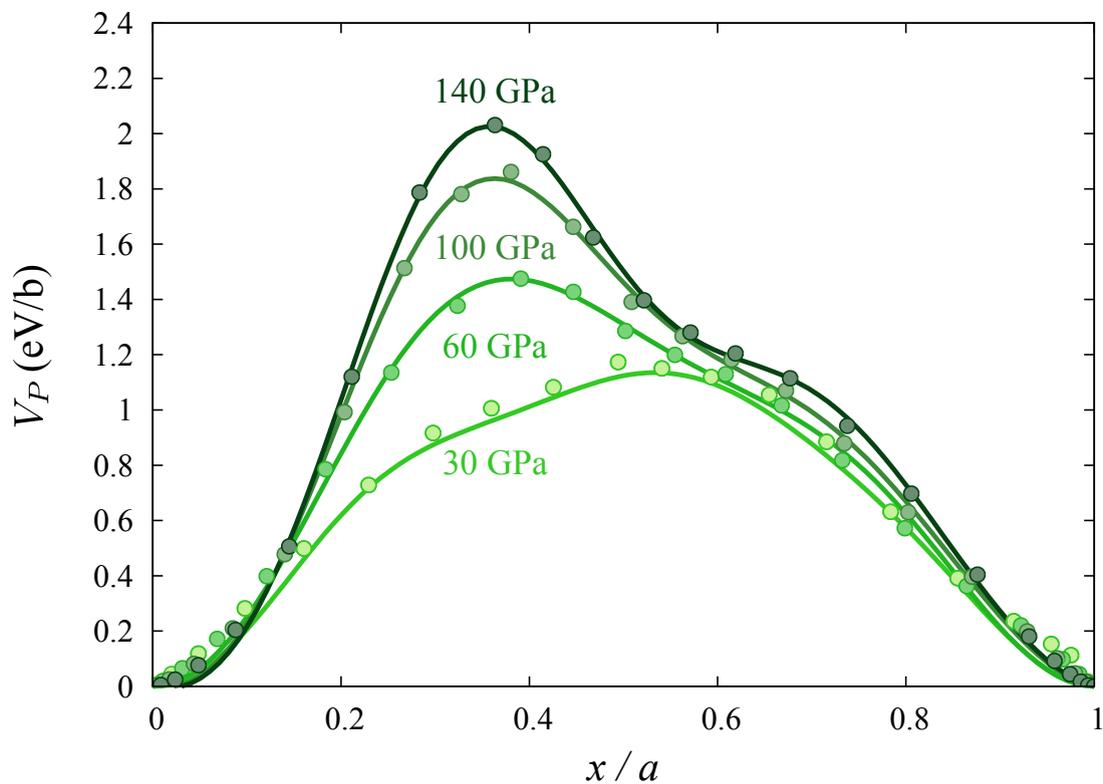


FIGURE 5.1 – Potentiels de Peierls V_P calculés à 30, 60, 100 et 140 GPa. Les potentiels sont ajustés par une somme de fonctions sinusoïdales.

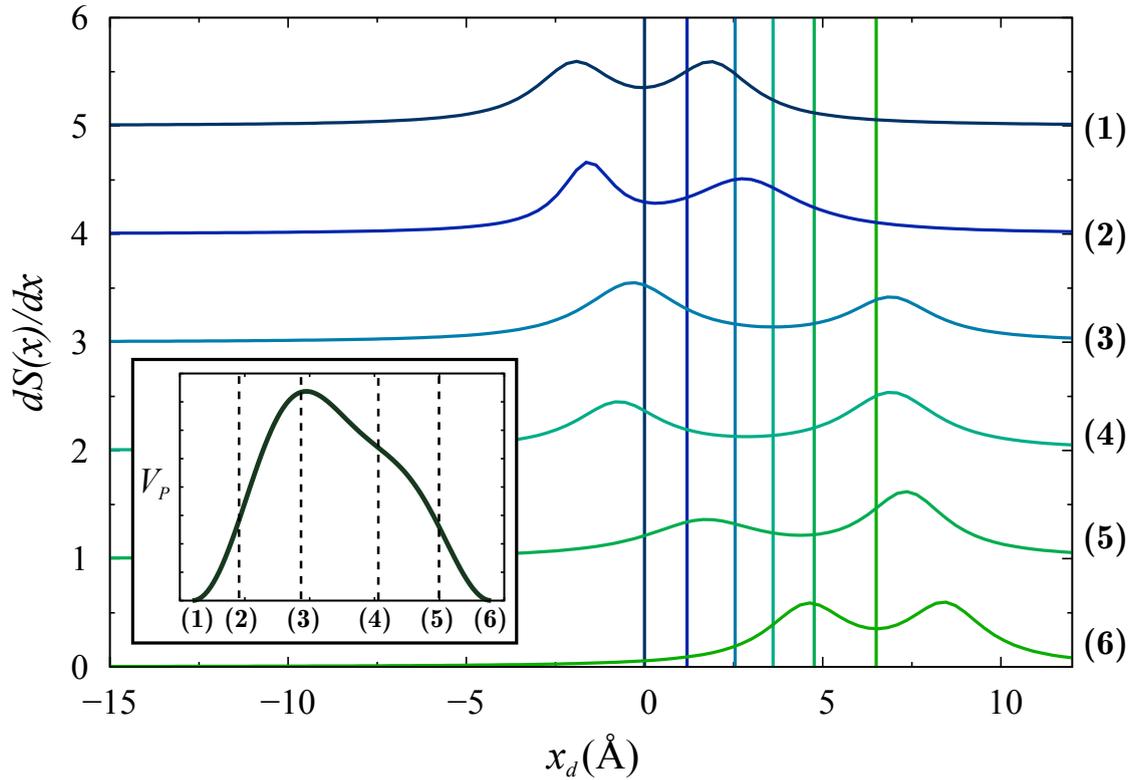


FIGURE 5.2 – Évolution de la structure de dislocation [100] lors de son glissement dans le plan (010) à 60 GPa, et de la position de la dislocation (traits verticaux). Les énergies correspondantes aux différentes configurations sont représentées en insert.

Pression (GPa)	30	60	100	140
Énergie maximale (eV/b)	1,17	1.48	1.86	2.03
Contrainte issue des potentiels (GPa)	4.9	7.5	11	13.4
τ_P (GPa) - calcul direct	4.4 / 5	9.01 / 9.37	14.2 / 14.6	17.3 / 17.8

TABLE 5.1 – Énergie maximale et contraintes maximales extraites des potentiels de Peierls calculés pour la dislocation vis [100] dans (010) à 30, 60, 100 et 140 GPa, ajoutés aux contraintes de Peierls calculées partie 3.1.3 selon $\pm \vec{a}$ (ces dernières contraintes ont une incertitude de $\pm 0,5$ GPa).

Entre 30 et 140 GPa, la hauteur des potentiels de Peierls est pratiquement doublée. L'augmentation des potentiels de Peierls avec la pression est centrée en $x_d = 0,4 \cdot a'$. En effet, le point col du potentiel de Peierls initialement situé à $x_d = 0,5 \cdot a'$ à 30 GPa se situe en $x_d = 0,4 \cdot a'$ à partir de 60 GPa. La figure 5.2 représente l'évolution de la dérivée des fonctions de désaccord de la dislocation le long du potentiel de Peierls, calculée à 60 GPa. Le mécanisme de glissement est inchangé à 60 GPa, par rapport au glissement à 30 GPa (*cf* partie 4.1.2). En revanche, le point col du potentiel de Peierls survient à un stade où les deux fractionnelles qui composent le cœur de la dislocation ne sont pas symétriques. Cette dernière observation est valable pour les potentiels de Peierls calculés à 100 et 140 GPa, pour lesquels le mécanisme de glissement de la dislocation reste inchangé.

La pente maximale des potentiels dimensionnée à une contrainte ($\tau_P = b \max(dV_P/dx)$) est calculée sur le côté gauche des potentiels. Cette contrainte constitue une estimation de la contrainte de Peierls à condition que le potentiel de Peierls ne varie pas avec la contrainte. La contrainte de Peierls issue des potentiels est comparée table 5.1 aux contraintes de Peierls estimées par calcul de cisaillement lors du chapitre 3. Les contraintes issues des potentiels sont systématiquement plus faibles, ce qui suggère qu'un effet de la contrainte appliquée sur le potentiel existe à $P \geq 60$ GPa. Par ailleurs, l'observation d'une contrainte de Peierls insensible à la direction de glissement dans le cas des calculs par cisaillement suggère que l'asymétrie dynamique des potentiels est préservée avec la pression.

Doubles décrochements

De la même manière qu'à 30 GPa, les dipôles de dislocation présentant un double décrochement sont modélisés à 60, 100 et 140 GPa dans des cellules de calcul de dimension $l_x = 63 \cdot a$, $l_y = 62 \cdot n$ et $l_z = 40 \cdot b$ (figure 4.17). La structure des décrochements obtenue par calculs atomistiques aux différentes pressions, normalisée par les paramètres de maille, est représentée figure 5.3¹. La longueur de ligne est normalisée ce qui permet de comparer l'étalement des décrochements. L'étalement moyen des décrochements est mesuré par le paramètre $\bar{\lambda}$ (expression (2.19)), $\lambda \cdot b$ correspond à l'étalement d'un décrochement. Les paramètres $\bar{\lambda}$ à 30, 60, 100 et 140 GPa sont reportés table 5.2.

On observe une augmentation de l'étalement des décrochements entre 30 et 100 GPa. À 140 GPa, l'étalement des décrochements est plus bas qu'à 100 GPa, mais reste supérieur à l'étalement du décrochement à 30 GPa. Cependant, la hauteur des décrochements modélisés h diminue avec l'augmentation de la pression. À $P = 30$ GPa, $h = 0,96$ et diminue jusqu'à $h = 0,91$ à 140 GPa. Une diminution de h a été observé au chapitre 4, partie 4.2.1, dans lequel des décrochements sont modélisés dans des cellules de calcul de dimensions différentes. La diminution de h est liée à un effet de taille de boîte. Bien que cet effet soit pris en compte lors du calcul de H_k , il est susceptible d'induire une sous-estimation de $\bar{\lambda}$.

L'enthalpie des décrochement isolés à 60, 100 et 140 GPa est là aussi calculée, en reprenant la méthode appliquée à 30 GPa, dans des cellules de calcul de dimension $l_x = 63 \cdot a$, $l_y = 62 \cdot n$ et $l_z = 40 \cdot b$. Ces enthalpies sont corrigées des interactions élastiques dans la cellule de calcul. Pour le calcul d'un décrochement isolé, ces termes correctifs correspondent respectivement à 0,53 ;

1. Pour plus de clarté, seul le résultat d'ajustement des structures discrètes par une fonction continue $f_k(z)$, présenté partie 2.4.2, est représenté figure 5.3

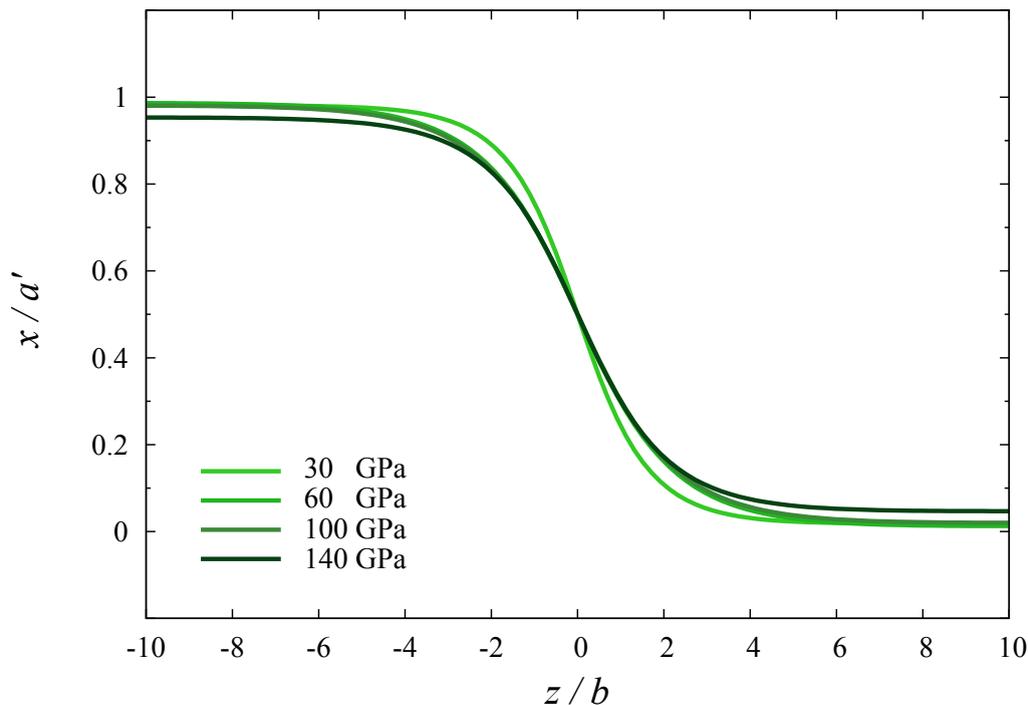


FIGURE 5.3 – Structure de décrochements de dislocations vis [100] dans le plan (010), modélisés à 30, 60, 100 et 140 GPa.

0,55 ; 0,54 et 0,46 eV aux pressions de 30, 60, 100 et 140 GPa. Les valeurs de H_k obtenues sont listées table 5.2.

Les valeurs de H_k obtenues par calcul atomistique augmentent avec la pression. Cette évolution des valeurs de H_k représente une augmentation de 8 % entre 30 et 60 GPa, 11 % entre 60 et 100 puis 1 % entre 100 et 140. Ces résultats sont comparés aux valeurs de H_k^{approx} (expression 4.8). On observe que H_k et H_k^{approx} sont initialement en bon accord, mais que les valeurs de H_k augmentent moins vite que les valeurs de H_k^{approx} avec la pression.

L'enthalpie d'un décrochement isolé dépend de la friction de réseau et de l'énergie de ligne. On peut normaliser H_k par μb^3 pour comparer les effets de la friction de réseau et de la tension de ligne (la tension de ligne Γ est proportionnelle à μb^3). Les valeurs de $\frac{H_k}{\mu b^3}$ sont calculées table 5.2. Encore une fois cette valeur augmente avec la pression, puis diminue faiblement entre 100 et 140 GPa. Ce résultat suggère une augmentation de l'effet de la tension de ligne sur les valeurs de H_k entre 100 et 140 GPa. Cette augmentation de la tension de ligne peut expliquer l'effet de taille de boîte à 140 GPa qui entraîne la diminution de h .

Pression (GPa)	$\bar{\lambda}$ (Å/b)	H_k (eV)	H_k^{approx}	$\frac{H_k}{\mu b^3}$
30	3,29	9,45	9,27	0,0842
60	4,48	10,2	11,45 / 12,56	0,0845
100	4,5	11,3	13,72 / 15,58	0,0890
140	4,16	11,4	14,87 / 16,90	0,0871

TABLE 5.2 – Résultats de la modélisation de doubles décrochements [100](010) aux pressions de 30 et 60 GPa. L'estimation d'énergie d'un décrochement isolé H_k^{approx} obtenue à partir d'une simplification du modèle d'interaction élastique [Koizumi *et al.* 1994] est ajoutée, calculée pour 60, 100 et 140 GPa à partir des contraintes maximales extraites des potentiels de Peierls / obtenues par calcul de cisaillement.

5.1.2 Dislocation vis [010] dans le plan (100)

Potentiels de Peierls

En préambule, il convient d'indiquer que le potentiel de Peierls n'a pas pu être clairement défini à 30 GPa. Les difficultés du calcul du potentiel à 30 GPa sont relatives à la perturbation du MEP due à l'instabilité de la structure de la dislocation à cette pression, discutée partie 3.2.3. Cette partie traitera donc exclusivement des pressions 60, 100 et 140 GPa.

Les potentiels de Peierls de la dislocation [010] dans le plan (100) sont calculés en utilisant la méthode appliquée à la dislocation [100] dans le plan (010) à 30 GPa (*cf* partie 4.1), en utilisant des cellules de tailles similaires ($l_x = 33 \cdot a$, $l_y = 32 \cdot n$ et $l_z = b$, figure 4.1). Les énergies d'interaction dues au dipôle (ΔE , expression (4.2)) sont de 0,038 ; 0,045 et 0,05 eV/b respectivement à 60, 100 et 140 GPa. Les potentiels de Peierls sont représentés figure 5.4. Les caractéristiques des potentiels de Peierls, l'énergie de point col et leur pente maximale dimensionnée à une contrainte sont représentées table 5.3.

La hauteur maximale des potentiels de Peierls dépend fortement de la pression. À 60 GPa, le point col est de 1,3 eV, et augmente jusqu'à 3,05 eV à 140 GPa. On retrouve une augmentation des hauteurs de barrière avec la pression. À la différence du comportement pour la dislocation [100], le maximum de la barrière correspond à une dislocation à mi chemin entre les deux vallées. L'évolution de la structure de la dislocation le long du potentiel de Peierls est représentée

Pression (GPa)	30	60	100	140
Énergie maximale (eV/b)	-	1,3	2,28	3,05
Contrainte issue des potentiels (GPa)	-	9,2	13,9	17,4
τ_P (GPa) - calcul direct	4,5 / 11,5	10,8	14,2	15,2

TABLE 5.3 – Énergies maximales et contraintes maximales extraites des potentiels de Peierls de la dislocation vis [100] dans (010) à 30, 60, 100 et 140 GPa, ajoutés aux contraintes de Peierls calculées partie 3.1.3 pour le système de glissement [100](010) selon $\pm \vec{a}$.

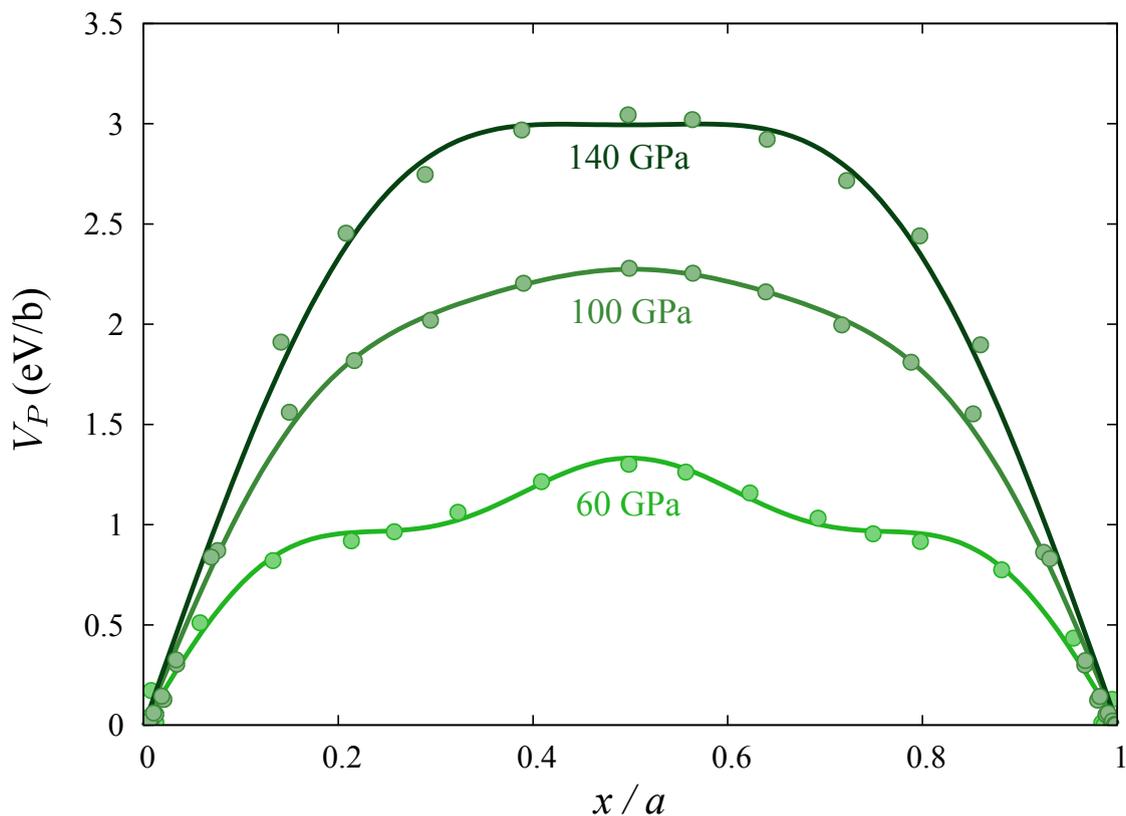


FIGURE 5.4 – Potentiels V_P calculés à 60, 100 et 140 GPa, ajustés par une somme de fonction sinusoïdales

figure 5.5 à 60 GPa. Le mécanisme de glissement de la dislocation $[010]$ dans le plan (100) a lieu par glissement successif des deux dislocations fractionnelles. Les deux fractionnelles glissent en restant corrélées. Nous avons pu vérifier que ce mécanisme opère à 100 et 140 GPa. Ce déplacement en phase des deux dislocations fractionnelles peut expliquer la symétrie des potentiels de Peierls.

Les potentiels de Peierls sont symétriques à toutes les pressions, leur pente maximale est donc identique de part et d'autre du potentiel. En outre, on remarquera que la pente des potentiels de Peierls est maximale en $x = 0$, à l'identique d'un potentiel anti-parabolique [Caillard & Martin 2003]. Les contraintes maximales extraites des potentiels sont proches des contraintes de Peierls obtenues par calcul de cisaillement partie 3.2 (table 5.3). Les différences sont de moins d'1 GPa en prenant en compte l'incertitude des valeurs estimées par calcul de cisaillement.

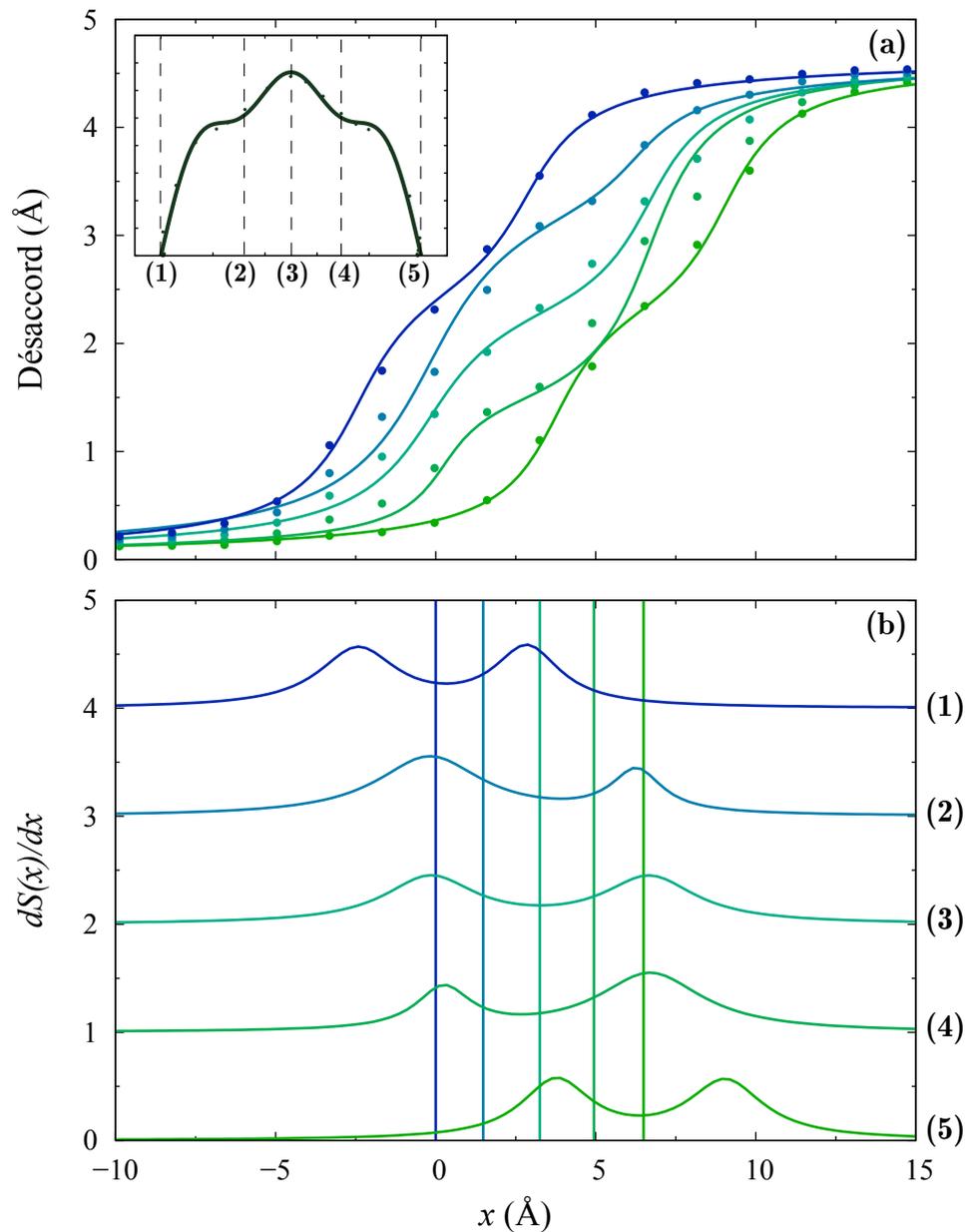


FIGURE 5.5 – Désaccord atomique et densité de vecteur de Burgers de la dislocation $[010]$ durant son glissement dans le plan (100) à 60 GPa. Ces désaccords sont prélevés pour différentes configurations transitoires, représentées sur le potentiel de Peierls dans l'insert en haut à gauche. **(a)** Désaccords atomiques auxquels sont ajustés des fonctions de désaccords fractionnées avec $N=2$ (eq. 2.17). **(b)** Dérivée des fonctions de désaccords, décalées en ordonnée pour plus de visibilité.

Doubles décrochements

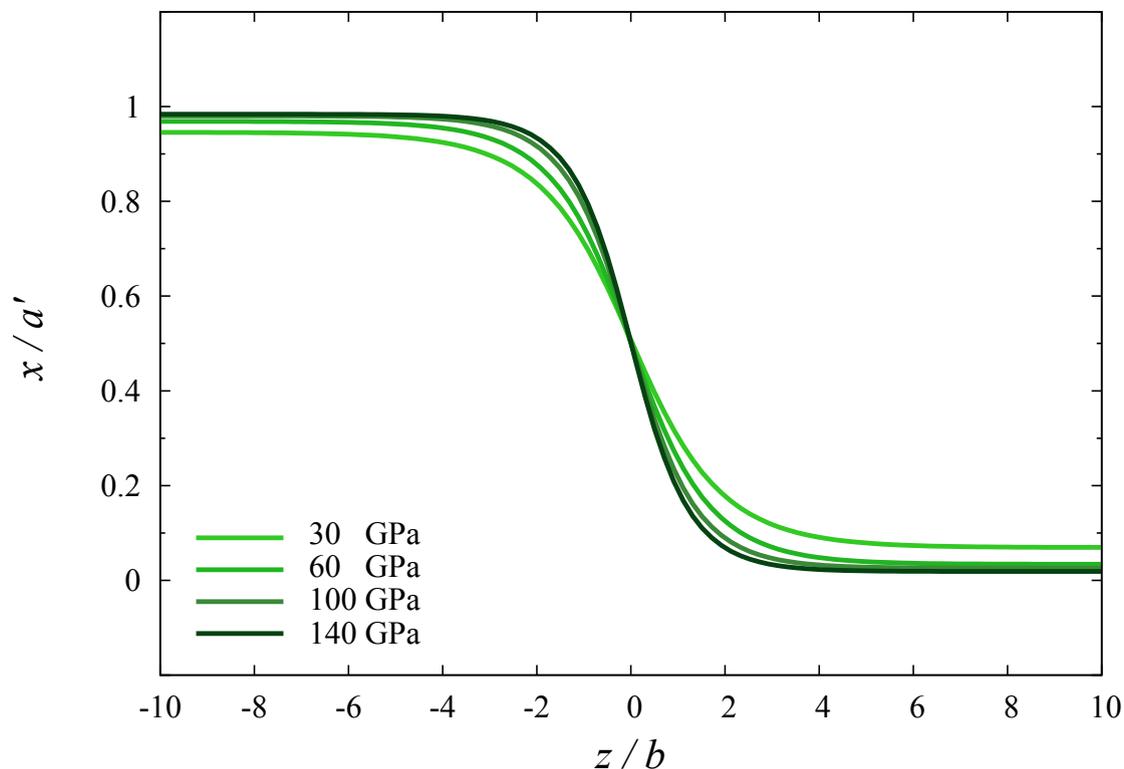


FIGURE 5.6 – Structure de décrochements de dislocations vis [010] dans le plan (100), modélisés à 30, 60, 100 et 140 GPa.

Des doubles décrochements ont été modélisés à 30, 60, 100 et 140 GPa en appliquant la méthode utilisée pour la dislocation [100] à 30 GPa (cf partie 4.2.1). Les cellules de calcul utilisées sont de dimensions $l_x = 64 \cdot a$, $l_y = 64 \cdot n$ et $l_z = 40 \cdot b$ (figure 4.17). Les quatre décrochements modélisés sont représentés figure 5.6. Les étalement moyens des décrochements à chaque pression, caractérisé par $\bar{\lambda}$ (expression (2.19)), sont reportés table 5.4.

L'étalement diminue avec la pression, le paramètre $\bar{\lambda}$ allant de $3,8 \cdot b$ à 30 GPa, à $2,5 \cdot b$ à 140 GPa. La hauteur h des doubles décrochements montre elle aussi une dépendance à la pression. Dans le cas des calculs à 30 GPa, h est égal à $0,88 \cdot a'$. La hauteur h augmente avec la pression, pour atteindre $0,97 \cdot a'$ à 140 GPa, en même temps que l'étalement des décrochements diminue. Les énergies de décrochement isolé H_k sont calculées à partir des décrochements modélisés, leurs valeurs sont réunies table 5.4. Des corrections élastiques sont appliquées pour obtenir H_k , correspondant à l'énergie d'interaction des décrochements le long de la ligne de dislocation. Ces corrections élastiques correspondent à 0,93 ; 1,12 ; 1,19 et 1,18 eV respectivement à 30, 60, 100 et 140 GPa dans les cellules de calcul utilisées. À 30 GPa, l'énergie H_k obtenue est de 5,9 eV, relativement basse comparé aux valeurs obtenues aux autres pressions, et aux valeurs obtenues

précédemment pour la dislocation [100]. Avec la pression, H_k augmente jusqu'à une valeur de 16 eV. Les valeurs obtenues pour H_k sont comparées à H_k^{approx} table 5.4, l'énergie approximée du modèle IE (expression (4.8)). Les calculs atomistiques aboutissent à des énergies de décrochement isolés systématiquement plus faibles que la valeur de H_k^{approx} .

Enfin, le rapport entre friction de réseau et tension de ligne est estimé par $\frac{H_k}{\mu b^3}$ table 5.4. À mesure que $\frac{H_k}{\mu b^3}$ augmente, l'étalement des décrochements quantifié par $\bar{\lambda}$ diminue.

Pression (GPa)	$\bar{\lambda}$ (Å/b)	H_k (eV)	H_k^{approx}	$\frac{H_k}{\mu b^3}$
30	3,8	5,9	- / 9,53	0,0495
60	3,34	10,7	13,9 / 15	0,0814
100	2,78	14,1	17,2 / 17,4	0,0958
140	2,5	16	19,4 / 18,1	0,105

TABLE 5.4 – Résultats de la modélisation de doubles décrochements [100](010). L'estimation d'énergie d'un décrochement isolé H_k^{approx} obtenue à partir d'une simplification du modèle d'interaction élastique [Koizumi *et al.* 1994] est ajoutée, calculée pour 60, 100 et 140 GPa à partir des contraintes maximales extraites des potentiels / obtenues par calcul de cisaillement.

5.1.3 Conclusion des résultats atomistiques

À 30 GPa, l'enthalpie de décrochement isolé est significativement plus importante pour la dislocation [010] que pour la dislocation [100]. Cette différence entre les deux dislocations s'observe aussi sur l'étalement des décrochements, l'étalement obtenu pour la dislocation étant plus important ($\lambda_{[010]} = 3,29$ Å/b; $\lambda_{[110]} = 3,8$ Å/b). Avec l'augmentation de la pression, les enthalpies de décrochement isolé des deux systèmes de glissement augmentent. En revanche, l'enthalpie de décrochement isolé de la dislocation [010] augmente de manière plus importante pour la dislocation [010]. À 60 GPa, les deux valeurs de H_k sont quasi-identiques, puis à partir de 100 GPa, H_k est plus important pour la dislocation [010]. Les enthalpies de décrochements isolés augmentent nettement avec la pression pour la dislocation [010], cette augmentation est plus marquée que celle des enthalpies de décrochements isolés de la dislocation [100].

Les étalements de décrochements ont pu être estimés pour les dislocations vis [100] dans (010) et vis [010] dans (100). Les valeurs de λ (expression 2.19, [Joós & Zhou 2001]) sont systématiquement supérieures à 3 Å/b. Les conclusions obtenues partie 4.4 sur les enthalpies de migration de la dislocation [100] dans (010) à 30 GPa restent donc valides. L'étalement des décrochements obtenu permet d'estimer dans un modèle de Frenkel-Kontorova des enthalpies de nucléation plusieurs ordres de grandeurs supérieures aux enthalpies de migration. La nucléation de double décrochement reste le mécanisme contrôlant le glissement de dislocation thermiquement activé.

5.2 Calcul de $\Delta H^*(\tau)$ à 60 GPa par le modèle IE

Les méthodes utilisées lors du chapitre 4 partie 4.3 pour le calcul d'enthalpie de nucléation critique de la dislocation [100] dans (010) à 30 GPa sont appliquées à 60 GPa pour la dislocation vis [100] dans (010) et la dislocation vis [010] dans (100). La dépendance des potentiels de Peierls à la contrainte appliquée n'est toutefois pas prise en compte. L'influence d'une variation des potentiels de Peierls sur les résultats du modèle IE a été vérifiée et jugée faible. Par ailleurs, les calculs de $\Delta H^*(\tau)$ qui suivent ne dépassent pas des contraintes de $0,35 \cdot \tau_P$.

Le modèle IE est utilisé pour une géométrie trapézoïdale avec $\rho = 0,2 \cdot b$ (expression (4.9)). Les enthalpies de double décrochement isolé correspondantes sont H_k [100] = 20,9 eV et H_k [010] = 23,12 eV pour les dislocations vis respectives [100] dans (010) et [010] dans (100). On obtient des décrochements stables pour $l_{[100]}^* = 3,3 \cdot b$ et $l_{[010]}^* = 3,0 \cdot b$, des valeurs en bon accord avec les étalements des double décrochements modélisés en atomistique ($\lambda_{[010]} = 3,29 \text{ \AA}/b$; $\lambda_{[110]} = 3,8 \text{ \AA}/b$). Les enthalpies de double décrochement critiques obtenues pour la dislocation

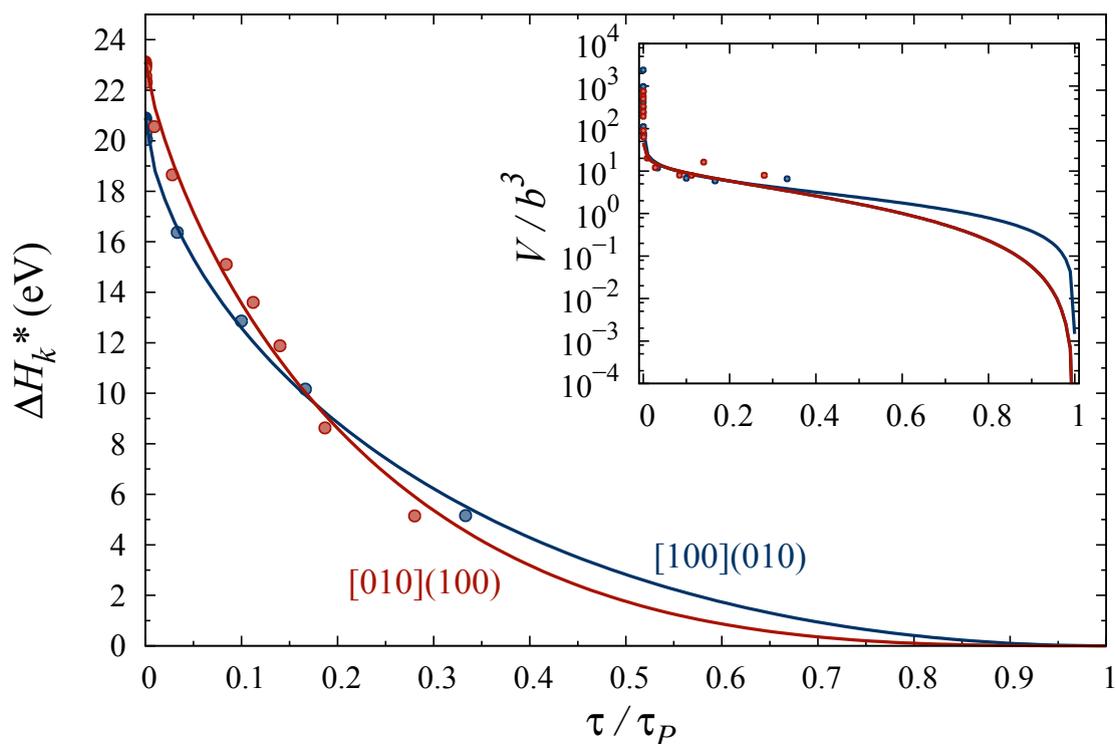


FIGURE 5.7 – Enthalpies de nucléation critique exprimées en fonction de la contrainte pour des doubles décrochements sur les dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) à 60 GPa. En insert, volumes d'activation correspondant, calculés à partir des paramètres géométriques critiques des doubles décrochements.

vis [100] dans (010) et la dislocation vis [010] dans (100) sont représentées figure 5.7, en fonction de la contrainte normalisée par les contraintes de Peierls respectives. Les volumes d'activation

correspondant sont aussi représentés, calculés à partir des paramètres géométriques obtenus dans le modèle IE.

Les caractéristiques des deux systèmes de glissement sont proches à 60 GPa (τ_P , H_k), il n'est donc pas surprenant de trouver des enthalpies de nucléation critique et des volumes d'activation proches. La divergence du volume d'activation à basse contrainte est due à la divergence du paramètre $w^*(\tau)$ (l^* et h^* restent finis). Les enthalpies sont ajustées par une fonction de Kocks (expression 4.10). Les paramètres p et q correspondants sont $p_{[100]} = 0,64$, $p_{[010]} = 1,95$ et $p_{[010]} = 0,78$, $p_{[010]} = 2,95$.

5.3 Modèle de double décrochements basé sur une interaction coulombienne élastique

Dans un régime basse contrainte ($w \gg l$, $h \sim a'$), l'enthalpie de nucléation d'un double décrochement $\Delta H(\tau)$ correspond à l'enthalpie de deux décrochements fortement éloignés, à laquelle est retranchée (i) le travail de la contrainte (ii) l'énergie d'interaction des deux décrochements. En considérant une interaction entre décrochement variant en $1/w$, [Seeger & Schiller 1962] ont proposé une formulation de l'enthalpie de $\Delta H(\tau)$ à basse contrainte :

$$\Delta H(\tau, w) = 2H_k - \alpha \mu b^2 \frac{a'^2}{w} - \tau b a' w \quad (5.1)$$

H_k est l'enthalpie d'un décrochement isolé, $\tau b a' w$ le travail de la contrainte, et $\alpha \mu b^2 \frac{a'^2}{w}$ une interaction "coulombienne élastique" [Caillard & Martin 2003], dans laquelle α est une constante sans dimension qui contrôle l'intensité de l'interaction entre décrochements. Ce modèle, uniquement valable à basse contrainte, sera désigné dans la suite en tant que modèle CE (pour interaction Coulombienne Élastique). En minimisant $\Delta H(\tau, w)$ dans (5.1), une distance de décrochement critique w^* et une enthalpie de décrochement critique $\Delta H^*(\tau)$ peuvent être exprimées :

$$\begin{aligned} \Delta H^*(\tau) &= 2H_k - (a'b)^{\frac{3}{2}} (2\alpha\mu\tau)^{\frac{1}{2}} \\ w^* &= \left(\frac{\alpha\mu b a'}{\tau} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.2)$$

L'expression 5.2 montre que l'on peut calculer $\Delta H^*(\tau)$ à faible contrainte à partir de H_k à condition d'avoir une idée de la contante α . Si l'on confronte les résultats de 5.2 aux résultats du

modèle EI développés précédemment, on s'aperçoit qu'une valeur de $\alpha = 0,17$ permet de reproduire fidèlement l'évolution de $\Delta H^*(\tau)$ pour trois situations : deux types de vecteurs de Burgers et deux pressions. On observe en effet figure 5.8, que $\Delta H^*(\tau)$ obtenu à partir du modèle IE pour la dislocation vis [100] dans (010) à 30 et 60 GPa et pour la dislocation vis [010] dans (100) à 60 GPa est en adéquation avec un modèle CE pour $\alpha = 0,17$, pour des contraintes $0 < \frac{\tau}{\tau_P} < 0,15$. Il n'est pas surprenant de trouver une seule valeur de α pour caractériser ces différents systèmes

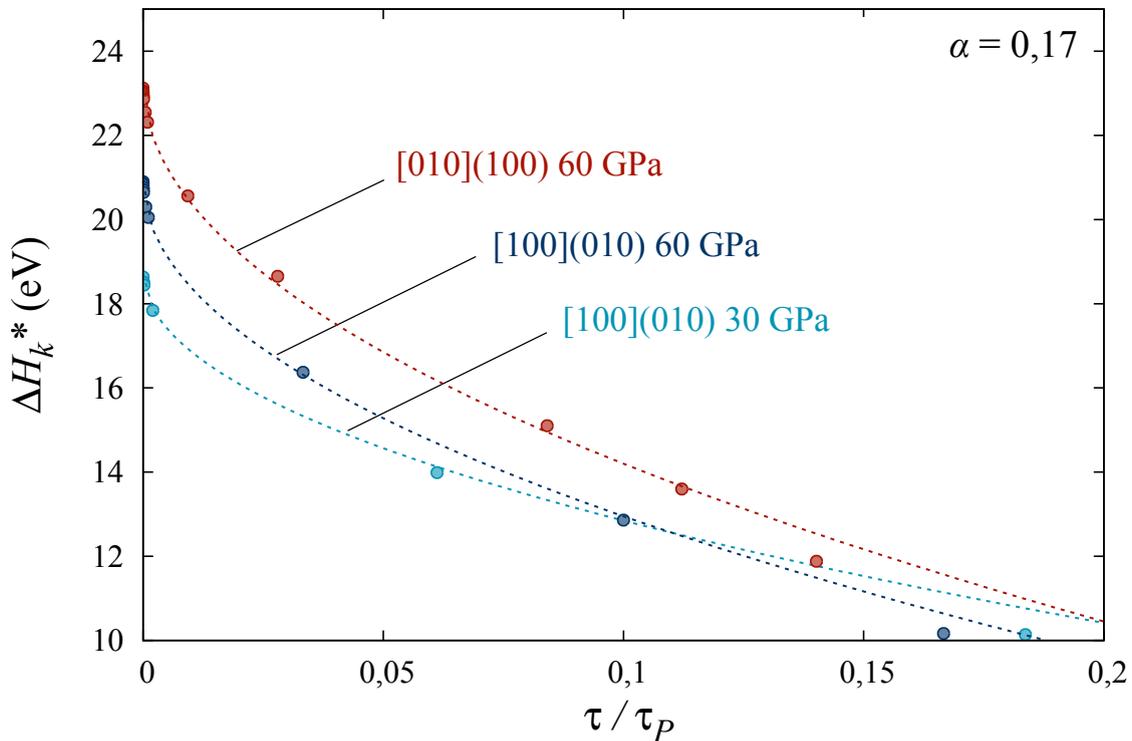


FIGURE 5.8 – Enthalpies de décrochements critiques pour la dislocations vis [100] dans (010) à 30 et 60 GPa, et pour la dislocation vis [010] dans (100) à 60 GPa. Les enthalpies de décrochements critiques obtenues par modèle IE sont comparées aux enthalpies calculées à partir du modèle de Seeger à partir de l'expression (5.1) (lignes pointillées) pour $\alpha = 0,17$.

de glissement, puisque α constitue une estimation de l'interaction longue portée. Par ailleurs, les systèmes de glissement [100](010) et [010](100), d'après l'analyse de leur structure et de leur mobilité chapitre 3 partie 3.4.3, sont très proches.

Dans [Hirth & Lothe 1982], la valeur $\alpha \sim \frac{1}{8\pi}$ est proposée pour le modèle CE. Cette valeur correspond environ au quart de la valeur $\alpha = 0,17$ ajustée aux résultats du modèle IE. Dans les travaux de [Suzuki *et al.* 1995] portant sur les métaux de transition bcc, matériaux à faible friction de réseau, le paramètre α est décomposé en deux paramètres tel que $\alpha = \frac{1}{2}(K(H_k, \rho, \tau_P)Q(V_p))^2$, avec $K = \frac{2H_k}{(\mu\tau_P)^{\frac{1}{2}}(ab)^{\frac{3}{2}}}$. En s'adaptant à ces notations, nous trouvons $Q(V_p) = 1,15$ dans la bridgmanite, valeur qui dans les métaux de transition bcc est estimée à 0,713. Dans les travaux de [Suzuki *et al.* 1995], le modèle longue portée est considéré valide jusque $\tau = 0,01\tau_P$. La

bridgmanite, contrairement à un métal bcc, montre une importante friction de réseau. L'hypothèse $w \gg l$ reste valide jusqu'à une contrainte plus importante (voir figure 4.25 qui présente l'évolution de w^* calculé par modèle IE).

5.3.1 Application du modèle CE

Pour aller plus loin, et obtenir une enthalpie de double décrochement critique pour la dislocation vis [010] dans (100) à 30 GPa dont la barrière de Peierls n'a pas pu être calculée, nous avons choisi d'utiliser un unique paramètre α et de tracer l'évolution de $\Delta H^*(\tau)$ d'après (5.2). Pour tenir compte de l'hypothèse de validité du modèle, la gamme de contrainte considérée est $0 < \frac{\tau}{\tau_P} < 0,15$.

Les enthalpies de nucléation critique de doubles décrochements [010](100) et [100](010) à 30 et 60 GPa, ainsi que la distance critique entre doubles décrochements sont calculés à partir des expressions (5.2) du modèle CE, et sont représentées figure 5.9. Les paramètres p et q obtenus en ajustant l'équation de Kocks sur les résultats du modèle CE sont résumés table 5.5.

	[100](010)	[010](100)
p, q	0,5; 1,0 0,53; 1,45	0,59; 2,32 0,55; 1,71

TABLE 5.5 – Valeurs d'ajustement de la loi de Kocks 4.10 sur les enthalpies de nucléation critiques entre décrochements $\Delta H^*(\tau)$.

Enfin, la figure 5.10 présente une comparaison des résultats du modèle CE et IE. Le modèle CE sur-estime systématiquement les enthalpies de nucléation critique au voisinage de $\tau = 0,5 \cdot \tau_P$, avec des différences d'énergie pouvant atteindre 2 eV. À 30 GPa pour la dislocation [100], le modèle IE a été utilisé jusqu'à des contraintes importantes (jusque $\tau = 0,7 \cdot \tau_P$). C'est pour ce système de glissement que la sur-estimation du modèle CE est la plus importante. Pour les systèmes [100](010) 30 GPa et [010](100) 60 GPa, cette sur-estimation du modèle CE est moins importante, mais dans le cas de ces systèmes de glissement le modèle IE n'a été utilisé que jusqu'à des contraintes de $\tau \sim 0,3 \cdot \tau_P$.

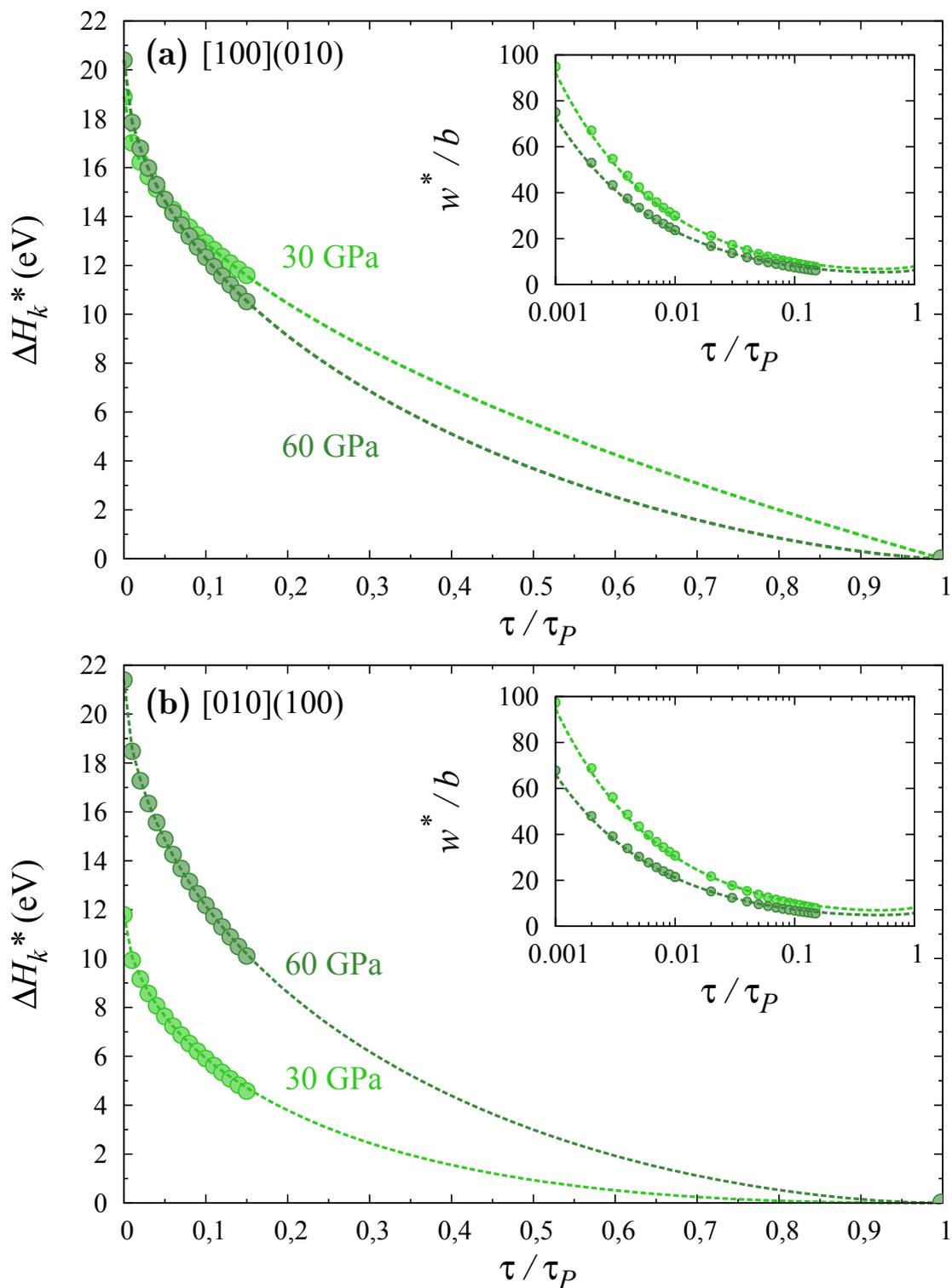


FIGURE 5.9 – Enthalpies de nucléation de doubles décrochements critiques pour les systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ à 30 et 60 GPa, obtenues à partir du modèle CE. Les distances critiques entre décrochement correspondantes, $w^*(\tau)$, sont représentées en insert. Les enthalpies de nucléation critiques sont ajustées par une loi de Kocks (expression 4.10), et les distances entre décrochement par une équation empirique (expression (4.11)).

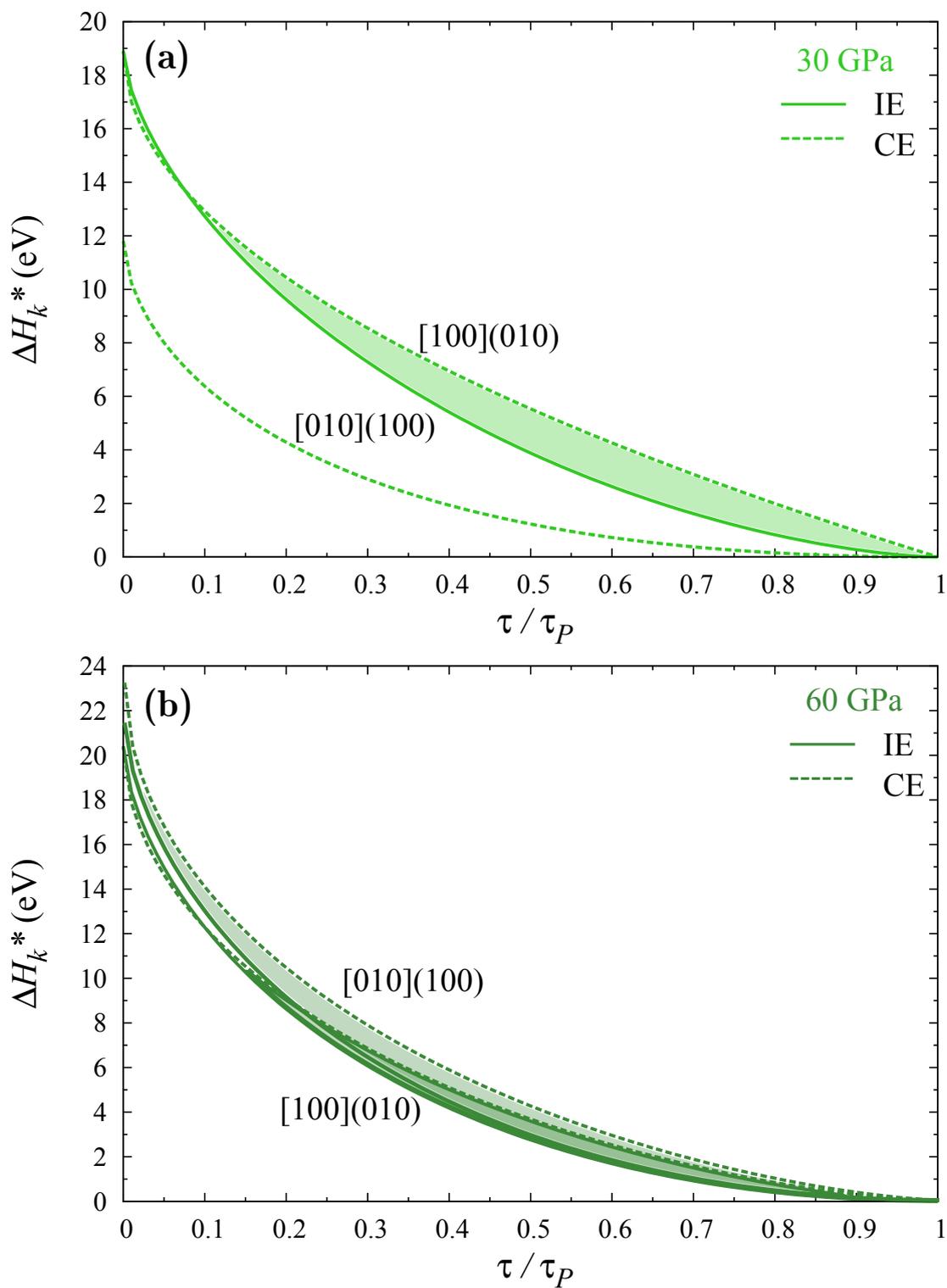


FIGURE 5.10 – Comparaison des enthalpies de nucléation de double décrochement critique obtenues avec les modèles CE et IE. Les courbes correspondent aux ajustements des équations de Kocks (4.10) sur les résultats des différents modèles.

Chapitre 6

Discussion

Ce chapitre de discussion est structuré en deux parties. Dans une première partie, les résultats de cette thèse sur le glissement thermiquement activé des dislocations vis $[100]$ et $[010]$ permettent d'estimer un ordre de grandeur de la contrainte seuil de plasticité par glissement des dislocations, et son évolution en fonction de la température. Les contraintes obtenues sont confrontées aux résultats expérimentaux. Ces résultats permettent ensuite d'évaluer le glissement aux conditions de déformation du manteau terrestre, notamment à la vitesse de déformation du manteau terrestre qui n'est pas atteignable expérimentalement.

La seconde partie est une discussion sur les différents mécanismes de déformation induits par la diffusion. Ces différents mécanismes de déformation seront discutés pour la bridgmanite aux conditions du manteau terrestre.

6.1 Déformation de la bridgmanite par glissement des dislocations

L'étude des systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ partie 3.4, et leur comparaison aux autres systèmes dans [Ferré *et al.* 2007] a montré qu'ils représentent les systèmes activables à plus faible contrainte dans la bridgmanite. Nous nous focaliserons donc sur ces systèmes pour déterminer le rôle du glissement dans la déformation de la bridgmanite.

6.1.1 De la mobilité des dislocations à la contrainte seuil de plasticité : modèle utilisé

Dans un cristal contenant une microstructure donnée, la déformation par glissement des dislocations est activée lorsque la contrainte appliquée permet aux dislocations (i) de franchir la friction de réseau, mécanisme qui dépend de la température (ii) de surmonter les obstacles constitués par leur environnement en activant les sources de dislocation, mécanisme indépendant de la température. Toutefois, on peut identifier des régimes de température pour lesquels l'un ou l'autre de ces deux mécanismes domine la plasticité du matériau (figure 6.1). La température T_a , où température athermique, est la température de transition vers le régime athermique.

À $T \ll T_a$, la déformation du cristal dépend essentiellement de la vitesse intrinsèque des

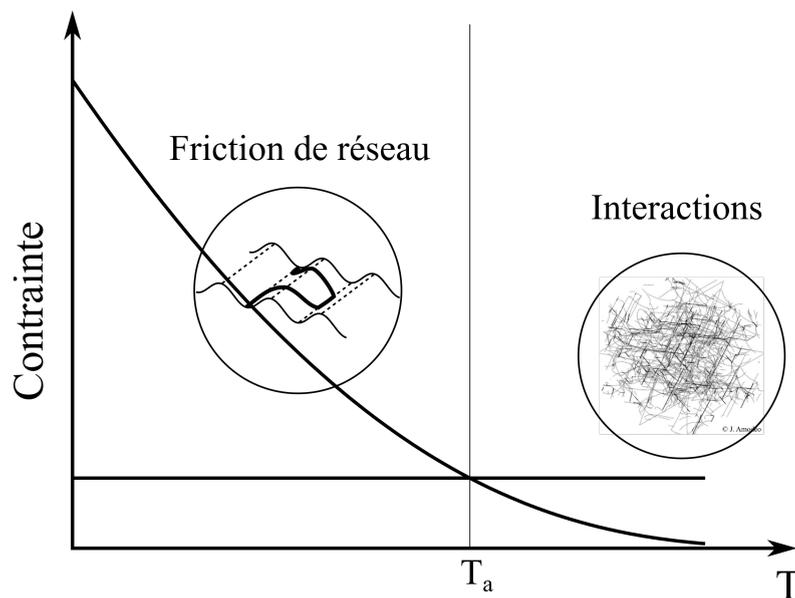


FIGURE 6.1 – Représentation schématique des régimes de déformation standard d'un monocristal. À $T \ll T_a$, la contrainte est due au franchissement de la friction de réseau par les dislocations par mécanisme de glissement thermiquement activé. À $T \gg T_a$, la contrainte dépend des interactions entre dislocation.

dislocations, et de leur capacité à surmonter la friction de réseau (régime basse température figure 6.1). Dans un régime de déformation à vitesse constante, la déformation macroscopique peut être, en première approximation, liée aux propriétés intrinsèques moyennes des dislocations par la loi d'Orowan [Kubin 2013] :

$$\dot{\epsilon} = \rho b v(\tau, T) \quad (6.1)$$

Le paramètre $\dot{\epsilon}$ est la vitesse de déformation, ρ est la densité des dislocations mobiles, b est le module du vecteur de Burgers des dislocations, et $v(\tau, T)$ est la vitesse moyenne des dislocations. On ne considère dans la loi d'Orowan que les segments les plus lents car ils contrôlent l'expansion d'une boucle de dislocation. Il s'agit ici des dislocations vis. En combinant (6.1) à la vitesse de glissement d'une dislocation (expression 4.27), on obtient une expression de la contrainte nécessaire au glissement des dislocations :

$$\tau = \tau_P \left(1 - \left(C \frac{T}{H_k} \right)^{1/q} \right)^{1/p} \quad (6.2)$$

Avec :

$$C = \frac{k_B}{2} \ln \left(\frac{\nu_D a' b^2 \sqrt{\rho}}{2d^2 \dot{\epsilon}} \right) \quad (6.3)$$

Les paramètres H_k et τ_P ont été déterminés par calcul atomistique. Nous choisissons d'utiliser les paramètres p et q calculés dans le modèles de Seeger à 30 et 60 GPa (chapitre 5). Le paramètre C est déterminé par les caractéristiques du matériau (fréquence de Debye ν_D, ρ), par la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$, et par des paramètres géométriques du glissement ($a', b, d = w^*(\tau)$). On note une dépendance de la constante C à la contrainte appliquée, à travers le paramètre d . Cette dépendance a été évaluée et considérée négligeable, les contraintes obtenues à partir de l'équation (6.2) sont quasi identiques que l'on considère $d = w^*(\tau)$ ou $d = 10 \cdot b$.

La contrainte seuil de plasticité dans un régime thermiquement activé peut donc être calculée à partir des équations (6.2) et (6.3) avec un nombre limité de paramètres (τ_P, H_k, p, q).

Dans un régime athermique, ($T \gg T_a$ figure 6.1), les dislocations sont très mobiles, ce sont les interactions des dislocations avec leur environnement qui limitent la plasticité. Ces interactions sont composées d'un ensemble de mécanismes, tel que la formation de jonctions ou de dipôles de dislocations. La prise en compte de ces phénomènes nécessite idéalement la description complète de toutes ces interactions (par exemple dans [Amodeo 2011], cette étude est réalisée par dynamique des dislocations).

Une contrainte critique associée à l'activation des sources de dislocation, τ_c , peut néanmoins être

évaluée à partir de la relation de Taylor [Kubin 2013] :

$$\tau_c = \beta \mu b \sqrt{\rho} \quad (6.4)$$

Plus la densité des dislocations ρ est importante, plus la longueur moyenne d'une dislocation est faible ($l \sim 1/\sqrt{\rho}$). La contrainte τ_c correspond à la contrainte permettant à une dislocation de longueur l d'atteindre une courbure suffisante pour se propager. Le paramètre β est une constante sans dimension, qui représente l'intensité moyenne des interactions entre les dislocations et leur environnement, et qui dépend des mécanismes d'interaction actifs dans le matériau. Dans les métaux fcc, on observe généralement $0,25 < \beta < 0,5$ [Kubin 2013, Tang *et al.* 1998]. Dans MgO, une étude numérique basée sur la dynamique des dislocations [Amodeo *et al.* 2012] montre que cette constante vaut 0,3. Pour la bridgmanite, un ordre de grandeur de τ_c sera considéré en choisissant des valeurs de β comprises entre 0,2 et 0,5.

6.1.2 Comportement mécanique aux conditions du laboratoire

L'expression (6.2) est utilisée pour déterminer la contrainte nécessaire aux dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) pour glisser à température finie. Dans une expérience de déformation en laboratoire, la vitesse de déformation est de l'ordre de 10^{-5} s^{-1} . Un échantillon de bridgmanite est déformé en presse multi-enclume dans les travaux de [Miyajima *et al.* 2009], aux conditions $T = 2023 \text{ K}$ et $P = 26 \text{ GPa}$. L'observation de cet échantillon en microscopie électronique à transmission a permis d'estimer une densité de dislocation de 10^{13} m^{-2} . Cette densité de dislocation caractéristique, obtenue sur un échantillon synthétisé et déformé en laboratoire, est utilisée avec $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ afin de calculer la constante C (expression (6.3)). On obtient $C = 1,34 \cdot 10^{-3} \text{ eV/K}$.

Les contraintes obtenues à $P = 30$ et $P = 60 \text{ GPa}$ pour les deux systèmes de glissement [100](010) et [010](100) sont représentées figure 6.2, en fonction de la température. La contrainte est maximale à $T = 0 \text{ K}$, où elle est égale aux contraintes de Peierls respectives de chaque système de glissement. À mesure que la température augmente, la contrainte décroît.

À $P = 30 \text{ GPa}$, le système de glissement [100](010) présente une contrainte supérieure à celle du système de glissement [010](100). Cette différence de contrainte est due à l'activation thermique ; les contraintes de Peierls des deux systèmes de glissement sont initialement proches mais le glissement du système [010](100) est activé à plus faible température de par sa faible enthalpie de nucléation de double décrochement.

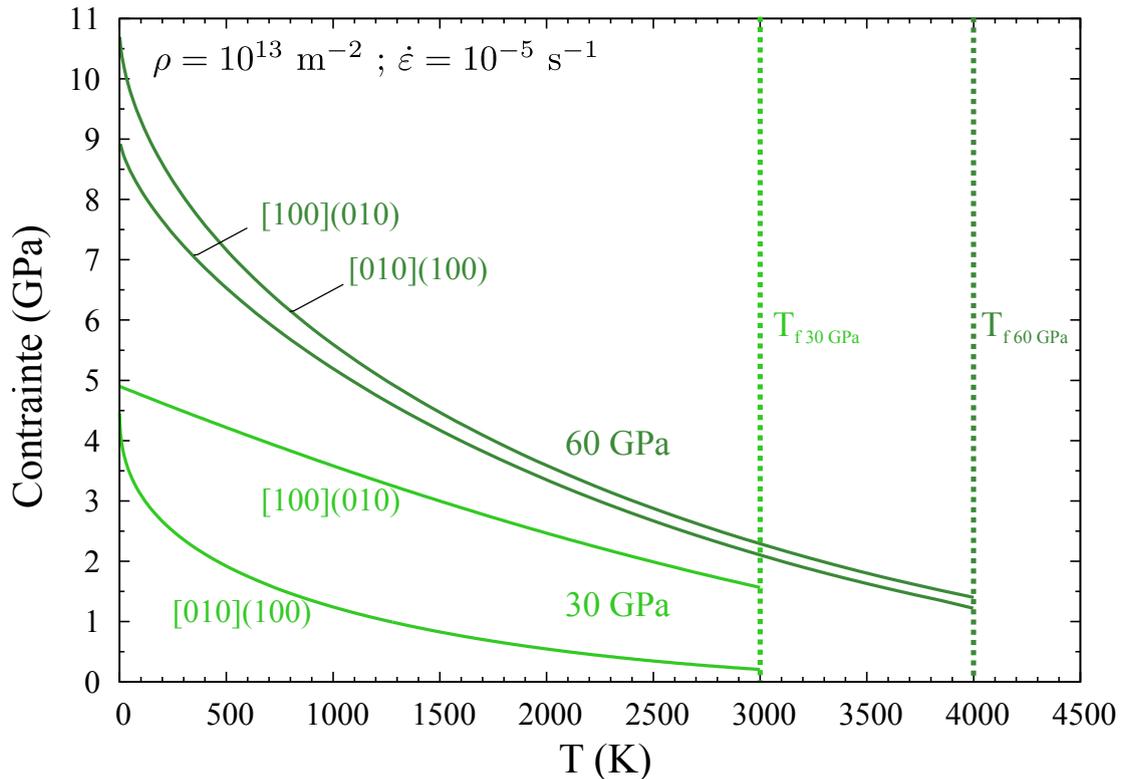


FIGURE 6.2 – Contrainte d’activation du glissement des dislocations vis $[100]$ dans (010) et vis $[010]$ dans (100) à 30 et 60 GPa. Les températures de fusion de la bridgmanite sont reportées (Stixrude et al. 2005).

À $P = 60$ GPa, les résultats sont proches pour $[100](010)$ et $[010](100)$. Les contraintes de Peierls des dislocations vis $[100]$ dans (010) et vis $[010]$ dans (100) sont proches, tout comme leur enthalpie de nucléation critique de double décrochement.

L’influence de la pression, déjà observée sur les contraintes de Peierls, est importante. L’écart de contrainte entre les systèmes de glissement à 30 et 60 GPa n’est pas effacé par l’augmentation de la température. Les contraintes sont représentées jusqu’à la température de fusion de la bridgmanite [Stixrude 2005]. Ces contraintes correspondent aux contraintes nécessaires pour vaincre la friction de réseau du matériau.

La contrainte d’activation des sources (τ_c , expression (6.4)), correspond, pour la densité de dislocation considérée, à 50 MPa pour $\beta = 0,2$ et 150 MPa pour $\beta = 0,5$. Les résultats indiquent donc que le seuil athermique pour ces systèmes de glissement se situe au delà de la température de fusion du matériau. Ainsi, la friction de réseau est dominante pour $0 < T < T_f$ pour les systèmes de glissement $[100](010)$ à 30 et 60 GPa, et $[010](100)$ à 60 GPa. On peut donc considérer, si la déformation du matériau est contrôlée par le glissement des dislocations, que sa contrainte seuil de plasticité dans des conditions du laboratoire dépend fortement de la contrainte (6.2). Ce résultat reste valide pour de plus faibles densités de dislocations, car en diminuant ρ , la

contrainte due à la friction de réseau augmente, tandis que la contrainte τ_c diminue.

Il importe aussi de discuter de l'approximation faite en utilisant le modèle CE pour déterminer les paramètres p et q dans l'expression (6.2). Comme on l'a vu partie 5.3.1, la surestimation de l'enthalpie d'activation dans le modèle CE est maximale à $0,5 \cdot \tau_P$, et nulle à faible contrainte. À mesure qu'on se rapproche de températures élevées figure 6.2, la contrainte diminue jusqu'à rejoindre le domaine de validité du modèle CE (ce domaine de validité est $0 < \tau/\tau_P < 0,2$). La conclusion sur la valeur de seuil athermique ($T_a > T_f$), soit la persistance d'une friction de réseau élevée dans le matériau, n'est donc pas concernée par les approximations faites en choisissant le modèle CE.

Comparaison aux résultats expérimentaux

Les résultats obtenus pour la contrainte d'activation de nos deux systèmes de glissement sont confrontés aux quelques résultats expérimentaux disponibles. Les études choisies pour cette comparaison sont rassemblées table 6.1. Ces travaux mesurent la contrainte supportée par des polycristaux de bridgmanite contenant du Fer. Les travaux de [Meade & Jeanloz 1990] et [Merkel *et al.* 2003] sont tous deux réalisés en CED. Les contraintes obtenues dans [Girard *et al.* 2016] sont réalisées dans une presse rotative de type Drickamer qui permet d'atteindre simultanément des hautes pressions et des hautes températures, et de déformer par cisaillement (et à pression constante) en faisant tourner une des enclumes. Les contraintes internes sont déterminées par diffraction X *in situ* dans [Merkel *et al.* 2003] et [Girard *et al.* 2016], et par une méthode moins précise basée sur les gradients de pression pour [Meade & Jeanloz 1990].

Les contraintes obtenues dans cette thèse correspondent aux contraintes de cisaillement critique projetées dans un plan de glissement et selon la direction de cisaillement (CRSS pour critical resolved shear stress). La CRSS n'est pas directement comparable aux contraintes macroscopiques mesurées expérimentalement. En première approche, on peut relier la contrainte macroscopique à la CRSS en utilisant un facteur de Schmid maximal $m = 0,5$. Les CRSS obtenues pour les différents systèmes de glissement sont donc doublées afin d'être comparées à des contraintes macroscopiques.

	Pression (GPa)	Dispositif de déformation	Technique de mesure des contraintes
[Meade & Jeanloz 1990]	25	CED	Gradient de pression
[Merkel <i>et al.</i> 2003]	32 ± 1	CED	RX
[Girard <i>et al.</i> 2016]	$27 \pm 0,5$	Presse rotative Drickamer	RX

TABLE 6.1 – Caractéristiques des études de déformation expérimentales de bridgmanite de composition $(\text{Mg}_{0,9}\text{Fe}_{0,1})\text{SiO}_3$ utilisées pour une comparaison aux résultats utilisés dans la suite.

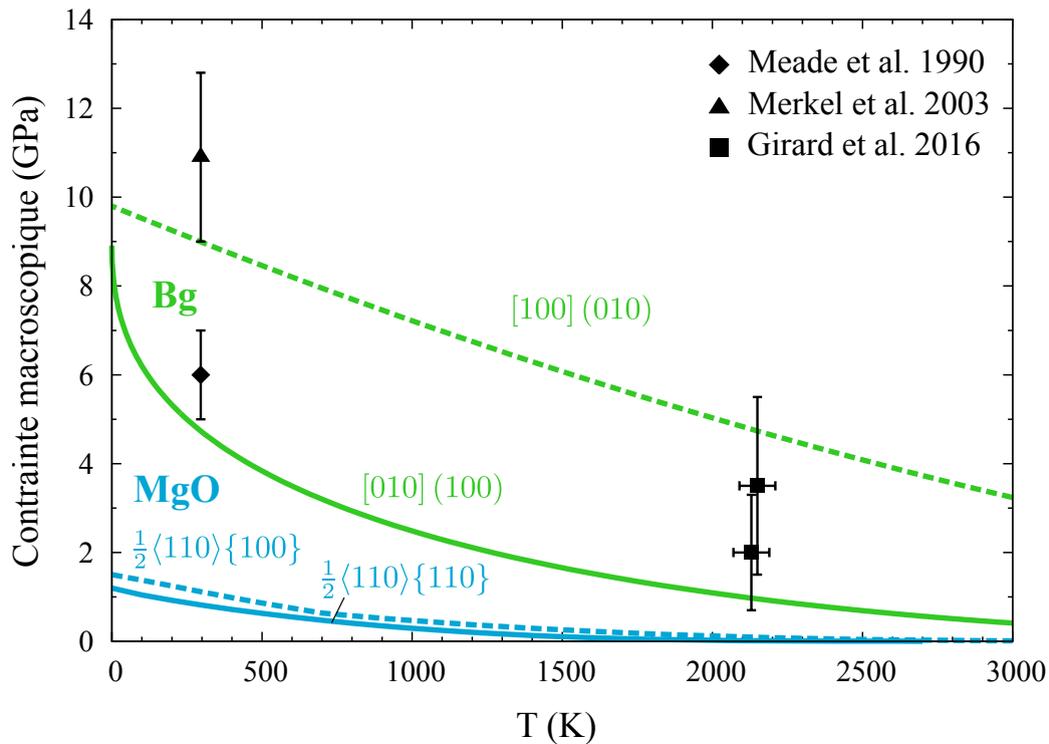


FIGURE 6.3 – Contrainte macroscopique pour le glissement des systèmes [100](010) et [010](100) dans la bridgmanite (Bg), comparée aux résultats expérimentaux [Meade & Jeanloz 1990, Merkel *et al.* 2003, Girard *et al.* 2016]. Les contraintes macroscopiques sont déterminées comme le double des CRSS, en considérant un facteur de Schmid maximal. Les contraintes macroscopiques obtenues dans le perriclase (MgO) par [Amodeo *et al.* 2012] sont également reportées.

Les contraintes expérimentales (table 6.1) sont représentées figure 6.3 avec les contraintes calculées pour les systèmes de glissement [100](010) et [010](100) à 30 GPa. On constate que les CRSS associées au glissement des dislocations calculées dans cette thèse permettent d'obtenir un bon ordre de grandeur du seuil de contrainte supporté par la bridgmanite mesuré expérimentalement. Or, dans les conditions de déformation expérimentales, la déformation par glissement de dislocations est largement mise en avant [Cordier *et al.* 2004, Wenk *et al.* 2004, Miyajima *et al.* 2009]. L'observation du bon accord entre les contraintes constitue donc une validation des résultats

obtenus dans cette thèse.

Un autre aspect des travaux de [Girard *et al.* 2016] est l'étude de la répartition des contraintes entre le ferropericlasé et la bridgmanite. Ces travaux montrent un important contraste rhéologique entre ces deux phases, les contraintes obtenues pour le ferropericlasé étant bien plus faibles que celles de la bridgmanite. Là aussi, ces données sont bien reproduites par l'étude numérique du glissement des dislocations. La contrainte macroscopique issue d'une étude numérique similaire des systèmes de glissement $\langle 110 \rangle(100)$ et $\langle 110 \rangle(110)$ dans MgO [Amodeo *et al.* 2012] est reportée figure 6.3. Le contraste entre MgO et la bridgmanite peut y être clairement observé.

6.1.3 Contraintes dans le manteau

Dans les conditions du manteau terrestre, la vitesse de déformation est de l'ordre de $\dot{\epsilon} \sim 10^{-16} \text{ s}^{-1}$ [Carter 1976, Pfiffner & Ramsay 1982]. Pour $\dot{\epsilon} = 10^{-16} \text{ s}^{-1}$, et une densité de dislocation limite $\rho = 10^8 \text{ m}^{-2}$, (6.3) donne $C = 2,18 \cdot 10^{-3} \text{ eV/K}$.

Les contraintes obtenues pour les systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ aux conditions du manteau terrestre sont représentées figure 6.3 à $P = 30 \text{ GPa}$ et $P = 60 \text{ GPa}$. À 30 GPa , la contrainte du système de glissement $[010](100)$ décroît plus rapidement que celle du système $[100](010)$. À 60 GPa , les contraintes des deux systèmes de glissement sont proches, et sont plus élevées qu'à 30 GPa . Les contraintes obtenues aux vitesses de déformation du manteau sont plus faibles qu'à une vitesse de déformation élevée, et ce résultat est indépendant de la densité de dislocation (À $\dot{\epsilon}$ fixé, si ρ diminue, τ augmente). Pour $\rho = 10^8 \text{ m}^{-2}$, la contrainte d'activation des sources (τ_c , expression (6.4)) est inférieure à 1 MPa . Cette contrainte est au moins un ordre de grandeur plus basse que la contrainte nécessaire à surmonter la friction de réseau. On peut donc considérer que la friction de réseau domine la déformation de la bridgmanite. L'un des résultats importants de cette thèse est que, comme on peut l'observer figure 6.3, les conditions de température du manteau ($1900 < T \text{ (K)} < 2050$ pour $P = 30 \text{ GPa}$ et $2050 < T \text{ (K)} < 2400$ pour $P = 60$, cf figure 2 dans l'introduction) ne sont pas suffisantes pour atteindre le régime athermique.

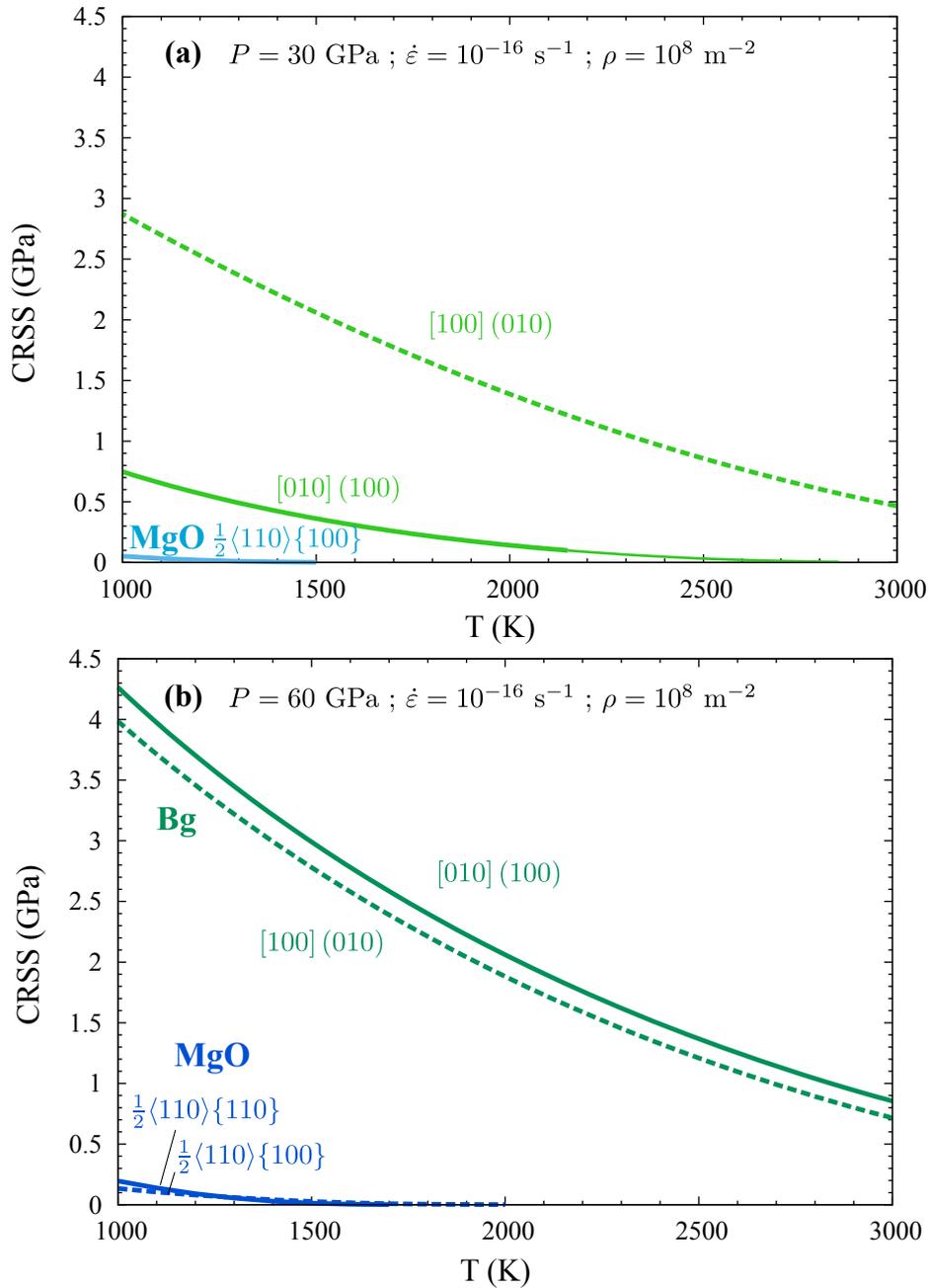


FIGURE 6.4 – Contraintes dues à la friction de réseau dans la bridgmanite (Bg) pour les systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ (a) à $P = 30$ et (b) $P = 60$ GPa. Les températures de fusion de la bridgmanite à 30 et 60 GPa sont reportées, ainsi que les températures du manteau terrestre correspondants aux conditions $P = 30$ et $P = 60$ GPa.

Les contraintes obtenues aux conditions de température et de pression du manteau sont divisées par la vitesse de glissement afin de calculer une viscosité qui correspondrait à celle résultant de l'activation en glissement simple des systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ dans la bridgmanite. Il s'agit à l'évidence d'une borne inférieure du comportement rhéologique de cette phase et encore plus des roches du manteau inférieur. Ces viscosités sont représentées figure 6.5,

aux côté des viscosités estimées dans le manteau terrestre par différentes études.

Les valeurs correspondant au glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ dans la bridgmanite sont toutes supérieures à 10^{24} Pa.s⁻¹, soit un à deux ordres de grandeur supérieures à la viscosité à laquelle on peut s'attendre dans le manteau. Or, les systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ représentent une estimation basse des propriétés mécaniques de glissement dans la bridgmanite. D'après ces résultats, le glissement des dislocations dans la bridgmanite ne permet pas de rendre compte de l'ordre de grandeur des viscosités observées dans le manteau.

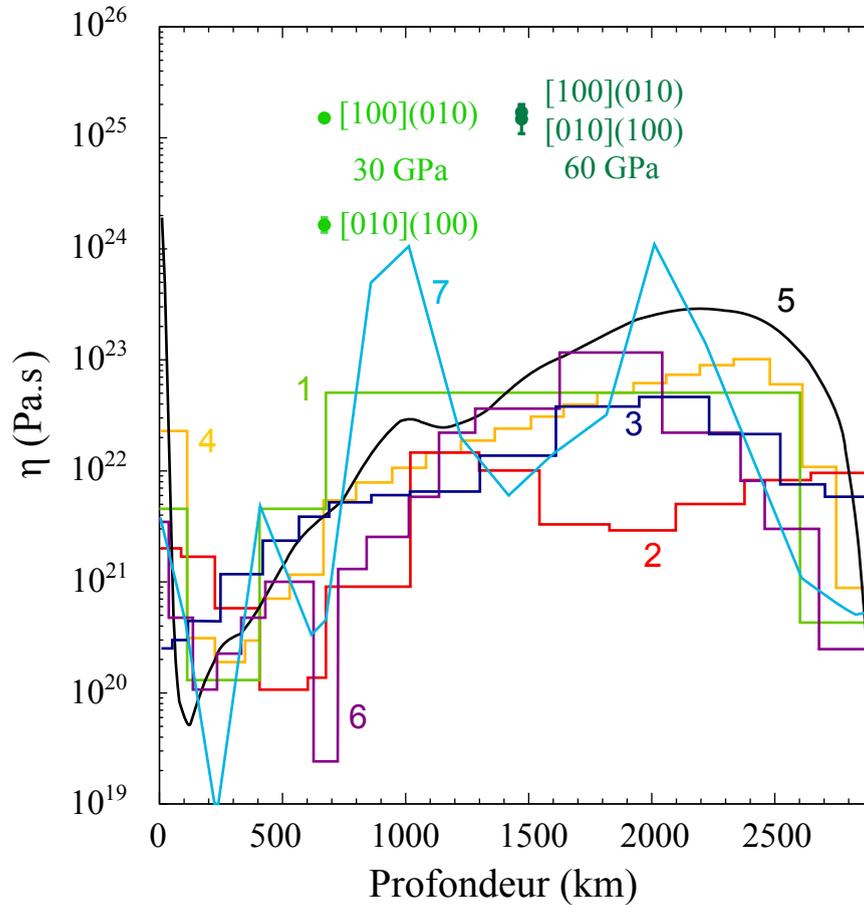


FIGURE 6.5 – Viscosité correspondant à l'activation des systèmes de glissement $[100](010)$ et $[010](100)$ dans la bridgmanite à 30 et 60 GPa. Ces viscosités théoriques sont comparées aux viscosités du manteau terrestre obtenues dans différents modèles **1** [Hager & Richards 1989], **2** [Ricard & Wuming 1991], **3** [Forte & Mitrovica 1996], **4** [Steinberger & Calderwood 2001], **5** [McNamara *et al.* 2003], **6** [Mitrovica & Forte 2004] et **7** [Lawrence & Wysession 2006].

6.2 Discussion du rôle de la diffusion atomique

Les débats relatifs aux mécanismes de déformation impliqués dans la convection mantellique sont généralement articulés autour de deux mécanismes principaux : le fluage par dislocations ou le fluage par diffusion. Le fait que nous montrions que le glissement de dislocations est très difficile dans les conditions mantelliennes pourrait amener à faire basculer *de facto* le débat en faveur du fluage par diffusion. Nous souhaitons dans ce chapitre approfondir la discussion et examiner les implications de nos résultats en prenant en compte l'ensemble des mécanismes impliquant, au niveau intragranulaire, dislocations et défauts ponctuels.

6.2.1 Description des différents mécanismes de fluage intragranulaires

Dans un matériau, la déformation intragranulaire à haute température peut être assistée, voire contrôlée, par la diffusion de défauts ponctuels. Seul le transport de lacunes, dont les concentrations sont généralement supérieures à celles des interstitiels, est considéré.

6.2.1.1 Fluage "Nabarro-Herring"

Lorsqu'une contrainte extérieure est appliquée à un grain, la concentration d'équilibre de lacunes au voisinage des faces en tension et en compression est localement altérée [Poirier 1985]. Il en résulte un flux de lacunes régi par la loi de Fick :

$$\vec{j} = D_v \vec{\nabla}(C_0) \quad (6.5)$$

D_v est le coefficient de diffusion des lacunes dans le matériau. Ce flux de lacune peut permettre d'accommoder la déformation d'un grain. Il s'oriente des faces en tension de concentration d'équilibre $C^- < C_0$, vers les faces en compression de concentration d'équilibre $C^+ > C_0$. Les joints de grains en tension ou en compression constituent les sources et les puits de lacunes. Un flux de lacunes induit par la contrainte s'établit entre les joints de grains (figure 6.6(a)) et induit la déformation du grain, c'est le fluage Nabarro-Herring [Herring 1950].

On considère, de façon schématique, un grain cubique d'arête d auquel on applique une sollicitation biaxiale (traction/compression) sur les faces perpendiculaires. La vitesse de déformation

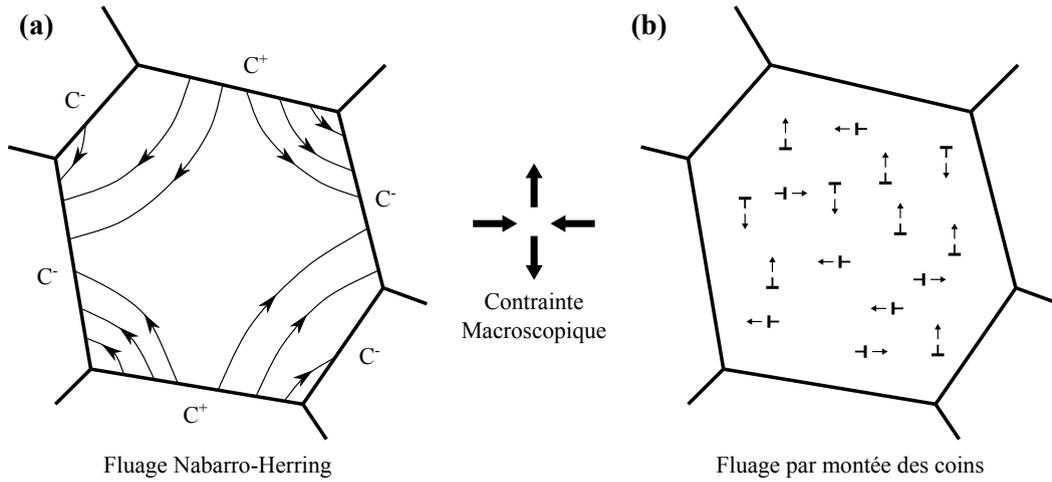


FIGURE 6.6 – (a) Représentation du flux de lacunes dans le fluage NH (les lacunes transitent en sens inverse) [Herring 1950]. (b) Représentation du fluage contrôlé par montée des dislocations coins [Nabarro 1967].

$\dot{\epsilon}$ induite par la migration des lacunes entre les faces du grain s'exprime [Poirier 1985] :

$$\dot{\epsilon} = \alpha \frac{D_{sd} \tau \Omega}{d^2 k_B T} \quad (6.6)$$

Avec D_{sd} le coefficient d'auto-diffusion, Ω le volume d'une lacune et α un paramètre géométrique égal à $16/3$ en considérant un polycristal idéal composé de grains sphériques, et en considérant le glissement aux joints de grains inactif [Poirier 1985]. Dans le cas d'un polycristal où le transport de matière n'est pas contrôlé par la diffusion dans le cristal, mais par la diffusion dans les joints de grains [Coble 1963], on peut montrer que la vitesse de déformation est proche de la formule (6.6), à ceci près qu'elle dépend du coefficient de diffusion de l'espèce dans le joint de grain, et évolue en $1/d^3$ au lieu de $1/d^2$ pour le fluage NH [Poirier 1985].

6.2.1.2 Fluage contrôlé par la montée des coins

Au même titre que les joints de grains, les dislocations (coins) peuvent jouer le rôle de sources et de puits pour les lacunes. Lorsqu'une dislocation absorbe ou émet une lacune, elle se propage dans une direction perpendiculaire à son plan de glissement (figure 6.7), on parle alors de montée, mode de déplacement non conservatif des dislocations. La montée des dislocations permet elle aussi de déformer le grain soumis à une contrainte (figure 6.6(b)).

Pour une dislocation saturée en crans (jogs) dans des conditions stationnaires, le flux net de la-

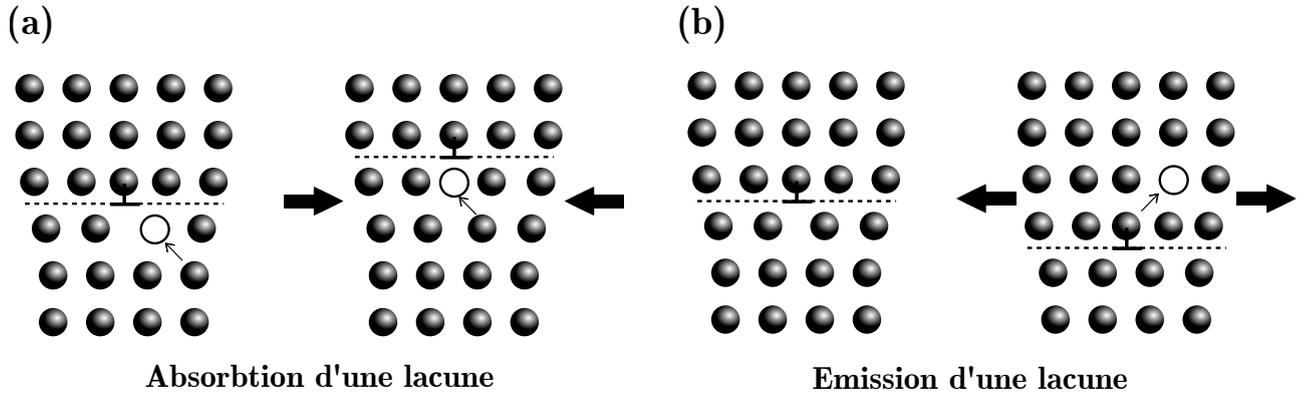


FIGURE 6.7 – Représentation du mécanisme de montée d'une dislocation coin par **(a)** absorption d'une lacune, et **(b)** émission d'une lacune. Le trait en pointillé correspond au plan de glissement de la dislocation, les flèches représentent la contrainte. L'absorption de lacune est favorisée par une compression dans le plan de glissement, l'émission de lacune est favorisée par une tension dans le plan de glissement.

lunes circulant vers et hors du cœur des dislocations est déterminé à partir des équations de diffusion et contrôle la vitesse de montée de dislocation [Caillard & Martin 2003, Hirth & Lothe 1982] :

$$v_{climb} = \frac{2\pi D_{sd}}{b \ln(1/(2\sqrt{\rho}r_c))} \left[\exp\left(\frac{\tau\Omega}{k_B T}\right) - \frac{X_\infty}{X_v} \right] \quad (6.7)$$

Dans cette expression, les deux termes entre crochets correspondent aux forces motrices de la montée. Le premier terme correspond à la contrainte effective de montée, qui est positive lorsque l'émission d'une lacune est favorable énergétiquement, négative lorsque l'absorption d'une lacune est favorable. Le second terme est appelé force chimique car elle dérive du gradient de potentiels chimiques. X_∞ est la concentration en lacune loin du cœur de dislocation, X_v la concentration en lacune dans le cœur de dislocation. Ces deux concentrations seront considérées proches, telles que $X_\infty/X_v = 1$. Toujours dans l'expression (6.7), D_{sd} est le coefficient d'auto-diffusion des lacunes, Ω est le volume de formation d'une lacune, et r_c correspond à un rayon d'intégration autour de la ligne de dislocation (on utilise $r_c \sim 2,5 \text{ \AA}$) [Boioli *et al.* 2015].

L'expression (6.7) permet de calculer une vitesse de montée selon la contrainte et la température, pour une densité de dislocation et un coefficient d'auto-diffusion donné. La comparaison de l'expression (6.7) avec les simulations atomistiques dans le fer [Kabir *et al.* 2010, Clouet 2011b] et avec des simulations par champ de phase dans l'aluminium [Geslin *et al.* 2014] montrent une bonne adéquation, validant la modélisation de la montée par l'expression (6.7).

Fluage par glissement des dislocations contrôlé par la restauration

Dans ce type de fluage, la déformation plastique résulte du glissement des dislocations. La déformation est cependant contrôlée par un mécanisme de restauration permettant l'élimination des dislocations ce qui permet de maintenir la contrainte interne égale à la contrainte appliquée pendant le fluage en régime stationnaire (figure 6.8). Dans le modèle original proposé par Weertman [Weertman 1955, Weertman 1957], la restauration est assurée par la montée des coins.

Il est admis implicitement dans ce modèle que la vitesse de glissement est bien supérieure à

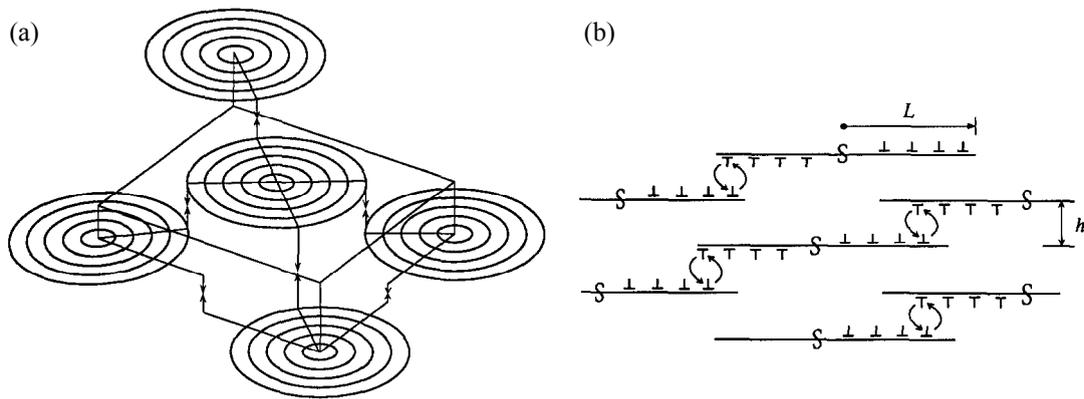


FIGURE 6.8 – Représentation du fluage par glissement de dislocations contrôlé par la restauration. Les boucles de dislocation sont émises par des sources (S). L'essentiel de la déformation est réalisé par le glissement, et la montée permet l'annihilation des dislocations. (a) Vue en trois dimensions, (b) vue en deux dimensions. Figure issue de [Wang 1996].

la vitesse de montée. Cette hypothèse est évidemment valide pour l'aluminium ou les métaux cubique face centré pour lesquels les dislocations glissent dans le régime athermique. Ce mécanisme a été évalué récemment pour le cas de l'olivine [Boioli *et al.* 2015]. Dans ce silicate, minéral majoritaire du manteau supérieur (*cf* Introduction, figure 3), le glissement est thermiquement activé. Boioli *et al.* (2015) ont cependant montré que l'hypothèse selon laquelle le glissement est bien plus rapide que la montée reste vérifiée dans un large domaine de conditions contraintes-température (figure 6.9).

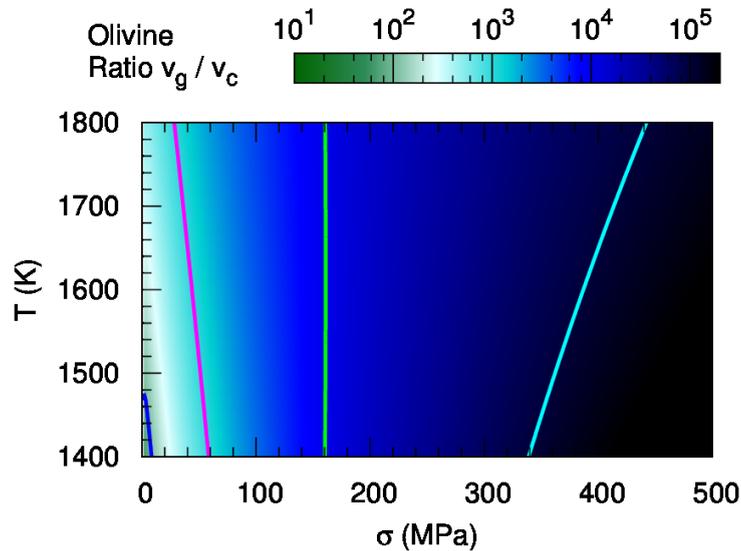


FIGURE 6.9 – Rapport des vitesses de glissement et des vitesses de montée v_g/v_c dans l’olivine, en fonction de la pression et de la température. Figure obtenue tirée de [Boioli *et al.* 2015]

Fluage par montée pure

Le glissement étant, dans la plupart des matériaux courants (souvent des métaux) bien plus rapide que la montée, la montée ne peut contribuer de manière significative à la déformation plastique. Il a cependant été mis en évidence très tôt dans des cas très particuliers où le glissement pouvait être inhibé géométriquement. Dans [Edelin & Poirier 1973] et [Le Hazif *et al.* 1973], des monocristaux de métaux hexagonaux (Mg et Be respectivement) sont sollicités en fluage selon l’axe c . Le mécanisme de déformation activé est alors basé sur la montée pure de dislocations coin. Plus récemment, ce mécanisme a été mis en évidence dans des quasicristaux pour lesquels le glissement fait face à une très forte friction de réseau du fait de l’importante rugosité présentée par les plans de glissement à l’échelle atomique [Mompiau & Caillard 2008b, Mompiau & Caillard 2008a, Mompiau *et al.* 2004]. Le fait que la montée des dislocations puisse produire de la déformation à elle seule a été théoriquement prédit par [Nabarro 1967].

6.2.2 Mécanismes de déformation de la bridgmanite

Notre étude ayant mis en évidence une très forte friction de réseau opposée au glissement des dislocations, se pose la question de la facilité relative du glissement et de la montée afin de comprendre le fluage dans ce minéral. Il est nécessaire pour cela d’évaluer la vitesse de montée telle que décrite expression (6.7). Pour cela, une évaluation du coefficient d’auto-diffusion des lacunes dans la bridgmanite est nécessaire.

Coefficient d'auto-diffusion dans la bridgmanite à 25 GPa

Le coefficient d'auto-diffusion d'une espèce atomique peut s'exprimer :

$$D_{sd} = X_v D_v = X_v \nu_a l^2 \exp\left(-\frac{\Delta H_m}{k_B T}\right) \quad (6.8)$$

X_v est la concentration de lacune, et D_v , le coefficient de diffusion de l'espèce. Le coefficient de diffusion d'une espèce dépend de sa capacité à se déplacer dans le cristal, matérialisée par une barrière de migration ΔH_m . D_v intègre ΔH_m dans une loi d'Arrhenius, avec ν_a la fréquence de saut et l la distance de saut (cette simplification reste valide pour des processus de migration plus complexes tel que celui du Silicium dans la bridgmanite [Ammann *et al.* 2009]).

Dans la bridgmanite, l'oxygène diffuse nettement plus rapidement que les autres espèces [Ammann *et al.* 2010, Karki & Khanduja 2007, Dobson 2003]. Or, ce sont les espèces diffusant le plus lentement qui contrôlent les mécanismes de déformation accommodés par diffusion. Les coefficients de diffusion du silicium et du magnésium dans la bridgmanite déterminés expérimentalement à $P = 25$ GPa sont représentés figure 6.10. Sur cette figure, la pente des coefficients d'auto-diffusion correspond à l'enthalpie de migration des différentes espèces. On peut observer figure 6.10 que le magnésium est l'espèce qui diffuse le plus lentement. Son enthalpie de migration ΔH_m est estimée à $4,29 \pm 0,64$ eV [Holzapfel *et al.* 2005]. L'ordonnée à l'origine des droites figure 6.10 correspond au préfacteur exponentiel de D_{sd} , noté $D_{0,sd}$ et mesuré dans [Yamazaki *et al.* 2000, Holzapfel *et al.* 2005, Dobson *et al.* 2008]. En considérant $D_{0,sd} = X_v \nu_a l^2$, avec une fréquence de saut classique de $\nu_a = 10^{13}$ Hz et une distance de saut $l = 2,5$ Å, on peut estimer des concentrations de lacune X_v comprises entre 10^{-5} et 10^{-3} dans ces différents travaux [Yamazaki *et al.* 2000, Dobson 2003, Holzapfel *et al.* 2005, Dobson *et al.* 2008, Xu *et al.* 2011].

Estimation d'une vitesse de montée dans la bridgmanite à 25 GPa

Une estimation de la vitesse de montée, obtenue à partir de l'expression 6.11, est présentée pour différentes densités de dislocations figure 6.11 en choisissant le magnésium comme espèce limitant la diffusion et $X_v = 10^{-5}$. Les vitesses de montée de dislocations augmentent avec la densité de dislocation. Dans les conditions de contrainte représentées figure 6.11, on observe que la vitesse de montée est linéaire, et augmente avec la densité de dislocation. En effet, à faible contrainte on a $\tau\Omega \ll k_B T$, et donc $\exp(\tau/k_B T) - 1 \sim \tau\Omega/k_B T$.

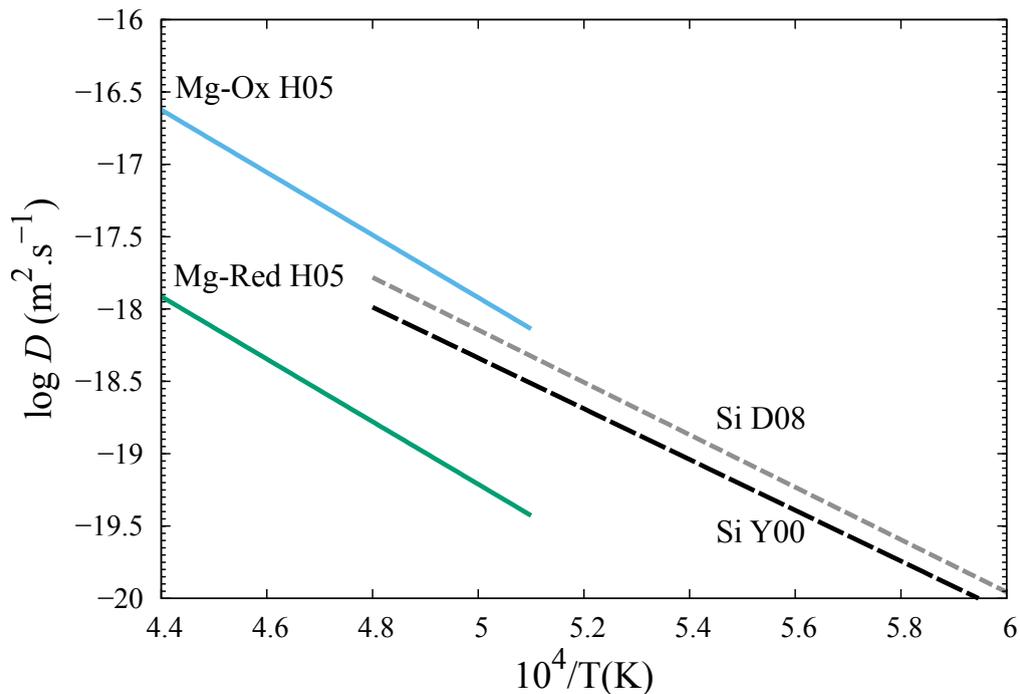


FIGURE 6.10 – Coefficients de diffusion de différentes espèces dans la bridgmanite à $P = 25$ GPa déterminés expérimentalement par [Holzapfel *et al.* 2005] (H05), [Dobson *et al.* 2008] (D08) et [Yamazaki *et al.* 2000] (Y00).

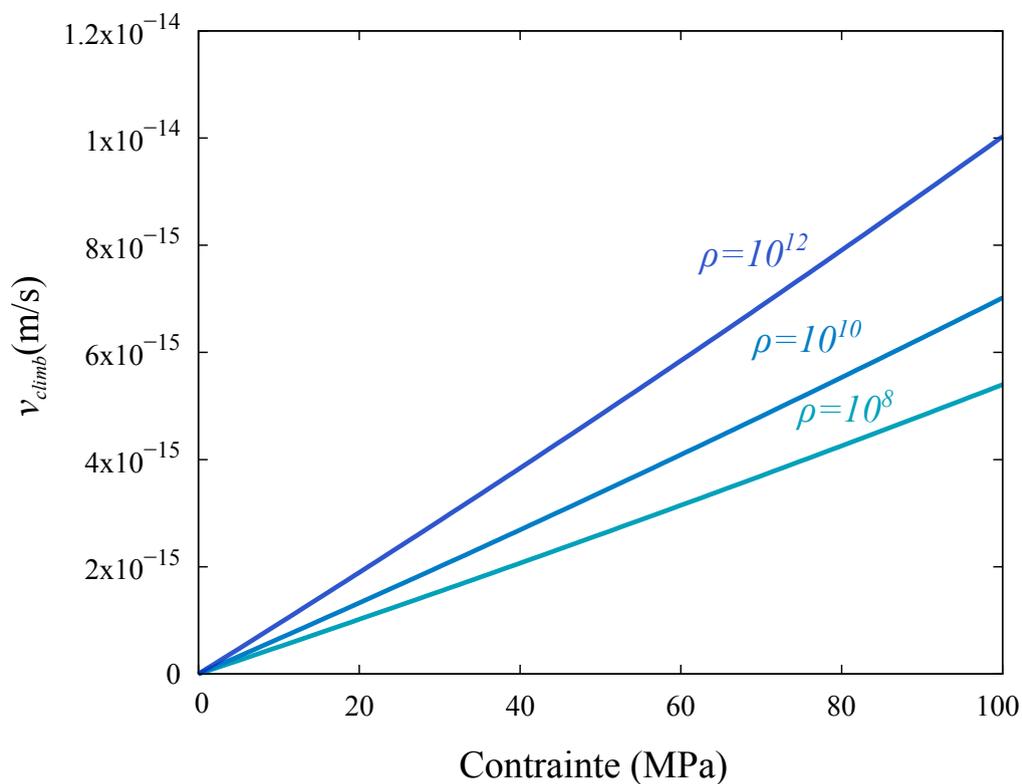


FIGURE 6.11 – Vitesse de montée des dislocation calculée pour différentes densités de dislocations, en fonction de la contrainte.

La vitesse de montée des dislocations est comparée à la vitesse de glissement de la dislocation [100] à 30 GPa déterminée dans cette thèse, figure 6.12. Le rapport v_g/v_c (g pour le glissement, c pour la montée) indique que la vitesse de montée des dislocations est plusieurs ordres de grandeur supérieure à la vitesse de glissement des dislocations pour des contraintes allant de 0 à plus de 1 GPa, et une température moyenne de 2000 K.

La situation classique pour le fluage contrôlé par la restauration correspond à un rapport

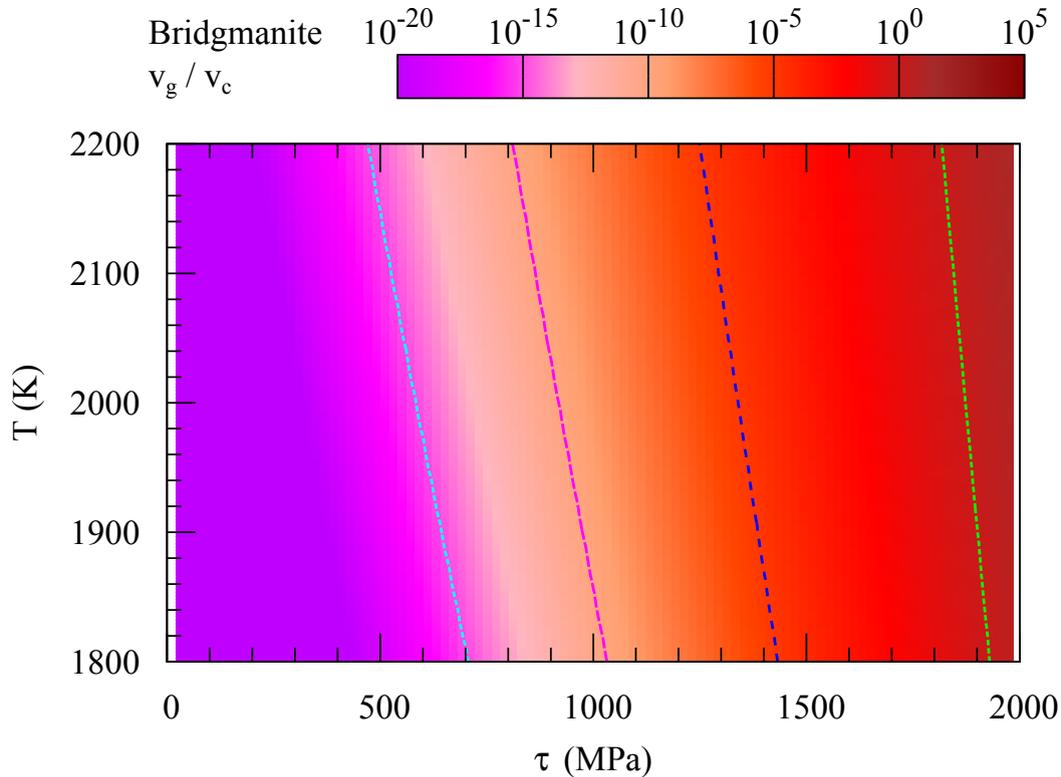


FIGURE 6.12 – Rapport v_g/v_c représenté en fonction de la température et de la contrainte appliquée pour la bridgmanite à 30 GPa. La vitesse de montée est calculée à partir du coefficient de diffusion Fe-Mg [Holzapfel *et al.* 2005] et $X_v = 10^{-5}$, la vitesse de glissement est celle de la dislocation [100] dans le plan (010). Les quatre traits en pointillés correspondent aux conditions pour lesquelles v_g/v_c est égal à 10^{-15} , 10^{-10} , 10^{-5} et 10^0 .

$v_g/v_c \gg 1$. Dans un minéral tel que l'olivine, la vitesse de glissement des dislocations est significativement supérieure à leur vitesse de montée (pour des contraintes allant jusqu'à 500 MPa, $10^1 < v_g/v_c < 10^5$, [Boioli *et al.* 2015]), comme on peut l'observer figure 6.9. Dans la bridgmanite, les résultats indiquent qu'à contrainte équivalente les ratios v_g/v_c sont complètement inversés, du fait de l'importance de la friction de réseau, en particulier de sa persistance à un niveau élevée à $T = 2000$ K. Pour arriver, dans la bridgmanite, à une situation du type de l'olivine, il faut dépasser $\tau = 2$ GPa. L'efficacité du glissement des dislocations est devenue négligeable face à celle de leur montée.

Pour aller plus loin ... estimation du fluage par montée pure

En utilisant des simulations de dynamique des dislocations intégrant la montée comme mécanisme de déformation [Geslin *et al.* 2014, Boioli *et al.* 2015], il est possible d'estimer l'efficacité du fluage par montée pure des dislocations dans la bridgmanite. C'est l'objectif de calculs réalisés par Francesca Boioli parallèlement à cette thèse, qui utilisent nos résultats sur le glissement.

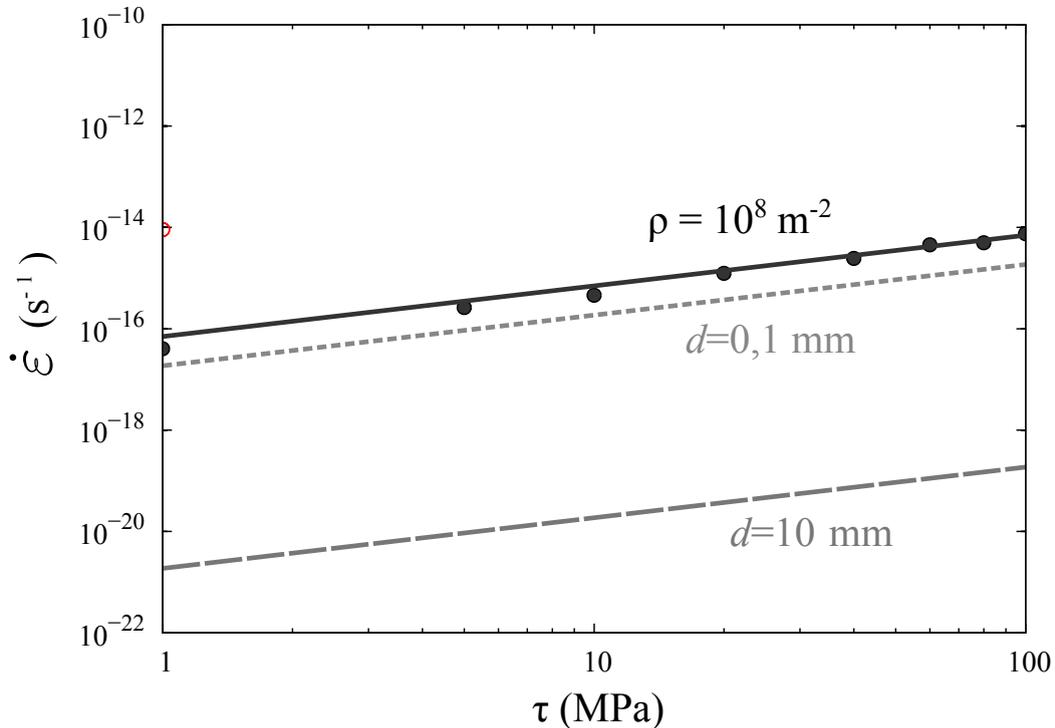


FIGURE 6.13 – Comparaison de la vitesse de déformation obtenue par montée pure et des vitesses de déformation obtenues par fluage NH pour différentes tailles de grain d .

Les simulations de dynamique des dislocations pour une microstructure caractérisée par $\rho = 10^8 \text{ m}^{-2}$ permettent de déterminer une vitesse de déformation en fonction de la contrainte, pour $P = 25 \text{ GPa}$ et $T = 1900 \text{ K}$, figure 6.13. La vitesse de déformation par montée pure est comparée aux vitesses de déformation par fluage NH (expression 6.6) à coefficient de diffusion égal. Les tailles de grains considérées sont comprises entre 0,1 et 10 mm, telles que la longueur moyenne de dislocation, $1/\sqrt{\rho}$, soit inférieure ou égale à d . Pour $d = 0,1 \text{ mm}$, $\rho = 10^8 \text{ m}^{-2}$ représente donc la densité de dislocation minimale. Lorsque les densités de dislocations augmentent, l'efficacité du fluage par montée pure est renforcée. Au delà d'une densité de dislocation trop élevée ($\rho > 10^{10} \text{ m}^{-2}$), on peut néanmoins s'attendre à ce que la contrainte d'activation des sources (sources Bardeen-Herring [Knight & Burton 1989, Mordehai *et al.* 2008]) dépasse le MPa.

On remarque que le fluage par montée pure des dislocations est toujours plus efficace que le fluage NH. Contrairement au fluage NH, la montée pure n'est pas inhibée par des tailles de grains importantes. Les sources et les puits de lacunes correspondent aux dislocations dans le cas de la montée pure, et aux joints de grains dans le cas du fluage NH. La longueur de diffusion caractéristique dans le cas de la montée pure est logiquement inférieure à celle du fluage NH au delà d'une taille critique de grains.

Enfin, le mécanisme de montée pure n'induit pas d'orientation préférentielle des grains, et est donc compatible avec l'absence d'anisotropie sismique dans le manteau inférieur [Meade *et al.* 1995a, Panning & Romanowicz 2006].

Conclusions et perspectives

Le sujet de cette thèse est l'étude de la plasticité de la bridgmanite par modélisation du glissement des dislocations, en se basant sur des calculs à l'échelle atomique. En particulier, nous avons modélisé le glissement thermiquement activé des dislocations vis $[100]$ dans le plan (010) , et des dislocations vis $[010]$ dans le plan (010) , aux conditions de pression, de température, et aux vitesses de déformation du manteau terrestre.

6.3 Rappel des principaux résultats

6.3.1 Systèmes de glissement dans la bridgmanite

- À 30 GPa, les dislocations vis $[100]$ s'étalent dans (010) , et les dislocations vis $[010]$ s'étalent dans (100) . Dans ces plans, leur structure est compacte, avec un étalement compris entre 7 et 9 Å, soit 1 à 1,5 fois le paramètre de maille c . Les cœurs de dislocations sont composés de deux fractionnelles fortement corrélées.

- L'effet de la pression sur les structures de cœur est purement élastique pour la dislocation $[100]$ entre 30 et 140 GPa. Le resserrement de la dislocation $[010]$ n'est pas uniquement élastique entre 30 et 60 GPa (l'étalement normalisé de la dislocation diminue de $0,12 \cdot c$ entre 30 et 60 GPa), puis uniquement élastique entre 60 et 140 GPa.

- Les contraintes de Peierls sont calculées en appliquant un cisaillement aux dislocations. Les contraintes les plus basses sont obtenues dans les plans où les dislocations présentent l'étalement le plus important. Ces contraintes, à une pression de 30 GPa, correspondent à 5 GPa pour les dislocations vis $[100]$ dans (010) et $[010]$ dans (100) , ce qui révèle une forte friction de réseau. En comparaison, les contraintes de Peierls dans MgO sont de l'ordre du MPa.

- Les contraintes de Peierls calculées présentent une forte dépendance à la pression, et ne dépendent pas du sens de glissement. L'augmentation des contraintes des dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) avec la pression est quasi-linéaire. À $P = 140$ GPa, les contraintes de Peierls atteignent respectivement 15 et 18 GPa, environ le triple de leur valeur à $P = 30$ GPa.

- Les dislocation [010] sont dissociées, et s'étalent dans les plans (010), (100) et {110}. Les distances d'équilibre entre partielles ont été calculée dans le plan (110) à 30 GPa, et dans le plan (010) entre 30 et 140 GPa. À $P = 30$ GPa pour (010) et (110), la distance d'équilibre entre partielles est d'environ 30 Å. Cette valeur diminue dans le plan (010) à mesure que la pression augmente et que l'énergie du défaut d'empilement augmente, d_{eq} atteint 15 Å à $P = 140$ GPa.

- À $P = 30$ GPa, la contrainte critique de glissement d'une partielle de dislocation [001] dans le plan (010) est estimée à 5 GPa, soit une contrainte du même ordre que les contraintes de Peierls des dislocations [100] et [010]. Ce résultat suggère une faible anisotropie plastique malgré des structures de défaut assez différentes.

- Les structures de dislocations obtenues dans cette étude pour les dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) présentent un bon accord avec les structures obtenues par les méthodes PN et PNG [Ferré *et al.* 2007, Gouriet *et al.* 2014].

Les contraintes de Peierls obtenues en atomistique sont plus faibles que les contraintes obtenues par les méthodes PN [Ferré *et al.* 2007]. Pour les dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100), les contraintes de Peierls calculées dans [Ferré *et al.* 2007] sont environ deux fois plus élevées.

6.3.2 Glissement thermiquement activé des dislocations [100] et [010]

- Le potentiel de Peierls de la dislocation [100] dans (010) est modélisé par calcul NEB entre 30 et 140 GPa, et pour la dislocation [010] dans (100) et entre 60 et 140 GPa.

- Les potentiels de Peierls calculés pour les dislocations [100] et [010] mènent à des valeurs de contrainte de Peierls en adéquation avec les valeurs de contraintes de Peierls obtenues par application directe d'un cisaillement sur les dislocations. Pour la dislocation [100] dans (010), les potentiels de Peierls sont asymétriques mais cette asymétrie n'amène pas de sens de glissement préférentiel. Cette asymétrie est qualifiée d'asymétrie dynamique.

- Le glissement des dislocations a lieu par un mécanisme thermiquement activé de double décrochement. Des décrochements sur les dislocations [100] dans (010) et [010] dans (100) ont été modélisés en statique moléculaire entre 30 et 140 GPa.
- Les énergies de décrochement isolés sur les dislocations [100] et [010] sont élevées, de l'ordre de 10 eV. Dans un matériau à faible friction de réseau tel que MgO, cette valeur est de l'ordre de 1 eV.
- Les décrochements modélisés présentent un étalement élevé, compris entre $3b$ et $4b$. Ce résultat suggère une faible friction de réseau secondaire. Le glissement des dislocations thermiquement activé est contrôlé par la nucléation de doubles décrochements, et non par leur migration le long de la ligne de dislocation.
- La nucléation de doubles décrochements est modélisée dans un modèle d'interaction élastique basé sur une géométrie trapézoïdale. Ce modèle permet d'obtenir l'enthalpie de nucléation critique des doubles décrochements en fonction de la contrainte, et d'obtenir une expression de la vitesse des dislocations en fonction de la température.
- La vitesse des dislocation [100] dans le plan (010) reflète là encore la friction de réseau élevée de la bridgmanite. D'après les résultats obtenus, pour obtenir les vitesses de dislocation dans l'olivine à température et pression ambiante [Idrissi *et al.* 2016], des contraintes quatre fois plus importantes seraient requises dans la bridgmanite à 30 GPa et température ambiante.

6.3.3 Déformation de la bridgmanite par glissement des dislocations

- La connaissance de la mobilité thermiquement activée des dislocations vis [100] dans (010) et [010] dans (100) est utilisée pour estimer les niveaux de contrainte nécessaires pour déformer plastiquement la bridgmanite.
- Les contraintes en fonction de la température sont calculées à $P = 30$ et $P = 60$ GPa. Le modèle permet d'évaluer la contrainte dans des conditions de déformation (i) de laboratoire ($\dot{\epsilon} = 10^{-5}$ s⁻¹), (ii) équivalentes aux vitesses de déformation du manteau terrestre ($\dot{\epsilon} = 10^{-5}$ s⁻¹). Dans les deux cas, les contraintes obtenues correspondent à un régime thermiquement activé.
- Notre modèle est capable de reproduire les contraintes mesurées lors d'expériences de déformation, pour lesquelles le glissement des dislocations a été mis en avant expérimentalement [Wenk *et al.* 2004, Cordier *et al.* 2004, Miyajima *et al.* 2009].

- Aux conditions du manteau terrestre, les contraintes obtenues permettent d'estimer des viscosités de l'ordre de 10^{24} - 10^{25} Pa.s⁻¹. Or, dans les modèles de viscosité du manteau, la viscosité du manteau inférieur varie autour de 10^{22} Pa.s⁻¹.

- La vitesse de glissement des dislocations calculée dans la bridgmanite est, dans les conditions de température, de pression et de contrainte du manteau, plusieurs ordres de grandeur inférieure à la vitesse de montée des dislocations calculée en se basant sur les coefficients de diffusion du magnésium dans la bridgmanite. Cette situation, inverse à celle d'un matériau comme l'olivine, soulève la question de l'efficacité de la montée pure des dislocations comme mécanisme de déformation.

6.3.4 Conclusions

La structure des dislocations vis [100], [010] et [001] dans la bridgmanite a été modélisée à l'échelle atomique dans des calculs de statique moléculaire. La friction de réseau, matérialisée par la contrainte et le potentiel de Peierls, a été caractérisée. Cette friction de réseau est élevée si on la compare à d'autres minéraux du manteau tel que le ferroperriclasé, second minéral le plus abondant dans le manteau inférieur, et elle présente une forte dépendance à la pression.

Nous avons développé un modèle décrivant le glissement des dislocations par nucléation de doubles décrochements basé sur la détermination par calcul atomistique de deux quantités : le potentiel de Peierls V_P et l'enthalpie de nucléation d'un double décrochement H_k . Ce modèle permet d'accéder à l'enthalpie de nucléation critique de double décrochement $\Delta H^*(\tau)$. Nous pouvons finalement déterminer une loi de vitesse des dislocations en fonction de la température. Les valeurs de vitesse obtenues dans le cas de la bridgmanite sont significativement plus basses que les vitesses dans l'olivine, minéral principal du manteau supérieur, elles même significativement plus basses que les vitesses dans le perriclasé.

Un ordre de grandeur des contraintes seuil à la déformation plastique est obtenu dans la bridgmanite pour l'activation en glissement des dislocations [100] dans (010) et [010] dans (100). En se plaçant dans des conditions du laboratoire, les contraintes obtenues sont du même ordre que celles obtenues lors d'expériences de déformation [Meade & Jeanloz 1990, Merkel *et al.* 2003, Girard *et al.* 2016], ce qui valide le modèle. Aux conditions du manteau terrestre, l'activation des systèmes de glissement [100](010) et [010](100) nécessite des niveaux de contrainte supérieurs aux contraintes attendues dans le manteau.

Parmi les autres mécanismes susceptibles d'intervenir dans le manteau, se tourner par élimination

vers le fluage Nabarro-Herring pour expliquer la déformation du manteau inférieur constituerait un raccourci trop important. La diffusion atomique influence la plasticité à travers différents mécanismes. Nous avons montré que le fluage par montée des dislocations pure est susceptible d'être plus efficace que le fluage Nabarro Herring, selon les tailles de grains et les densités de dislocations probables du manteau terrestre.

6.4 Perspectives

À l'issue des conclusions de cette thèse, trois sujets d'études sont proposés, afin d'étendre notre compréhension des mécanismes de déformation de la bridgmanite. Le premier est l'étude d'autres systèmes de glissement dans la bridgmanite, en particulier les dislocations [001] et [110], qui dans une perovskite cubique correspondraient au même système de glissement. La présence de dislocations [110] dans des échantillons de bridgmanite déformée a notamment été mis en avant par [Miyajima *et al.* 2009], lors de leur observation au microscope électronique à transmission. L'étude des structures des dislocations [001] et [110] a montré que ces dernières étaient dissociées ([Ferré *et al.* 2007], ainsi que les résultats de cette thèse). Cependant, leur mobilité en température n'a pas encore fait l'objet d'une étude complète.

Au vu des conclusions de cette thèse sur le glissement des dislocations [100] et [010], la seconde piste proposée concerne l'étude de mécanismes de glissement alternatifs au glissement de dislocations. Comme cela a été abordé dans la discussion, la montée des dislocations est un sujet prometteur. La modélisation de la vitesse de montée des dislocations dans un minéral tel que la bridgmanite présente un double enjeu. Premièrement, en physique des matériaux, la montée est un processus relativement peu étudié en comparaison du glissement. Ce mécanisme est difficile à étudier expérimentalement car son observation requiert à la fois des températures élevées, et l'inhibition des autres mécanismes de déformation qui à haute température sont nombreux. En simulation numérique, la modélisation de ce mécanisme est rendue complexe par ses temps caractéristiques relativement longs et par l'intégration des interactions entre dislocations et défauts ponctuels. L'étude de la montée constitue aussi un enjeu pour les géosciences. Dans le cadre de la déformation par montée, la détermination des mécanismes de diffusion dans le manteau est importante. L'estimation de la densité des dislocations constituera aussi un paramètre clef de l'efficacité de ce mécanisme. Enfin, une meilleure connaissance de la chimie du manteau sera elle aussi nécessaire, afin d'estimer les concentrations d'impuretés dans le manteau, paramètre

essentiel de sa rhéologie.

La troisième piste proposée concerne l'étude des mécanismes de déformation nécessaires à l'élaboration d'un modèle multi-échelle de la déformation de la bridgmanite. Dans un polycristal, la déformation dépend de la capacité de chaque grain à se déformer, mais aussi de l'interaction entre les différents grains. Cette interaction mène à des contraintes importantes localisées aux joints de grains. La capacité des joints de grains à se déformer est un mécanisme déterminant dans la déformation d'un polycristal. Les études de la déformation d'agrégats polycristallins d'olivine, le minéral majoritaire du manteau supérieur, ont montré à quel point les mécanismes de déformation localisés aux joints de grains sont importants ([Hirth & Kohlstedt 1995, Cordier *et al.* 2014, Ohuchi *et al.* 2015]). Il n'existe à ce jour aucune étude numérique des propriétés des joints de grains dans la bridgmanite, leur étude constituerait de ce fait une perspective intéressante.

Pour conclure sur ces quelques perspectives, l'étude du manteau inférieur semble être en bonne voie pour réaliser les desseins évoqués par Jean Paul Poirier, qui dans la préface de son livre [Poirier 2000] a écrit :

With the progress of laboratory experimental techniques as well as observational seismology, geochemistry, and geomagnetism, we may perhaps expect that someday "physics of the interior of the Earth" will make as little sense as "physics of the crust."

Bibliographie

- [Akins *et al.* 2004] J.A. Akins, S.-N. Luo, P.D. Asimow et T.J. Ahrens. *Shock-induced melting of $MgSiO_3$ perovskite and implications for melts in Earth's lowermost mantle*. Geophysical Research Letters, vol. 31, no. 14, 2004.
- [Alfredsson *et al.* 2005] M. Alfredsson, J.P. Brodholt, D.P. Dobson, A.R. Oganov, C.R.A. Catlow, S.C. Parker et G.D. Price. *Crystal morphology and surface structures of orthorhombic $MgSiO_3$ perovskite*. Physics and Chemistry of Minerals, vol. 31, no. 10, pages 671–682, 2005.
- [Ammann *et al.* 2009] M.W. Ammann, J.P. Brodholt et D.P. Dobson. *DFT study of migration enthalpies in $MgSiO_3$ perovskite*. Physics and Chemistry of Minerals, vol. 36, no. 3, pages 151–158, 2009.
- [Ammann *et al.* 2010] M.W. Ammann, J.P. Brodholt, J. Wookey et D.P. Dobson. *First-principles constraints on diffusion in lower-mantle minerals and a weak D'' layer*. Nature, vol. 465, no. 7297, pages 462–465, 2010.
- [Amodeo *et al.* 2012] J. Amodeo, Ph. Carrez et P. Cordier. *Modelling the effect of pressure on the critical shear stress of MgO single crystals*. Philosophical Magazine, vol. 92, no. 12, pages 1523–1541, 2012.
- [Amodeo 2011] J. Amodeo. *Modélisation multi-échelle de la déformation plastique de MgO monocristallin : du laboratoire au manteau terrestre*. PhD thesis, 2011.
- [Anderson 1982] O.L. Anderson. *The Earth's Core and the Phase Diagram of Iron*. Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 306, no. 1492, pages 21–35, aug 1982.
- [Anderson 1998] O.L. Anderson. *Thermoelastic properties of $MgSiO_3$ perovskite using the Debye approach*. American Mineralogist, vol. 83, no. 1, pages 23–35, 1998.

- [Badro 2003] J. Badro. *Iron Partitioning in Earth's Mantle : Toward a Deep Lower Mantle Discontinuity*. Science, vol. 300, no. 5620, pages 789–791, may 2003.
- [Beauchesne & Poirier 1989] S. Beauchesne et J.P. Poirier. *Creep of barium titanate perovskite : a contribution to a systematic approach to the viscosity of the lower mantle*. Phys. Earth Planet. Inter., vol. 55, pages 187–199, 1989.
- [Beauchesne & Poirier 1990] S. Beauchesne et J.P. Poirier. *In search of a systematics for the viscosity of perovskites : creep of potassium tantalate and niobate*. Physics of the earth and planetary interiors, vol. 61, no. 3, pages 182–198, 1990.
- [Belonoshko 1994] A.B. Belonoshko. *Molecular dynamics of MgSiO₃ perovskite at high pressures : Equation of state, structure, and melting transition*. Geochimica et Cosmochimica Acta, vol. 58, no. 19, pages 4039–4047, 1994.
- [Besson *et al.* 1996] P. Besson, J.P. Poirier et G.D. Price. *Dislocations in CaTiO₃ perovskite deformed at high-temperature : a transmission electron microscopy study*. Physics and chemistry of minerals, vol. 23, no. 6, pages 337–344, 1996.
- [Boioli *et al.* 2015] F. Boioli, Ph. Carrez, P. Cordier, B. Devincere et M. Marquille. *Modeling the creep properties of olivine by 2.5-dimensional dislocation dynamics simulations*. Physical Review B, vol. 92, no. 1, page 014115, 2015.
- [Brown & Shankland 1981] J.M. Brown et T.J. Shankland. *Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles*. Geophysical Journal International, vol. 66, no. 3, pages 579–596, sep 1981.
- [Cagnon 1979] M. Cagnon. *Théorie de l'activation thermique*. In Dislocations et déformation plastique, pages 53–66, 1979.
- [Cai *et al.* 2003] W. Cai, V.V. Bulatov, J. Chang, J. Li et S. Yip. *Periodic Image Effects in Dislocation Modelling*. Philos. Mag., vol. 83, no. 5, page 539, Janvier 2003.
- [Caillard & Martin 2003] D. Caillard et J.L. Martin. Pergamon, 2003.
- [Carter 1976] N.L. Carter. *Steady state flow of rocks*. Reviews of Geophysics, vol. 14, no. 3, pages 301–360, 1976.
- [Celli *et al.* 1963] V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya et R. Thomson. *Theory of Dislocation Mobility in Semiconductors*. Phys. Rev., vol. 131, pages 58–72, 1963.

- [Chaari *et al.* 2014] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney. *First-Principles Study of Secondary Slip in Zirconium*. Physical review letters, vol. 075504, no. February, pages 1–5, 2014.
- [Chen *et al.* 2002] J. Chen, D.J. Weidner et M.T. Vaughan. *The strength of $Mg_{0.9}Fe_{0.1}SiO_3$ perovskite at high pressure and temperature*. Nature, vol. 419, page 824, october 2002.
- [Chen *et al.* 2007] Qiong Chen, Xin-lu Cheng et Xiang-dong Yang. *Influence of New Interaction Potential on MD Simulation of $MgSiO_3$ Perovskite Thermodynamic Properties*. Chinese Journal of Chemical Physics, vol. 20, no. 5, pages 547–551, 2007.
- [Chen *et al.* 2012] Y. Chen, A Chernatynskiy, D. Brown, Schelling P. K., Artacho E. et S.R. Phillpot. Phys. Earth Planet. Inter., vol. 210–211, pages 75 – 89, 2012.
- [Clouet 2011a] E. Clouet. *Dislocation core field. I. Modeling in anisotropic linear elasticity theory*. Phys. Rev. B, vol. 84, page 224111, 2011.
- [Clouet 2011b] E. Clouet. *Predicting dislocation climb : Classical modeling versus atomistic simulations*. Physical Review B, vol. 84, no. 9, page 092106, 2011.
- [Clouet 2013] E. Clouet. *Etude par simulations numériques de la plasticité dans les métaux*. PhD thesis, Université des Sciences et Technologie de Lille-Lille I, 2013.
- [Coble 1963] R.L. Coble. *A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials*. Journal of Applied Physics (US), vol. 34, 1963.
- [Cohen 1987] R.E. Cohen. *Elasticity and equation of state of $MgSiO_3$ perovskite*. Geophysical Research Letters, vol. 14, no. 10, pages 1053–1056, 1987.
- [Cordier *et al.* 2004] P. Cordier, T. Ungár, L. Zsoldos et G. Tichy. *Dislocation creep in $MgSiO_3$ perovskite at conditions of the Earth's uppermost lower mantle*. Nature, vol. 428, no. 1, page 837, march 2004.
- [Cordier *et al.* 2014] Patrick Cordier, Sylvie Demouchy, Benoît Beausir, Vincent Taupin, Fabrice Barou, Claude Fressengeas *et al.* *Disclinations provide the missing mechanism for deforming olivine-rich rocks in the mantle*. Nature, vol. 507, no. 7490, pages 51–56, 2014.
- [da Silva *et al.* 2000] C.R.S. da Silva, R.M. Wentzcovitch, A. Patel, G.D. Price et S.I. Karato. *The composition and geotherm of the lower mantle : constraints from the elasticity of silicate perovskite*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 118, no. 1, pages 103–109, 2000.

- [de Wit & Trampert 2015] R.W.L. de Wit et J. Trampert. *Robust constraints on average radial lower mantle anisotropy and consequences for composition and texture*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 429, pages 101–109, 2015.
- [Dezerald *et al.* 2014] L. Dezerald, L. Ventelon, E. Clouet, C. Denoual, D. Rodney et F. Willaime. *Ab initio modeling of the two-dimensional energy landscape of screw dislocations in bcc transition metals*. Phys. Rev. B, vol. 89, page 024104, Jan 2014.
- [Dézerald 2014] Lucile Dézerald. *Modélisation ab initio des dislocations vis dans les métaux de transition cubiques centrés*. PhD thesis, 2014.
- [Dobson *et al.* 2008] David P Dobson, Ralf Dohmen et Michael Wiedenbeck. *Self-diffusion of oxygen and silicon in MgSiO₃ perovskite*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 270, no. 1, pages 125–129, 2008.
- [Dobson 2003] D. Dobson. *Oxygen ionic conduction in MgSiO₃ perovskite*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 139, no. 1, pages 55–64, 2003.
- [Dorn & Rajnak 1964] J. Dorn et S. Rajnak. *Nucleation of Kink Pairs and the Peierls Mechanism of Plastic Deformation*. T. Metall. Soc. Aime, vol. 230, no. 8, page 1052, 1964.
- [Douin *et al.* 1986] J. Douin, P. Veyssi re et P. Beauchamp. *Dislocation line stability in Ni₃Al*. Philosophical Magazine A, vol. 54, no. 3, pages 375–393, 1986.
- [Doukhan & Doukhan 1986] N. Doukhan et J.C. Doukhan. *Dislocations in perovskites BaTiO₃ and CaTiO₃*. Physics and chemistry of minerals, pages 403–410, 1986.
- [Dziewonski & Anderson 1981] A.M. Dziewonski et D.L. Anderson. *Preliminary reference Earth model*. Phys. Earth Planet. Inter., vol. 25, 1981.
- [Edagawa *et al.* 1997] K. Edagawa, T. Suzuki et S. Takeuchi. *Motion of a screw dislocation in a two-dimensional Peierls potential*. Physical Review B, vol. 55, no. 10, page 6180, 1997.
- [Edelin & Poirier 1973] G. Edelin et J.P. Poirier. *Etude de la mont e des dislocations au moyen d’exp eriences de fluage par diffusion dans le magn esium : II. Mesure de la vitesse de mont e*. Philosophical Magazine, vol. 28, no. 6, pages 1211–1223, 1973.
- [Ercolessi & Adams 1994] F. Ercolessi et J. B. Adams. *Interatomic Potentials from First-Principles Calculations : The Force-Matching Method*. EPL (Europhysics Letters), vol. 26, no. 8, page 583, 1994.

- [Ewald 1921] P.P. Ewald. *Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*. Annalen der Physik, vol. 369, no. 3, pages 253–287, 1921.
- [Fei *et al.* 1990] Y. Fei, S.K. Saxena et A. Navrotsky. *Internally consistent thermodynamic data and equilibrium phase relations for compounds in the system MgO-SiO₂ at high pressure and high temperature*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 95, no. B5, pages 6915–6928, 1990.
- [Ferré *et al.* 2007] D. Ferré, Ph. Carrez et P. Cordier. *First principles determination of dislocations properties of MgSiO₃ perovskite at 30GPa based on the Peierls–Nabarro model*. Phys. Earth Planet. Inter., vol. 163, no. 1-4, page 283, 2007.
- [Fiquet *et al.* 1998] G. Fiquet, D. Andrault, A. Dewaele, T. Charpin, M. Kunz et D. Haüsermann. *P-V-T equation of state of MgSiO₃ perovskite*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 105, no. 1-2, pages 21–31, jan 1998.
- [Fiquet *et al.* 2000] G. Fiquet, A. Dewaele, D. Andrault, M. Kunz et T. Le Bihan. *Thermoe-lastic properties and crystal structure of MgSiO₃ perovskite at lower mantle pressure and temperature conditions*. Geophysical Research Letters, vol. 27, no. 1, pages 21–24, 2000.
- [Forte & Mitrovica 1996] A.M. Forte et J.X. Mitrovica. *New inferences of mantle viscosity from joint inversion of long-wavelength mantle convection and post-glacial rebound data*. Geophysical Research Letters, vol. 23, no. 10, pages 1147–1150, 1996.
- [French & Romanowicz 2015] S.W. French et B. Romanowicz. *Broad plumes rooted at the base of the Earth’s mantle beneath major hotspots*. Nature, vol. 525, no. 7567, pages 95–99, sep 2015.
- [Frost *et al.* 2004] D. J Frost, C. Liebske, F. Langenhorst, C. McCammon, R.G. Trønnes et D.C. Rubie. *Experimental evidence for the existence of iron-rich metal in the Earth’s lower mantle*. Nature, vol. 428, no. 6981, pages 409–412, mar 2004.
- [Fukao & Obayashi 2013] Y. Fukao et M. Obayashi. *Subducted slabs stagnant above, penetrating through, and trapped below the 660 km discontinuity*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 118, no. 11, pages 5920–5938, 2013.
- [Fukao *et al.* 2001] Y. Fukao, S. Widiyantoro et M. Obayashi. *Stagnant slabs in the upper and lower mantle transition region*. Reviews of Geophysics, vol. 39, no. 3, pages 291–323, 2001.

- [Fukao *et al.* 2009] Y. Fukao, M. Obayashi et T. Nakakuki. *Stagnant slab : a review*. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, vol. 37, pages 19–46, 2009.
- [Funamori *et al.* 1996] N. Funamori, T. Yagi, W. Utsumi, T. Kondo, T. Uchida et M. Funamori. *Thermoelastic properties of MgSiO₃ perovskite determined by in situ X ray observations up to 30 GPa and 2000 K*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 101, no. B4, pages 8257–8269, 1996.
- [Garnero & Jeanloz 2000] E.J. Garnero et R. Jeanloz. *Fuzzy patches on the earth's core-mantle boundary ?* Geophysical Research Letters, vol. 27, no. 17, pages 2777–2780, 2000.
- [Geslin *et al.* 2014] P.-A. Geslin, B. Appolaire et A. Finel. *A phase field model for dislocation climb*. Applied Physics Letters, vol. 104, no. 1, page 011903, 2014.
- [Gilbert 1968] T. L. Gilbert. *Soft Sphere Model for Closed Shell Atoms and Ions*. The Journal of Chemical Physics, vol. 49, no. 6, pages 2640–2642, 1968.
- [Girard *et al.* 2016] J. Girard, G. Amulele, R. Fala, A. Mohiuddin et S.I. Karato. *Shear deformation of bridgmanite and magnesiowüstite aggregates at lower mantle conditions*. Science, 2016.
- [Gouriet *et al.* 2014] K. Gouriet, Ph. Carrez et P. Cordier. *Modelling [100] and [010] screw dislocations in MgSiO₃ perovskite based on the Peierls–Nabarro–Galerkin model*. Modell. Simul. Mater. Sci. Eng., vol. 22, no. 2, page 025020, Mars 2014.
- [Grand *et al.* 1997] S.P. Grand, R.D. van der Hilst et S. Widiyantoro. *High resolution global tomography : a snapshot of convection in the Earth*. Geological Society of America Today, vol. 7, no. 4, 1997.
- [Gröger *et al.* 2008] R. Gröger, A.G. Bailey et V. Vitek. *Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten : I. Atomistic studies of the core structure and glide of 1/2<111> screw dislocations at 0 K*. Acta Mater., vol. 56, no. 19, page 5401, 2008.
- [Guyot & Dorn 1967] P. Guyot et J.E. Dorn. *A Critical Review of the Peierls Mechanism*. Can. J. Phys., vol. 45, page 983, 1967.
- [Hager & Richards 1989] B.H. Hager et M.A. Richards. *Long-wavelength variations in Earth's geoid : physical models and dynamical implications*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 328, no. 1599, pages 309–327, 1989.

- [Haskell 1935] N.A. Haskell. *The motion of a viscous fluid under a surface load*. Journal of Applied Physics, vol. 6, no. 8, pages 265–269, 1935.
- [Heinz & Jeanloz 1987] D. L Heinz et R. Jeanloz. *Measurement of the melting curve of $Mg_{0.9}Fe_{0.1}SiO_3$ at lower mantle conditions and its geophysical implications*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012), vol. 92, no. B11, pages 11437–11444, 1987.
- [Henkelman & Jónsson 2000] G. Henkelman et H. Jónsson. *Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points*. J. Chem. Phys., vol. 113, no. 22, page 9978, 2000.
- [Henkelman *et al.* 2000] G. Henkelman, B.P. Uberuaga et H. Jónsson. *A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths*. J. Chem. Phys., vol. 113, no. 22, page 9901, 2000.
- [Herring 1950] C. Herring. *Diffusional viscosity of a polycrystalline solid*. Journal of applied physics, vol. 21, no. 5, pages 437–445, 1950.
- [Hirel *et al.* 2012] P. Hirel, M. Mrovec et C. Elsässer. *Atomistic simulation study of $[110]$ dislocations in strontium titanate*. Acta Materialia, vol. 60, pages 329–338, 2012.
- [Hirel *et al.* 2014] P. Hirel, A. Kraych, Ph. Carrez et P. Cordier. *Atomic core structure and mobility of $[100](010)$ and $[010](100)$ dislocations in $MgSiO_3$ perovskite*. Acta Mater., vol. 79, page 117, Octobre 2014.
- [Hirel *et al.* 2016] P. Hirel, Ph. Carrez et P. Cordier. *From glissile to sessile : Effect of temperature on $\langle 110 \rangle$ dislocations in perovskite materials*. Scripta Materialia, vol. 120, pages 67 – 70, 2016.
- [Hirth & Kohlstedt 1995] Greg Hirth et David L Kohlstedt. *Experimental constraints on the dynamics of the partially molten upper mantle : Deformation in the diffusion creep regime*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 100, no. B2, pages 1981–2001, 1995.
- [Hirth & Lothe 1982] J.P. Hirth et J. Lothe. Theory of Dislocations. New York : Wiley, 1982.
- [Holzapfel *et al.* 2005] C. Holzapfel, D.C. Rubie, D.J. Frost et F. Langenhorst. *Fe-Mg inter-diffusion in $(Mg,Fe)SiO_3$ perovskite and lower mantle reequilibration*. Science, vol. 309, no. 5741, pages 1707–1710, 2005.

- [Idrissi *et al.* 2016] H. Idrissi, C. Bollinger, F. Boioli, D. Schryvers et P. Cordier. *Low-temperature plasticity of olivine revisited with in situ TEM nanomechanical testing*. Science Advances, vol. 2, no. 3, page e1501671, 2016.
- [in 't Veld *et al.* 2007] Pieter J. in 't Veld, Ahmed E Ismail, Gary S Grest *et al.* *Application of Ewald summations to long-range dispersion forces*. The Journal of chemical physics, vol. 127, no. 14, page 144711, 2007.
- [Irifune 1993] T. Irifune. *Phase transformations in the Earth's mantle and subducting slabs : Implications for their compositions, seismic velocity and density structures and dynamics*. Island Arc, vol. 2, no. 2, pages 55–71, 1993.
- [Ito & Katsura 1992] E. Ito et T. Katsura. *Melting of ferromagnesian silicates under the lower mantle conditions*. High-Pressure Research : Applications to Earth and Planetary Sciences. Terrapub., Tokyō American Geophysical Union, Washington, DC, pages 315–322, 1992.
- [Ito & Toriumi 2010] Y. Ito et M. Toriumi. *Silicon self-diffusion of MgSiO₃ perovskite by molecular dynamics and its implication for lower mantle rheology*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 115, no. B12, 2010.
- [Jónsson *et al.* 1998] H. Jónsson, G. Mills et K. W. Jacobsen. Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions, chapitre 16, page 385. World Scientific, Singapore, 1998.
- [Joós & Duesbery 1997] B. Joós et M.S. Duesbery. *The Peierls Stress of Dislocations : An Analytic Formula*. Physical Review Letters, vol. 78, no. 2, pages 266–269, 1997.
- [Joós & Zhou 2001] B. Joós et J. Zhou. *The Peierls-Nabarro model and the mobility of the dislocation line*. Philos. Mag. A, vol. 81, no. 5, page 1329, Mai 2001.
- [Joós *et al.* 1994] B. Joós, Q. Ren et M.S. Duesbery. *Peierls-Nabarro model of dislocations in silicon with generalized stacking-fault restoring forces*. Physical Review B, vol. 50, no. 9, pages 5890–5898, Septembre 1994.
- [Kabir *et al.* 2010] M. Kabir, T.T. Lau, D. Rodney, S. Yip et Krystyn J. Van V. *Predicting dislocation climb and creep from explicit atomistic details*. Physical review letters, vol. 105, no. 9, page 095501, 2010.

- [Karasawa & Goddard 1989] N. Karasawa et W.A. Goddard. *Acceleration of convergence for lattice sums*. The Journal of Physical Chemistry, vol. 93, no. 21, pages 7320–7327, 1989.
- [Karato & Li 1992] Shun-Ichiro Karato et Ping Li. *Diffusion creep in perovskite : implications for the rheology of the lower mantle*. Science, vol. 255, no. 5049, pages 1238–1240, 1992.
- [Karato *et al.* 1990] S. Karato, Kiyoshi F. et Eiji I. Geophysical Research Letters, 1990.
- [Karato *et al.* 1995] S.I. Karato, S. Zhang et H.-R. Wenk. *Superplasticity in Earth's lower mantle : evidence from seismic anisotropy and rock physics*. Science, vol. 270, no. 5235, page 458, 1995.
- [Karki & Khanduja 2007] B.B. Karki et G. Khanduja. *A computational study of ionic vacancies and diffusion in MgSiO₃ perovskite and post-perovskite*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 260, no. 1, pages 201–211, 2007.
- [Karki *et al.* 1997] B.B. Karki, L. Stixrude, S.J. Clark, M.C. Warren, G.J. Ackland et J. Crain. *Elastic properties of orthorhombic MgSiO₃ perovskite at lower mantle pressures*. American Mineralogist, vol. 82, no. 5, pages 635–638, 1997.
- [Karki *et al.* 2000] B.B. Karki, R.M. Wentzcovitch, S. De Gironcoli et S. Baroni. *Ab initio lattice dynamics of MgSiO₃ perovskite at high pressure*. Physical Review B, vol. 62, no. 22, page 14750, 2000.
- [Kellogg *et al.* 1999] L. H. Kellogg, B.H. Hager et R.D. van der Hilst. *Compositional Stratification in the Deep Mantle*. Science, vol. 283, no. 5409, pages 1881–1884, 1999.
- [Knight & Burton 1989] D.T. Knight et B. Burton. *The climb behaviour of a dislocation which is pinned at two points*. Philosophical Magazine A, vol. 59, no. 5, pages 1027–1044, 1989.
- [Knittle & Jeanloz 1987] E. Knittle et R. Jeanloz. *Synthesis and Equation of State of (Mg,Fe)SiO₃ Perovskite to Over 100 Gigapascals*. Science, vol. 235, pages 668–670, 1987.
- [Knittle & Jeanloz 1989] E. Knittle et R. Jeanloz. *Melting curve of (Mg,Fe)SiO₃ perovskite to 96 GPa : Evidence for a structural transition in lower mantle melts*. Geophysical Research Letters, vol. 16, no. 5, pages 421–424, 1989.
- [Knittle *et al.* 1986] E. Knittle, R. Jeanloz et G.L. Smith. *Thermal expansion of silicate perovskite and stratification of the Earth's mantle*. 1986.

- [Kocks *et al.* 1975] U.F. Kocks, A.S. Argon et M.F. Ashby. Thermodynamics and kinetics of slip. Pergamon Press, 1975.
- [Koizumi *et al.* 1993] H. Koizumi, H.O.K. Kirchner et T. Suzuki. *Kink Pair Nucleation and Critical Shear Stress*. Acta Metall. Mater., vol. 41, no. 12, page 3483, 1993.
- [Koizumi *et al.* 1994] H. Koizumi, H.O.K. Kirchner et T. Suzuki. *Nucleation of Trapezoidal Kink Pairs on a Peierls Potential*. Philos. Mag. A, vol. 69, page 805, 1994.
- [Kubin 2013] L.P. Kubin. Oxford University Press, 2013.
- [Kudoh *et al.* 1990] Y. Kudoh, C. T. Prewitt et L. W. Finger. *Effect of iron on the crystal structure of (Mg,Fe)SiO₃ perovskite*. Geophysical Research Letters, vol. 17, no. 10, pages 1481–1484, 1990.
- [Lawrence & Wysession 2006] J.F. Lawrence et M.E. Wysession. *QLM9 : A new radial quality factor ($Q \mu$) model for the lower mantle*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 241, no. 3, pages 962–971, 2006.
- [Le Hazif *et al.* 1973] R. Le Hazif, G. Edelin et J.M. Dupouy. *Diffusion creep by dislocation climb in beryllium and Be-Cu single crystals*. Metallurgical and Materials Transactions B, vol. 4, no. 5, pages 1275–1281, 1973.
- [Lewis & van de Geijn 1993] J.G. Lewis et R.A. van de Geijn. *Distributed Memory Matrix-vector Multiplication and Conjugate Gradient Algorithms*. In Proceedings of the 1993 ACM/IEEE Conference on Supercomputing, Supercomputing '93, pages 484–492, New York, NY, USA, 1993. ACM.
- [Li *et al.* 1996] P. Li, S.I. Karato et Z. Wang. *High-temperature creep in fine-grained polycrystalline CaTiO₃, an analogue material of (Mg,Fe)SiO₃ perovskite*. Physics of the earth and planetary interiors, vol. 95, no. 1, pages 19–36, 1996.
- [Liu *et al.* 2007] L.G. Liu, S. Xiao-Wei, T. Xiao-Ming, G. Yun-Dong et Y. Xiang-Dong. *Structural and thermodynamic properties of MgSiO₃ perovskite under high pressure and high temperature*. Solid State Communications, vol. 144, no. 5–6, pages 264 – 268, 2007.
- [Liu 1974] L.G. Liu. *Silicate perovskite from phase transformations of pyrope-garnet at high pressure and temperature*. Geophysical Research Letters, no. 6, pages 277–280, 1974.

- [Liu 1976] L.G. Liu. *Orthorhombic perovskite phases observed in olivine, pyroxene and garnet at high pressures and temperatures*. Phys. Earth Planet. Inter., vol. 11, no. 4, page 289, 1976.
- [Mainprice *et al.* 2008] D. Mainprice, T. Andréa, D. Ferré, Ph. Carrez et P. Cordier. *Predicted glide systems and crystal preferred orientations of polycrystalline silicate Mg-Perovskite at high pressure : Implications for the seismic anisotropy in the lower mantle*. Earth Planet. Sci. Lett., vol. 271, no. 1-4, page 135, 2008.
- [Mainprice 2007] D. Mainprice. *Seismic anisotropy of the deep Earth from a mineral and rock physics perspective*. In Treatise in Geophysics-Volume 2 Mineral Physics, pages 437–492. 2007.
- [Mao & Knowles 1996] Z. Mao et K.M. Knowles. *Dissociation of lattice dislocations in SrTiO₃*. Philosophical Magazine A, vol. 73, no. 3, pages 699–708, 1996.
- [Matsui *et al.* 1987] M. Matsui, M. Akaogi et T. Matsumoto. *Computational model of the structural and elastic properties of the ilmenite and perovskite phases of MgSiO₃*. Physics and Chemistry of Minerals, vol. 14, no. 2, pages 101–106, 1987.
- [McNamara *et al.* 2003] A.K. McNamara, P.E. van Keken et S.I. Karato. *Development of finite strain in the convecting lower mantle and its implications for seismic anisotropy*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 108, no. B5, 2003.
- [Meade & Jeanloz 1990] C. Meade et R. Jeanloz. *Yield strength of MgO to 40 GPa*. J. Geophys. Res., vol. 93, no. B4, page 3261, 1990.
- [Meade *et al.* 1995a] C. Meade, H.K. Mao et J. Hu. *High-Temperature Phase Transition and Dissociation of (Mg,Fe)SiO₃ Perovskite at Lower Mantle Pressures*. Science, vol. 268, no. 5218, pages 1743–1745, jun 1995.
- [Meade *et al.* 1995b] C. Meade, P. G Silver et S. Kaneshima. *Laboratory and seismological observations of lower mantle isotropy*. Geophysical Research Letters, vol. 22, no. 10, pages 1293–1296, 1995.
- [Meisheng *et al.* 1992] H. Meisheng, H.-R. Wenk et D. Sinitsyna. *Microstructures in natural perovskites*. American Mineralogist, vol. 77, no. 3-4, pages 359–373, 1992.

- [Merkel *et al.* 2003] S. Merkel, H.R. Wenk, J. Badro, G. Montagnac, P. Gillet, H.-K. Mao et R.J. Hemley. *Deformation of $(Mg_{0.9},Fe_{0.1})SiO_3$ Perovskite aggregates up to 32 GPa*. Earth Planet. Sci. Lett., vol. 209, no. 3-4, page 351, 2003.
- [Mitchell *et al.* 1999] T.E. Mitchell, P. Peralta et J.P. Hirth. *Deformation by a kink mechanism in high temperature materials*. Acta Materialia, vol. 47, no. 13, pages 3687–3694, oct 1999.
- [Mitrovica & Forte 2004] J.X. Mitrovica et A.M. Forte. *A new inference of mantle viscosity based upon joint inversion of convection and glacial isostatic adjustment data*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 225, no. 1, pages 177–189, 2004.
- [Miyagi 2009] L.M. Miyagi. *Deformation and Texture Development in Deep Earth Mineral Phases : Implications for Seismic Anisotropy and Dynamics*. PhD thesis, Berkeley, 2009.
- [Miyajima *et al.* 2009] N. Miyajima, T. Yagi et M. Ichihara. *Phys. Earth Planet. Inter.* vol. 174, pages 153–158, 2009.
- [Momprou & Caillard 2008a] F. Momprou et D. Caillard. *Dislocation-climb plasticity : Modelling and comparison with the mechanical properties of icosahedral AlPdMn*. Acta Materialia, vol. 56, no. 10, pages 2262–2271, 2008.
- [Momprou & Caillard 2008b] F. Momprou et D. Caillard. *On the stress exponent of dislocation climb velocity*. Materials Science and Engineering : A, vol. 483, pages 143–147, 2008.
- [Momprou *et al.* 2004] F. Momprou, D. Caillard† et M. Feuerbacher. *In-situ observation of dislocation motion in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals*. Philosophical Magazine, vol. 84, no. 25-26, pages 2777–2792, 2004.
- [Montagner 1994] J.-P. Montagner. *Can seismology tell us anything about convection in the mantle ?* Reviews of Geophysics, vol. 32, no. 2, pages 115–137, 1994.
- [Montelli *et al.* 2004] R. Montelli, G. Nolet, F.A. Dahlen, G. Masters, E.R. Engdahl et S.-H. Hung. *Finite-frequency tomography reveals a variety of plumes in the mantle*. Science, vol. 303, no. 5656, pages 338–343, 2004.
- [Mordehai *et al.* 2008] D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier. *Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics*. Philosophical Magazine, vol. 88, no. 6, pages 899–925, 2008.

- [Murakami *et al.* 2004] M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata et Y. Ohishi. *Post-perovskite phase transition in MgSiO₃*. *Science*, vol. 304, no. 5672, pages 855–858, 2004.
- [Nabarro 1947] F.R.N. Nabarro. *Dislocations in a Simple Cubic Lattice*. *Proc. Phys. Soc.*, vol. 59, page 256, 1947.
- [Nabarro 1967] F.R.N. Nabarro. *Steady-state diffusional creep*. *Philosophical Magazine*, vol. 16, no. 140, pages 231–237, 1967.
- [Nijboer & De Wette 1957] B.R.A. Nijboer et F.W. De Wette. *On the calculation of lattice sums*. *Physica*, vol. 23, no. 1-5, pages 309–321, 1957.
- [Oganov & Ono 2004] A.R. Oganov et S. Ono. *Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth's D'' layer*. *Nature*, vol. 430, no. 6998, pages 445–448, 2004.
- [Oganov *et al.* 2000] A.R. Oganov, J.P. Brodholt et G.D. Price. *Comparative study of quasi-harmonic lattice dynamics, molecular dynamics and Debye model applied to MgSiO₃ perovskite*. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, vol. 122, page 277, 2000.
- [Oganov *et al.* 2001] A.R. Oganov, J.P. Brodholt et G.D. Price. *The elastic constants of MgSiO₃ perovskite at pressures and temperatures of the Earth's mantle*. *Nature*, vol. 411, no. 6840, pages 934–937, 2001.
- [Ohuchi *et al.* 2015] Tomohiro Ohuchi, Takaaki Kawazoe, Yuji Higo, Ken-ichi Funakoshi, Akio Suzuki, Takumi Kikegawa et Tetsuo Irifune. *Dislocation-accommodated grain boundary sliding as the major deformation mechanism of olivine in the Earth's upper mantle*. *Science advances*, vol. 1, no. 9, page e1500360, 2015.
- [Ono 2008] Shigeaki Ono. *Experimental constraints on the temperature profile in the lower mantle*. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, vol. 170, no. 3, pages 267–273, 2008.
- [Panning & Romanowicz 2006] M. Panning et B. Romanowicz. *A three-dimensional radially anisotropic model of shear velocity in the whole mantle*. *Geophys. J. Int.*, vol. 167, no. 1, page 361, 2006.
- [Peierls 1940] R. Peierls. *The Size of a Dislocation*. *Proc. Phys. Soc.*, vol. 52, page 34, 1940.

- [Peng *et al.* 2014] Q. Peng, W. Ji, J. Lian, X.-J. Chen, H. Huang, F. Gao et S. De. *Pressure effect on stabilities of self-Interstitials in HCP-Zirconium*. Scientific reports, vol. 4, 2014.
- [Pfiffner & Ramsay 1982] O.A. Pfiffner et J.G. Ramsay. *Constraints on geological strain rates : arguments from finite strain states of naturally deformed rocks*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth (1978–2012), vol. 87, no. B1, pages 311–321, 1982.
- [Philibert 1979] J. Philibert. *Glissement des dislocations dans un réseau parfait*. In Dislocations et déformation plastique, pages 53–66, 1979.
- [Pizzagalli *et al.* 2008a] L. Pizzagalli, P. Beauchamp et H. Jónsson. *Calculations of dislocation mobility using Nudged Elastic Band method and first principles DFT calculations*. Philosophical Magazine, vol. 88, no. 1, pages 91–100, jan 2008.
- [Pizzagalli *et al.* 2008b] L. Pizzagalli, A. Pedersen, A. Arnaldsson, H. Jónsson et P. Beauchamp. *Theoretical study of kinks on screw dislocation in silicon*. Phys. Rev. B, vol. 77, no. 6, page 064106, 2008.
- [Plimpton 1995] S. Plimpton. *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*. J. Comput. Phys., vol. 117, page 1, 1995.
- [Poirier *et al.* 1983] J.P. Poirier, J. Peyronneau, J.-Y. Gesland et G. Brebec. *Viscosity and conductivity of the lower mantle ; an experimental study on a MgSiO₃ perovskite analogue, KZnF₃*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 32, no. 3, pages 273–287, 1983.
- [Poirier *et al.* 1989] J.P. Poirier, S. Beauchesne et F. Guyot. *Deformation mechanisms of crystals with perovskite structure*. Perovskite : A Structure of Great Interest to Geophysics and Materials Science, pages 119–123, 1989.
- [Poirier 1985] J.P. Poirier. *Creep of Crystals, 260 pp*. Cambridge University Press, New York. Cerca con Google, 1985.
- [Poirier 2000] J.P. Poirier. *Introduction to the physics of the earth's interior*. Cambridge University Press, 2000.
- [Price *et al.* 1989] G.D. Price, A. Wall et S.C. Parker. *The properties and behaviour of mantle minerals : a computer-simulation approach*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 328, no. 1599, pages 391–407, 1989.

- [Queyreau *et al.* 2011] S. Queyreau, J. Marian, M.R. Gilbert et B.D. Wirth. *Edge dislocation mobilities in bcc Fe obtained by molecular dynamics*. Phys. Rev. B, vol. 84, no. 6, pages 1–7, 2011.
- [Ricard & Wuming 1991] Y. Ricard et B. Wuming. *Inferring the viscosity and the 3-D density structure of the mantle from geoid, topography and plate velocities*. Geophysical Journal International, vol. 105, no. 3, pages 561–571, 1991.
- [Ringwood 1962] A.E. Ringwood. *Mineralogical constitution of the deep mantle*. Journal of Geophysical Research, vol. 67, no. 10, page 4005, 1962.
- [Ringwood 1975] A. E. Ringwood. *Composition and petrology of the earth's mantle*. 1975.
- [Ringwood 1991] A.E. Ringwood. *Phase transformations and their bearing on the constitution and dynamics of the mantle*. Geochimica et Cosmochimica Acta, vol. 55, no. 8, pages 2083–2110, aug 1991.
- [Ritterbex *et al.* 2015] S. Ritterbex, Ph. Carrez, K. Gouriet et P. Cordier. *Modeling dislocation glide in Mg₂SiO₄ ringwoodite : Towards rheology under transition zone conditions*. Physics of the Earth and Planetary Interiors , vol. 248, pages 20 – 29, 2015.
- [Rodney & Proville 2009] D. Rodney et L. Proville. *Stress-Dependent Peierls Potential : Influence on Kink-Pair Activation*. Phys. Rev. B, vol. 79, page 094108, 2009.
- [Ross & Hazen 1989] N.L. Ross et R.M. Hazen. *Single crystal X-ray diffraction study of MgSiO₃ perovskite from 77 to 400 K*. Physics and Chemistry of Minerals, vol. 16, no. 5, pages 415–420, 1989.
- [Ross & Hazen 1990] N.L. Ross et R.M. Hazen. *High-pressure crystal chemistry of MgSiO₃ perovskite*. Physics and Chemistry of Minerals, vol. 17, no. 3, pages 228–237, 1990.
- [Saxena *et al.* 1999] S.K. Saxena, L.S. Dubrovinsky, F. Tutti et T. Le Bihan. *Equation of state of MgSiO₃ with the perovskite structure based on experimental measurement*. American Mineralogist, vol. 84, no. 3, pages 226–232, 1999.
- [Schoeck 1965] G. Schoeck. *The Activation Energy of Dislocation Movement*. physica status solidi (b), vol. 8, no. 2, pages 499–507, 1965.
- [Schoeck 2001] G. Schoeck. *The core structure, recombination energy and Peierls energy for dislocations in Al*. Philosophical Magazine A, vol. 81, pages 1161–1176, 2001.

- [Seeger & Schiller 1962] A. Seeger et P. Schiller. *Bildung und Diffusion von Kinken als Grundprozess der Versetzungsbewegung bei der Messung der inneren Reibung*. Acta Metall., vol. 10, page 348, 1962.
- [Seeger & Wüthrich 1976] A. Seeger et C. Wüthrich. *Dislocation relaxation processes in body-centred cubic metals*. Nuovo Cim., vol. 33B, pages 38–75, 1976.
- [Seeger A. 1953] Schoeck G. Seeger A. *Die Aufspaltung von Versetzungen in Metallen Dichtester Kugelpackung*. Acta Metallurgica, vol. 1, pages 519–538, 1953.
- [Seeger 1984] A. Seeger. *Structure and Diffusion of Kinks in Monoatomic Crystals*, page 141. CNRS, Paris, 1984.
- [Shen & Lazor 1995] G. Shen et P. Lazor. *Measurement of melting temperatures of some minerals under lower mantle pressures*. J. Geophys. Res., vol. 100, pages 17–699, 1995.
- [Sheppard *et al.* 2008] D. Sheppard, R. Terrell et G. Henkelman. *Optimization methods for finding minimum energy paths*. The Journal of chemical physics, vol. 128, no. 13, page 134106, Avril 2008.
- [Shim *et al.* 2001] S.-H. Shim, T.S. Duffy et G. Shen. *Stability and Structure of MgSiO₃ Perovskite to 2300-Kilometer Depth in Earth's Mantle*. Science, vol. 293, no. 5539, pages 2437–2440, 2001.
- [Sigle *et al.* 2006] W. Sigle, C. Sarbu, D. Brunner et M. Rühle. *Dislocations in plastically deformed SrTiO₃*. Philos. Mag., vol. 86, no. 29-31, page 4809, Octobre 2006.
- [Singh & Coble 1974] R.N. Singh et R.L. Coble. *Dynamic dislocation behavior in "pure" magnesium oxide single crystals*. Journal of Applied Physics, vol. 45, no. 3, pages 981–989, 1974.
- [Stacey & Davis 2004] F.D. Stacey et P.M. Davis. *High pressure equations of state with applications to the lower mantle and core*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 142, no. 3, pages 137–184, 2004.
- [Steinberger & Calderwood 2001] B.M. Steinberger et A.R. Calderwood. *Mineral physics constraints on viscous flow models of mantle flow*. In J. Conf. Abs, volume 6, pages 423–424, 2001.

- [Steinberger & Calderwood 2006] B. Steinberger et A.R. Calderwood. *Models of large-scale viscous flow in the Earth's mantle with constraints from mineral physics and surface observations*. Geophysical Journal International, vol. 167, no. 3, pages 1461–1481, 2006.
- [Stixrude & Cohen 1993] L. Stixrude et R.E. Cohen. *Stability of orthorhombic $MgSiO_3$ perovskite in the Earth's lower mantle*. Nature, vol. 364, no. 6438, pages 613–616, 1993.
- [Stixrude & Lithgow-Bertelloni 2012] L. Stixrude et C. Lithgow-Bertelloni. *Geophysics of Chemical Heterogeneity in the Mantle*. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, vol. 40, no. 1, pages 569–595, may 2012.
- [Stixrude 2005] L. Stixrude. *Structure and Freezing of $MgSiO_3$ Liquid in Earth's Lower Mantle*. Science, vol. 310, no. 5746, pages 297–299, oct 2005.
- [Suetsugu *et al.* 2009] D. Suetsugu, T. Isse, S. Tanaka, M. Obayashi, H. Shiobara, H. Sugioka, T. Kanazawa, Y. Fukao, G. Barruol et D. Reymond. *South Pacific mantle plumes imaged by seismic observation on islands and seafloor*. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, vol. 10, no. 11, 2009.
- [Suzuki *et al.* 1995] T. Suzuki, H. Koizumi et H. O. K. Kirchner. *Plastic flow stress of bcc transition metals and the Peierls potential*. Acta Metall. Mater., vol. 43, no. 6, page 2177, 1995.
- [Sweeney & Heinz 1993] J.S. Sweeney et D.L. Heinz. *Melting of iron-magnesium-silicate perovskite*. Geophysical research letters, vol. 20, no. 9, pages 855–858, 1993.
- [Tang *et al.* 1998] M. Tang, L.P. Kubin et G.R. Canova. *Dislocation mobility and the mechanical response of bcc single crystals : a mesoscopic approach*. Acta Materialia, vol. 46, no. 9, pages 3221–3235, 1998.
- [Tschauner *et al.* 2014] O. Tschauner, C. Ma, J.R. Beckett, C. Prescher, V.B. Prakapenka et G.R. Rossman. *Discovery of bridgmanite, the most abundant mineral in Earth, in a shocked meteorite*. Science, vol. 346, no. 6213, pages 1100–1102, 2014.
- [Tsuchiya *et al.* 2004] T. Tsuchiya, J. Tsuchiya, K. Umemoto et R.M. Wentzcovitch. *Phase transition in $MgSiO_3$ perovskite in the Earth's lower mantle*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 224, no. 3, pages 241–248, 2004.
- [Van der Hilst *et al.* 1997] R.D. Van der Hilst, S. Widiyantoro et E.R. Engdahl. *Evidence for deep mantle circulation from global tomography*. Nature, vol. 386, pages 578–584, 1997.

- [van der Hilst 1999] R.D. van der Hilst. *Compositional Heterogeneity in the Bottom 1000 Kilometers of Earth's Mantle : Toward a Hybrid Convection Model*. Science, vol. 283, no. 5409, pages 1885–1888, mar 1999.
- [Vitek 1968] V. Vitek. *Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals*. Philosophical Magazine, vol. 18, no. 154, pages 773–786, 1968.
- [Wang *et al.* 1992] Y. Wang, F. Guyot et Robert C. Liebermann. *Electron Microscopy of (Mg,Fe)SiO₃ Perovskite : Evidence for Structural Phase Transitions and Implications for the Lower Mantle*. Journal of Geophysical Research, vol. 97, pages 12,327 – 12,347, August 1992.
- [Wang *et al.* 1993] Z. Wang, S.I. Karato et K. Fujino. *High temperature creep of single crystal strontium titanate (SrTiO₃) : a contribution to creep systematics in perovskites*. Physics of the earth and planetary interiors, vol. 79, no. 3, pages 299–312, 1993.
- [Wang *et al.* 1999] Z.C. Wang, C. Dupas-Bruzek et S.I. Karato. *High temperature creep of an orthorhombic perovskite—YAlO₃*. Physics of the earth and planetary interiors, vol. 110, no. 1, pages 51–69, 1999.
- [Wang 1996] J.N. Wang. *A microphysical model of Harper-Dorn creep*. Acta materialia, vol. 44, no. 3, pages 855–862, 1996.
- [Wang 2006] S.F. Wang. *Dislocation energy and Peierls stress : a rigorous calculation from the lattice theory*. Chinese Physics, vol. 15, no. 6, page 1301, 2006.
- [Weertman 1955] J. Weertman. *Theory of Steady-State Creep Based on Dislocation Climb*. Journal of Applied Physics, vol. 26, no. 10, pages 1213–1217, 1955.
- [Weertman 1957] J. Weertman. *Steady-state creep through dislocation climb*. Journal of Applied Physics, vol. 28, pages 362–364, 1957.
- [Weidner & Ito 1987] D.J. Weidner et E. Ito. *Mineral physics constraints on a uniform mantle composition*. High-Pressure Research in Mineral Physics : A Volume in Honor of Syun-iti Akimoto, pages 439–446, 1987.
- [Weidner *et al.* 2001] D.J. Weidner, J. Chen, Y. Xu, Y. Wu, M.T. Vaughan et L. Li. *Subduction zone rheology*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 127, no. 1, pages 67–81, 2001.

- [Weinberger *et al.* 2013] C.R. Weinberger, G.J. Tucker et S.M. Foiles. *Peierls potential of screw dislocations in bcc transition metals : Predictions from density functional theory*. Physical Review B, vol. 87, no. 5, page 054114, 2013.
- [Wenk *et al.* 2004] H.-R. Wenk, I. Lonardeli, J. Pehl, J. Devine, V. Prakapenka, G. Shen et H.-K. Mao. *In situ observation of texture development in olivine, ringwoodite, magnesiowüstite and silicate perovskite at high pressure*. Earth Planet. Sci. Lett., vol. 226, no. 3-4, page 507, Octobre 2004.
- [Wentzcovitch *et al.* 1993] R.M. Wentzcovitch, J.L. Martins et G.D. Price. *Ab initio molecular dynamics with variable cell shape : application to MgSiO₃*. Physical Review Letters, vol. 70, no. 25, page 3947, 1993.
- [Wentzcovitch *et al.* 1995] R.M. Wentzcovitch, N.L. Ross et G.D. Price. *Ab initio study of MgSiO₃ and CaSiO₃ perovskites at lower-mantle pressures*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 90, no. 1-2, pages 101–112, jul 1995.
- [Wentzcovitch *et al.* 1998] R.M. Wentzcovitch, B.B. Karki, S. Karato et C. R. S. Da Silva. *High pressure elastic anisotropy of MgSiO₃ perovskite and geophysical implications*. Earth and Planetary Science Letters, vol. 164, no. 1–2, pages 371 – 378, 1998.
- [Wentzcovitch *et al.* 2004] R.M. Wentzcovitch, B.B. Karki, M. Cococcioni et S.D. Gironcoli. *Thermoelastic Properties of MgSiO₃ Perovskite : Insights on the Nature of the Earth's Lower Mantle*. no. January, pages 1–4, 2004.
- [Wolf & Bukowinski 1985] G.H. Wolf et M.S.T. Bukowinski. *Ab initio structural and thermoelastic properties of orthorhombic MgSiO₃ perovskite*. Geophysical Research Letters, vol. 12, no. 12, pages 809–812, 1985.
- [Wright *et al.* 1992] K. Wright, G.D. Price et J.P. Poirier. *High-temperature creep of the perovskites CaTiO₃ and NaNbO₃*. Physics of the earth and planetary interiors, vol. 74, no. 1, pages 9–22, 1992.
- [Wu *et al.* 2005] L. Wu, Y. Zhu, S. Park, S. Shapiro, G. Shirane et J. Taftø. *Defect structure of the high-dielectric-constant perovskite CaCu₃Ti₄O₁₂*. Physical Review B, vol. 71, no. 1, page 014118, Janvier 2005.

- [Wysession *et al.* 1999] M.E. Wysession, A. Langenhorst, M.J. Fouch, K.M. Fischer, .I. Al-Eqabi, P.J. Shore et T.J. Clarke. *Lateral variations in compressional/shear velocities at the base of the mantle*. Science, vol. 284, no. 5411, pages 120–125, 1999.
- [Xu *et al.* 2011] J. Xu, D. Yamazaki, T. Katsura, X. Wu, P. Remmert, H. Yurimoto et S. Chakraborty. *Silicon and magnesium diffusion in a single crystal of MgSiO₃ perovskite*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, vol. 116, no. B12, 2011.
- [Yamazaki *et al.* 2000] D. Yamazaki, T. Kato, H. Yurimoto, E. Ohtani et M. Toriumi. *Silicon self-diffusion in MgSiO₃ perovskite at 25 GPa*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 119, no. 3, pages 299–309, 2000.
- [Yeganeh-Haeri *et al.* 1989] A. Yeganeh-Haeri, D.J. Weidner et E. Ito. *Elasticity of MgSiO₃ in the perovskite structure*. Science, vol. 243, no. 4892, pages 787–789, 1989.
- [Yeganeh-Haeri 1994] A. Yeganeh-Haeri. *Synthesis and re-investigation of the elastic properties of single-crystal magnesium silicate perovskite*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 87, no. 1, pages 111–121, 1994.
- [Zerr & Boehler 1994] A. Zerr et R. Boehler. *Constraints on the melting temperature of the lower mantle from high-pressure experiments on MgO and magnesioüstite*. 1994.
- [Zhao 2004] D. Zhao. *Global tomographic images of mantle plumes and subducting slabs : insight into deep Earth dynamics*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, vol. 146, no. 1, pages 3–34, 2004.